

01:05

## Атомная структура ядра $1/3\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ сверхдислокации и особенности призматического скольжения в $Ti_3Al$

© Л.И. Яковенкова, Л.Е. Карькина, М.Я. Рабовская

Институт физики металлов УрО РАН,  
620219 Екатеринбург, Россия  
e-mail: yakovenkova@imp.uran.ru

(Поступило в Редакцию 12 февраля 2002 г. В окончательной редакции 16 июля 2002 г.)

Методом компьютерного моделирования изучена структура ядра  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  сверхчастичной дислокации в плоскости призмы в сверхструктуре  $D0_{19}$ . Используются потенциалы межатомного взаимодействия, полученные на основе метода „погруженного атома“ для  $Ti_3Al$ . Обнаружено, что в неэквивалентных плоскостях призмы  $\{0\bar{1}10\}$  (типа I', I и II) существует три различных конфигурации ядра сверхчастичной дислокации. Показано, что для дислокации винтовой и краевой ориентации ядро является планарным в плоскости призмы I типа и непланарным в плоскостях призмы I и II типов. Проведено сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных по подвижности сверхдислокаций в  $Ti_3Al$ .

### Введение

Пластическая деформация интерметаллидов с различным типом решетки определяется структурой ядра сверхдислокаций. Хорошо известно, что при упорядочении происходят увеличение вектора Бюргерса дислокации и соответственно возрастание ее упругой энергии. Многообразие планарных дефектов (антифазные границы — APB, сверхструктурные дефекты упаковки — SISF, комплексные дефекты упаковки — CSF), различные соотношения между их энергиями приводят к появлению нескольких типов расщеплений сверхдислокаций, конфигурация которых во многом зависит от особенностей  $\gamma$ -поверхности. Для построения такой поверхности производится мысленный разрез модельного кристаллита вдоль выбранной кристаллографической плоскости и смещение верхней части по отношению к нижней на вектор  $\mathbf{f}$ , параллельный плоскости разреза. Разность энергии кристаллита с планарным дефектом и идеальным, приходящаяся на единицу площади, и есть энергия, соответствующая выбранному вектору  $\mathbf{f}$  (обобщенный дефект упаковки). В сплавах со сверхструктурой  $D0_{19}$  в ряде плоскостей отсутствуют локальные минимумы на  $\gamma$ -поверхности, поэтому будет изменяться не только ширина расщепления на частичные дислокации, но величина их вектора Бюргерса, а часто и число частичных дислокаций при расщеплении сверхчастичных дислокаций. В подобных случаях только имитационный эксперимент с использованием компьютерного моделирования позволяет детально изучить структуру ядра дислокации, провести сравнение энергии дислокации в различных конфигурациях.

Наиболее плотно упакованными плоскостями в  $Ti_3Al$  являются плоскости призмы  $\{0\bar{1}10\}$ , поскольку  $c/a < 1.633$ . При деформации монокристаллов  $Ti_3Al$ , ориентированных для призматического скольжения, предел текучести имеет значение  $\sigma_y\{0\bar{1}10\} \sim 150$  МПа, пластичность достигает величины  $\sim 20\%$  [1,2]. Предел

текучести имеет нормальную слабо падающую с ростом температуры зависимость. Подобная зависимость предела текучести от температуры наблюдается и при базисном скольжении, однако пластичность при комнатной температуре существенно меньше. Анализ геометрии скольжения показал, что как при базисном, так и при призматическом скольжении деформация осуществляется движением  $\mathbf{a}$ -сверхдислокаций с вектором Бюргерса  $1/3\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ . Электронно-микроскопические исследования [3] показали, что  $\mathbf{a}$ -сверхдислокация расщеплена в плоскостях призмы и базиса на две сверхчастичные  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ , связанные полосой антифазной границы. Выявить тонкую структуру ядра сверхчастичной дислокации экспериментально не удалось.

Настоящая работа является продолжением исследования методом компьютерного моделирования структуры и энергетических характеристик планарных дефектов и дислокаций в интерметаллиде  $Ti_3Al$ . В [4,5] рассмотрены планарные дефекты в  $\{0001\}$ ,  $\{0\bar{1}10\}$ ,  $\{20\bar{2}1\}$  и  $\{11\bar{2}1\}$  плоскостях, в [6,7] — структура ядра  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  сверхчастичной дислокации в плоскости базиса.

Расчеты показали, что в плоскости базиса на  $\gamma$ -поверхности, определяющей зависимость энергии поверхностного дефекта от величины вектора сдвига, существует 3 локальных минимума, отвечающих антифазной границе (вектор сдвига  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ ), комплексному дефекту упаковки (вектор сдвига  $1/6\langle 0\bar{1}10 \rangle$ ) и сверхструктурному дефекту упаковки (вектор сдвига  $1/3\langle 0\bar{1}10 \rangle$ ). При компьютерном исследовании структуры ядра  $\mathbf{a}$ -сверхдислокации в плоскости базиса наличие этих минимумов определило характер расщепления дислокации в начальной конфигурации. Конечная конфигурация, полученная после проведения процедуры релаксации, существенно не изменилась для сверхчастичной дислокации с вектором Бюргерса  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ , ограничивающей антифазную границу. Для сверхчастичной дислокации винтовой и  $60^\circ$ -ной ориентации с вектором Бюргерса  $1/3\langle 0\bar{1}10 \rangle$ , ограничивающей сверхструктурный де-

фект упаковки, была получена непланарная структура ядра. Показано, что относительные смещения вблизи ядра этой дислокации распределяются одновременно в плоскостях призмы и в нескольких параллельных плоскостях базиса. Такая перестройка структуры ядра при компьютерном моделировании обусловлена тем, что ширина расщепления этой сверхчастичной дислокации в начальной конфигурации была порядка радиуса ядра.

Особенностью сверхструктуры  $D0_{19}$  является наличие нескольких неэквивалентных сечений в системе плоскостей  $\{0\bar{1}10\}$ , отличающихся взаимным расположением атомов двух сортов и соответственно различными значениями энергии поверхностных дефектов. В [4] было установлено, что  $\gamma$ -поверхности в плоскостях  $\{0\bar{1}10\}$  имеют один локальный низкоэнергетический минимум, отвечающий сдвигу, соответствующему антифазной границе. Это определяет расщепление  $\alpha$ -сверхдислокации с вектором Бюргерса  $1/3\langle 2\bar{1}10 \rangle$  в плоскости призмы на две сверхчастичные дислокации, ограничивающие антифазную границу. Целью настоящей работы является определение структуры ядра и энергетических характеристик сверхчастичной  $1/6\langle 2\bar{1}10 \rangle$  в плоскости призмы.

## Метод расчета

Компьютерное моделирование  $1/6\langle 2\bar{1}10 \rangle$  сверхчастичной дислокации в плоскостях призмы проводилось методом молекулярной динамики с использованием  $N$ -частичных потенциалов межатомного взаимодействия для  $Ti_3Al$ , полученных методом „погруженного атома“ (МПА) [4]. Полученные с применением этих потенциалов значения модулей упругости, энергий планарных дефектов (в частности, в плоскости базиса и призмы) совпадают с экспериментальными данными. С этими же потенциалами мы проводили моделирование планарных дефектов в  $(0001)$ ,  $\{0\bar{1}10\}$ ,  $\{20\bar{2}1\}$  и  $\{11\bar{2}1\}$  плоскостях [4] и  $1/3\langle 2\bar{1}10 \rangle$  сверхдислокации в плоскости базиса [5].

При моделировании винтовой сверхдислокации одно из ребер микрокристаллита совпадало с осью  $\langle 2\bar{1}10 \rangle$  рассматриваемой дислокации, для краевой сверхдислокации — с осью  $[0001]$ . Вдоль этих направлений на смещения атомов накладывались периодические граничные условия, вдоль других атомы закреплялись в положениях, соответствующих расщепленным дислокациям. Одна из сверхчастичных дислокаций помещалась в центр кристаллита, вторая находилась вне его на расстоянии, вычисленном в рамках теории упругости для значений антифазной границы в плоскостях призмы, соответствующих выбранному потенциалу межатомного взаимодействия, и присутствовала в рассматриваемом кристаллите своими полями смещений. В начальной конфигурации атомам кристаллита задавались смещения, создаваемые расщепленной сверхдислокацией. В результате компьютерных расчетов были определены положения атомов в решетке, соответствующие минимуму энергии рас-

сматриваемого кристаллита с введенной в него дислокацией. Область относительных смещений ближайших атомов, которая соответствует ядру дислокации, определена с использованием метода дифференциальных смещений. На рисунках представлена компонента смещений, не превосходящая  $0.05a$ .

## Выбор начальной конфигурации

Компьютерное моделирование ядра дислокации в различных структурах показывает, что результаты могут оказаться чувствительными к выбору начальной конфигурации. Зависимость от выбора начальной конфигурации определяется особенностями на  $\gamma$ -поверхности. В том случае, когда на  $\gamma$ -поверхности присутствует глубокий локальный минимум, соответствующий низкоэнергетическому дефекту упаковки, как правило, вектор Бюргерса частичной дислокации будет совпадать с вектором сдвига, определяющим этот дефект упаковки. В том случае, когда на  $\gamma$ -поверхности отсутствуют локальные минимумы, необходимо рассмотреть несколько вариантов начальных конфигураций, отличающихся положением оси, числом частичных дислокаций, величиной их векторов Бюргерса. Различные стартовые конфигурации необходимы для нахождения в результате релаксации структуры ядра, отвечающей минимальному значению энергии.

Сверхструктура  $D0_{19}$  может быть получена трансляцией в направлении  $\langle 01\bar{1}0 \rangle$  четырех плоскостей (II, I, I', I), отличающихся расположением атомов двух сортов и расстоянием между этими плоскостями (рис. 1). В [4] было показано, что энергия антифазной границы  $\xi$  в плоскости призмы II типа (сечение II на рис. 1) равна  $318 \text{ mJ/m}^2$ , тогда как в плоскостях призмы

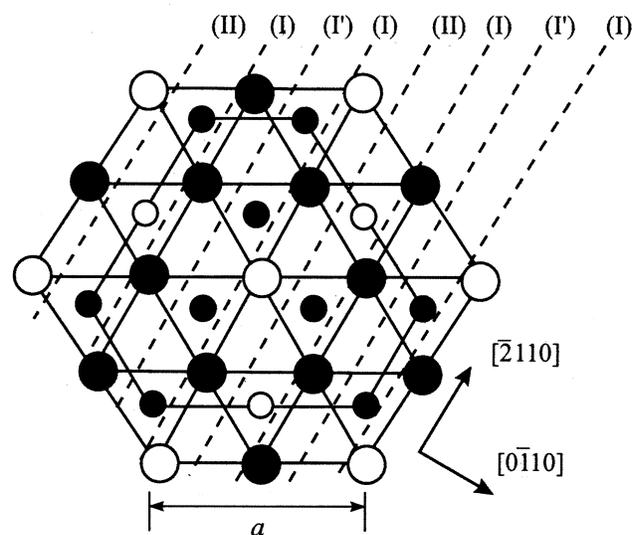


Рис. 1. Проекция на плоскость базиса элементарной ячейки сверхструктуры  $D0_{19}$  ( $\bullet$  — Ti,  $\circ$  — Al). Показаны сечения I, I' и II типа плоскости призмы  $\{0\bar{1}10\}$ .

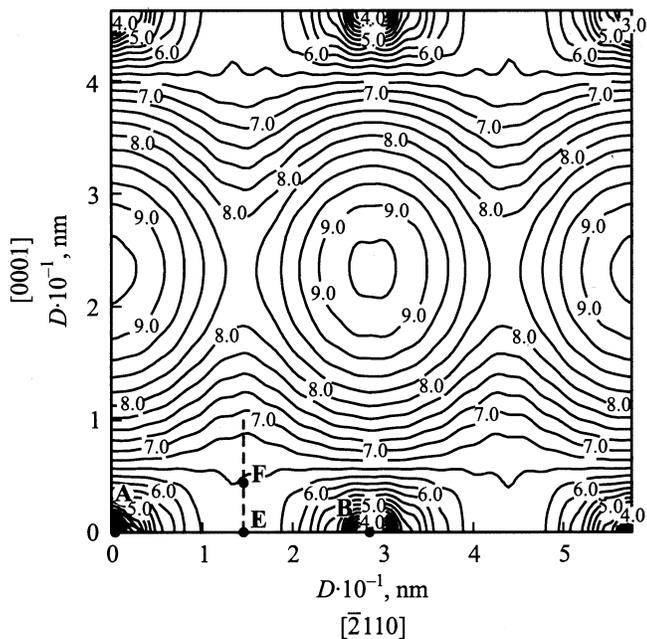


Рис. 2.  $\gamma$ -поверхность плоскости призмы I' типа в  $Ti_3Al$ .

I типа (сечения I, I' на рис. 1) —  $6 \text{ mJ/m}^2$ . Для тройки сечений I, I', I на рис. 1 энергия антифазных границ одинакова, но форма  $\gamma$ -поверхности и соответственно значения энергии поверхностных дефектов для сечений I и I' различны.  $\gamma$ -поверхности в плоскостях призмы I и II типов представлены в работе [4],  $\gamma$ -поверхности в плоскости призмы I' типа — на рис. 2. Точка A на этом рисунке соответствует идеальной решетке, точка B — сдвигу  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ , определяющему антифазную границу. В [4] показано, что на  $\gamma$ -поверхности в плоскости призмы I типа относительно низкие значения энергии поверхностных дефектов соответствуют сдвигам вдоль направления  $[2\bar{1}\bar{1}0]$  от точки A к точке B. При сдвигах вдоль других направлений образуются поверхностные дефекты с существенно более высоким значением энергии. Для плоскости призмы II типа [4] высота максимумов на  $\gamma$ -поверхности существенно ниже, что связано с различием межплоскостных расстояний, соответствующих этим типам сечений. Общий рисунок линий на изоконтурных картах, соответствующих плоскостям призмы I' и II типов, совпадают, поскольку расстояния между этими плоскостями одинаковые (рис. 1). Однако наличие атомов двух сортов в структуре  $D0_{19}$  делает эти плоскости неэквивалентными, что приводит к существенно более низким значениям энергии поверхностных дефектов для плоскости призмы I'. Минимальным значениям энергии дефекта упаковки соответствует область векторов сдвига вдоль направления  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ , а также от точки E до точки F на рис. 2, отвечающих сдвигу на вектор  $1/12[2\bar{1}\bar{1}x] = 1/12[2\bar{1}\bar{1}0] + x/12[0001]$ . Энергия дефекта упаковки вдоль этого направления изменяется медленно, достигая минимального значения

$\gamma = 650 \text{ mJ/m}^2$  при  $x = 1.038$  для плоскости призмы I' и значения  $\gamma = 910 \text{ mJ/m}^2$  при  $x = 1.45$  для плоскости призмы II типа.

Большая величина вектора Бюргерса сверхчастичной дислокации  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  указывает на то, что упругая энергия этой дислокации может быть существенно понижена при ее расщеплении на частичные. Однако характер расщепления сверхчастичной дислокации в плоскостях призмы не может быть определен однозначно, поскольку на  $\gamma$ -поверхности отсутствуют локальные минимумы. Тем не менее расщепление на частичные дислокации, соединенные нестабильным дефектом упаковки, реализуется как при рассмотрении структуры ядра дислокации в рамках теории упругости [8], так и при компьютерном моделировании [9].

Анализ  $\gamma$ -поверхности в плоскости призмы I типа показывает, что наиболее низкие значения энергии дефекта упаковки получены при сдвиге вдоль направления  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ . Таким образом, векторы Бюргерса частичных дислокаций должны иметь винтовую компоненту, кратную вектору Бюргерса сверхчастичной дислокации  $b_n = (1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle)/n$ . Поскольку для других направлений векторов сдвига значения энергии дефекта упаковки существенно выше, краевую компоненту вектора Бюргерса частичных дислокаций можно положить равной нулю. Число  $n$  частичных дислокаций варьировалось от 2 до 10. Для всех значений  $n$  суммарная ширина расщепления сверхчастичной дислокации  $D$  выбиралась равной  $D \sim 5 \cdot a/2$ , тогда для  $n = 10$  расстояние между двумя соседними частичными дислокациями  $d$  равняется  $d \sim a/4$  ( $a = 0.5765 \text{ nm}$  — параметр решетки  $Ti_3Al$ ). В этом случае  $d \sim r_0$ , где  $r_0$  — радиус ядра дислокации. Таким образом, вариант расщепления на  $n = 10$  частичных дислокаций эквивалентен непрерывному распределению плотности вектора Бюргерса.

Поскольку для плоскостей призмы I' и II типов существует область векторов сдвига (рис. 2), соответствующих сравнительно низким значениям энергий поверхностных дефектов, рассматривалось два варианта расщепления сверхчастичной  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  дислокации винтовой и краевой ориентации в этих плоскостях. Один вариант расщепления на  $n$  винтовых (или краевых) частичных дислокаций с равными векторами Бюргерса аналогичен рассмотренному для плоскости призмы I типа. Второй вариант — расщепление на 2 группы частичных дислокаций. Суммарный вектор Бюргерса 1-й группы частичных дислокаций соответствует вектору сдвига AF, отвечающему локальному минимуму вдоль линии EF на  $\gamma$ -поверхности (рис. 2); суммарный вектор Бюргерса 2-й группы частичных дислокаций равен вектору сдвига FB. Каждая группа имеет одинаковое число частичных дислокаций с равными векторами Бюргерса. Таким образом, частичные дислокации в обеих группах имеют одинаковые винтовые (или краевые) компоненты и одинаковые по модулю, но противоположные по направлению, краевые (или винтовые) компоненты вектора Бюргерса.

## Винтовая и краевая дислокации в плоскости призмы I типа

На рис. 3 представлена зависимость выигрыша энергии при расщеплении краевой сверхчастичной дислокации на  $n$  частичных дислокаций в результате релаксации. Кривая 1 на рис. 3 соответствует краевой дислокации в плоскости призмы I типа. Можно видеть, что энергия при  $n = 2$  имеет более высокое значение. При  $n > 3$  энергия дислокационной конфигурации после релаксации слабо зависит от числа частичных дислокаций в начальной конфигурации. Анализ показывает, что характер распределения краевой компоненты смещений вблизи ядра краевой сверхчастичной дислокации аналогичен для случаев  $n = 2-10$ . Область ядра  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  дислокации распространяется в плоскости призмы на  $\sim 4.5a$  для  $n = 2$  и  $\sim 5.0a$  для  $n = 10$ . Вдоль направления перпендикулярного плоскости призмы область ядра распределена в трех соседних плоскостях призмы. По соотношению размеров области ядра краевой дислокации можно говорить о том, что оно является плоским. Однако максимальные смещения для краевой дислокации локализованы не в той плоскости призмы I типа, где расщеплена исходная сверхдислокация, а в двух соседних плоскостях призмы I' и II типов. Анализ распределения краевой компоненты смещений вблизи ядра краевой сверхчастичной  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  дислокации в плоскости призмы как для  $n = 10$ , так и для  $n = 2$  показывает, что выделенная область максимальных относительных смещений вдоль плоскости  $\{0\bar{1}10\}$  имеет асимметричную форму. Наблюдаемая асимметрия ядра отражает, по-видимому, дискретный характер распределения плотности вектора Бюргерса эквивалентный расщеплению на две частичные дислокации в плоскости призмы.

Анализ распределения винтовой компоненты смещений в области ядра винтовой сверхчастичной дислокации для  $n = 10$  показывает, что ядро сверхчастичной

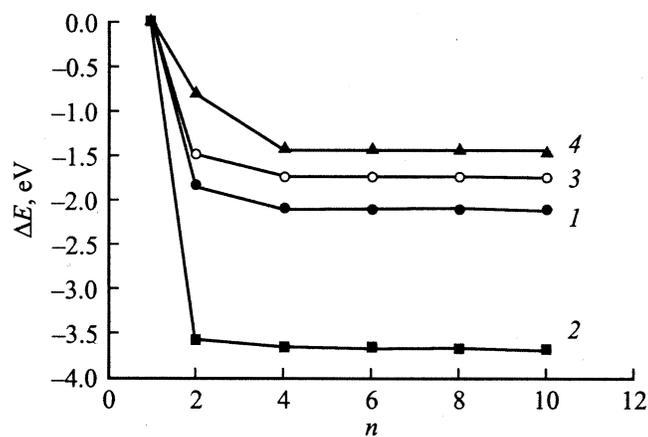


Рис. 3. Выигрыш энергии при расщеплении краевой сверхчастичной дислокации на  $n$  частичных дислокаций.

$1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  дислокации вытянуто вдоль плоскости призмы  $\{0\bar{1}10\}$  на расстоянии  $\sim 3.2a$  и вдоль плоскости базиса  $(0001)$  на расстоянии  $\sim 1.7a$ . Несмотря на то что область смещений вдоль направления  $\{0\bar{1}10\}$  вдвое меньше, чем вдоль направления  $[0001]$ , ядро дислокации не может быть охарактеризовано как планарное, так как заметные относительные смещения присутствуют в восьми плоскостях параллельных плоскости призмы, содержащей антифазную границу. Для винтовой сверхчастичной дислокации для  $n = 2$  характер распределения смещений аналогичен случаю  $n = 10$ . Однако для  $n = 2$  можно отметить более четко выраженное неоднородное распределение смещений вдоль плоскости призмы эквивалентно расщеплению на две частичные дислокации.

## Винтовая и краевая дислокации в плоскости призмы I' типа

Кривая 2 на рис. 3 — выигрыш энергии при расщеплении краевой  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  сверхчастичной дислокации на  $n$  частичных дислокаций краевой ориентации в плоскости призмы I'. Видна слабая зависимость выигрыша энергии от числа частичных дислокаций в начальной конфигурации. Подобного вида зависимость оказалась справедливой и в случае расщепления  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  дислокации на  $n$  частичных дислокаций смешанной ориентации.

На рис. 4 показана структура ядра краевой  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  дислокации расщепленной на 2 (а) и 10 (б) частичных дислокаций (приведена краевая компонента смещений). В обоих случаях ядро может быть охарактеризовано как плоское. Однако если для  $n = 10$  максимальные смещения сосредоточены в одной плоскости призмы, содержащей антифазную границу, то при уменьшении числа  $n$  частичных дислокаций появляются смещения в параллельных плоскостях призмы (рис. 4, а). Для случая частичных дислокаций смешанной ориентации картина смещений вблизи ядра аналогична.

На рис. 4, с показана структура ядра винтовой сверхдислокации для  $n = 10$  (приведена винтовая компонента смещений). Максимальный размер области ядра вдоль направления  $[0001]$  составляет величину  $\sim 3a$  вдоль направления  $[0\bar{1}10]$   $\sim 1.1a$ . Полученное ядро можно охарактеризовать как планарное. Для  $n = 2$  наблюдается асимметрия ядра, отражающая дискретный характер распределения плотности вектора Бюргерса на две частичные дислокации в плоскости призмы I' типа. При расщеплении винтовой  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$  дислокации на частичные дислокации смешанной ориентации не только энергии, но и структура ядра изменяется существенно.

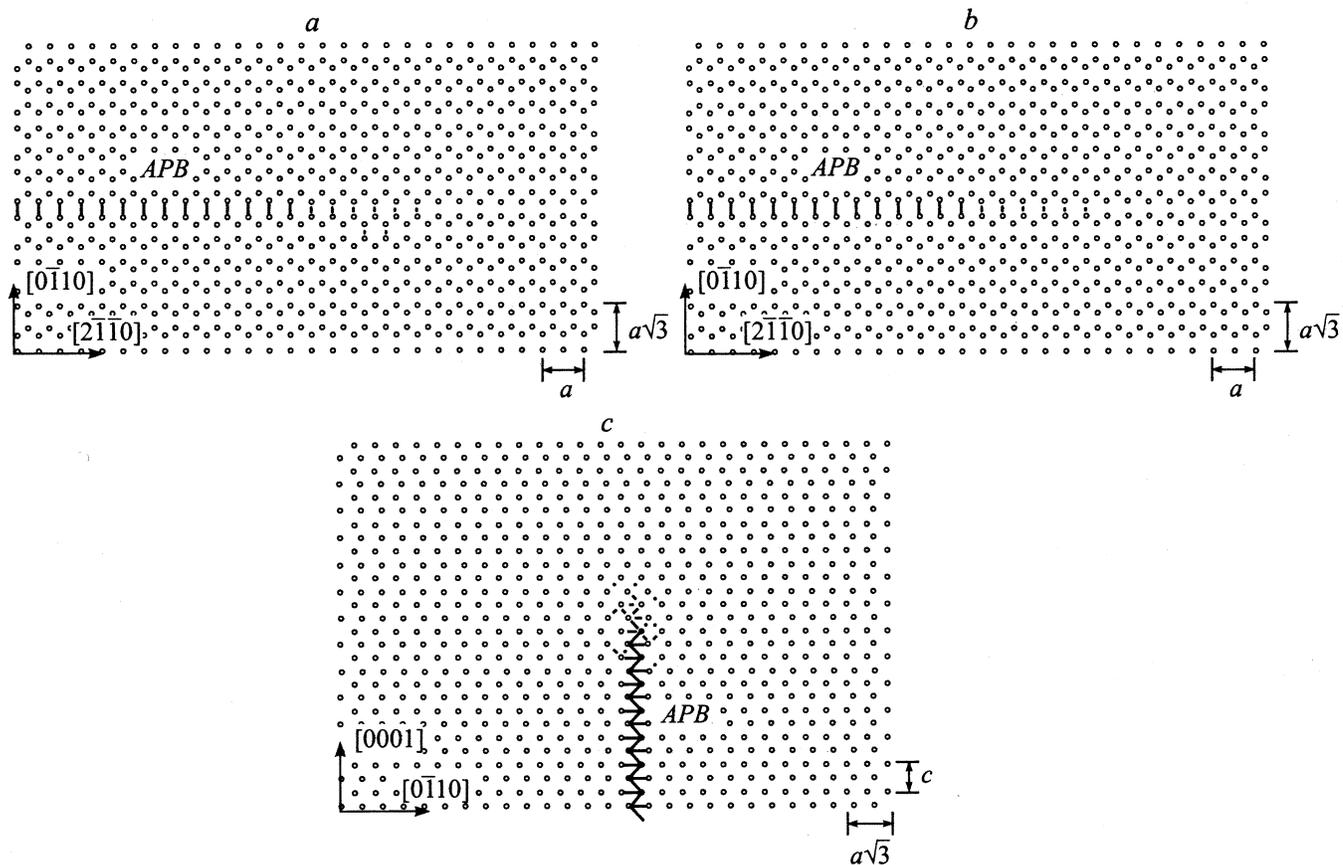


Рис. 4. Структура ядра краевой (*a, b*) и винтовой (*c*) сверхчастичной  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  дислокации в плоскости призмы I' типа;  $n = 2$  (*a*); 10 (*b, c*).

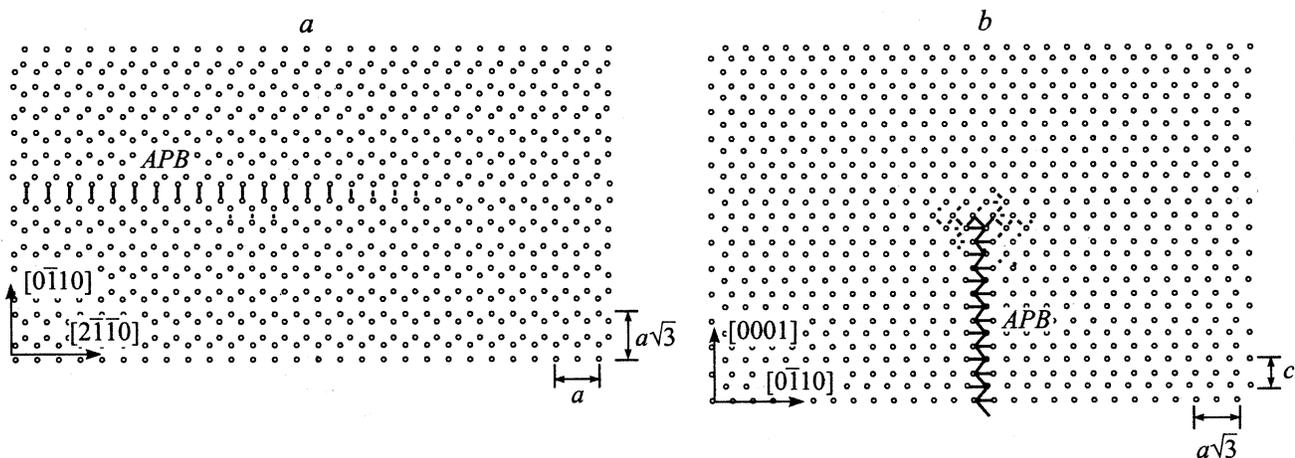


Рис. 5. Структура ядра краевой (*a*) ( $n = 10$ ) и нерасщепленной винтовой (*b*) сверхчастичной  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  дислокации в плоскости призмы II типа.

### Винтовая и краевая дислокации в плоскости призмы II типа

Кривые 3, 4 на рис. 3 — выигрыш энергии при расщеплении краевой  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  сверхчастичной дислокации в плоскости призмы II типа на  $n$  частичных

дислокаций краевой ориентации (кривая 3) и смешанной ориентации (кривая 4). Энергия  $\Delta E$  уменьшается с увеличением числа дислокаций  $n$  в начальной конфигурации. Область ядра краевой дислокации для  $n = 10$  показана на рис. 5, *a*. Размеры ядра близки для всех значений  $n = 2-10$  как вдоль направления  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ , так и

вдоль  $[0\bar{1}10]$ . Анализ распределения краевой компоненты смещений показывает, что ядро является плоским, хотя заметные относительные смещения распределены в соседних плоскостях призмы  $I'$  типа, параллельных исходной плоскости призмы, содержащей антифазную границу.

В плоскости призмы II типа была вычислена энергия и изучена структура ядра краевой сверхчастичной дислокации, расщепленной на  $n$  частичных дислокаций смешанной ориентации. Кривая 4 на рис. 3 — выигрыш энергии при расщеплении дислокации в этом случае. Характер распределения смещений аналогичен представленному на рис. 5, *a*.

Из рис. 3 видно для плоскости призмы II типа выигрыш энергии при расщеплении краевой сверхдислокации минимален. Расщепление же винтовой сверхдислокации оказалось невыгодным. После релаксации энергия нерасщепленной дислокации оказалась ниже, чем для расщепленной на  $n$  частичных. На рис. 5, *b* представлена структура ядра после релаксации винтовой дислокации, полученной из начальной конфигурации нерасщепленной сверхдислокации. Для этой конфигурации область максимальных относительных смещений вдоль направления  $[0\bar{1}10]$  составляет  $\approx 2.5a$ , вдоль  $[0001]$  направления —  $\approx 2.4a$ . Таким образом, ядро является непланарным.

## Обсуждение результатов

Структура ядра дислокаций в плоскости призмы изучалась в металлах с гексагональной плотноупакованной решеткой (ГПУ) в [10] с использованием потенциалов для Mg, Ti, Be, а также в модельном упорядоченном сплаве со сверхструктурой  $D0_{19}$  в [11]. Результаты компьютерного моделирования показали, что как в ГПУ металлах, так и в сверхструктуре  $D0_{19}$  наблюдается плоская конфигурация ядра *a*-сверхдислокации. В обоих случаях была изучена только одна конфигурация, соответствующая плоскости призмы  $I'$  типа (в обозначениях, используемых в данной работе).

Проведенное в настоящей работе компьютерное моделирование структуры ядра сверхчастичной  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  дислокации, ограничивающей полосу антифазной границы в плоскости призмы, показало, что энергия расщепленной конфигурации сверхдислокации винтовой и краевой ориентации в плоскости призмы  $I'$  типа ( $\xi \approx 6 \text{ мДж/м}^2$ ) существенно ниже, чем в плоскостях призмы I ( $\xi \approx 6 \text{ мДж/м}^2$ ) и II типов ( $\xi \approx 318 \text{ мДж/м}^2$ ). Это соотношение сохраняется для всех значений  $n$ . Очевидно, что более низкое значение антифазной границы и энергии обобщенного дефекта упаковки в плоскости призмы  $I'$  типа определяет и более низкое значение энергии дислокации. Анализ структуры ядра краевой и винтовой сверхчастичной дислокации в этой плоскости показал, что ядро является планарным, т.е. область

максимальных смещений локализована вблизи плоскости призмы  $I'$ , содержащей антифазную границу. Это предполагает низкое значение напряжения Пайерлса для начала движения сверхдислокации, обеспечивая ее высокую подвижность в плоскости призмы  $I'$  типа. Высокая подвижность *a*-типа дислокаций обеспечивает наблюдаемое экспериментально низкое значение предела текучести в этой плоскости в  $\text{Ti}_3\text{Al}$ .

Выигрыш энергии при расщеплении сверхчастичной дислокации краевой ориентации в плоскостях I и II типов оказался меньше, а для сверхдислокации винтовой ориентации в плоскости призмы II типа энергетически более выгодной оказалась нерасщепленная конфигурация. Наиболее существенным образом отличается структура ядра этих дислокаций. Сверхчастичная дислокация как краевой, так и винтовой ориентации в этих плоскостях призмы имеет непланарную структуру ядра (рис. 5). Непланарная структура ядра для винтовой дислокации была получена и для других типов решеток (ГЦК [12], ОЦК [9], упорядоченные сплавы со сверхструктурой  $L1_2$  [12] и ГПУ кристаллы [10]). Такой характер расщепления реализуется в том случае, когда энергия дефекта упаковки в плоскости скольжения дислокации высока и энергетически выгодным становится ее перерасщепление в нескольких плоскостях, проходящих через линию дислокации.

Как правило, дислокации невинтовой ориентации имеют планарный характер. Для  $\text{Ti}_3\text{Al}$  непланарный характер получен и для краевой дислокации в плоскостях призмы I и II типов. Такой характер расщепления краевой дислокации обусловлен особенностями  $\gamma$ -поверхности в соседних параллельных плоскостях призмы. Например, для плоскости призмы I типа энергия антифазной границы низкая ( $\xi \approx 6 \text{ мДж/м}^2$ ), поэтому расщепление  $1/3\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  на две сверхчастичные является выгодным. Энергия дефекта упаковки в этой плоскости очень высока, существенно выше, чем в соседних плоскостях призмы  $I'$  и II типов, поэтому расщепление  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  сверхчастичной дислокации происходит не в плоскости призмы I типа, а в ближайших к ней плоскостях призмы  $I'$  и II типов. Для плоскости призмы II типа также энергетически выгодной является перестройка ядра *a*-дислокации, сопровождающаяся перераспределением смещений в ближайшую параллельную плоскость  $I'$  типа, имеющую более низкое значение энергии обобщенного дефекта упаковки.

Анализ смещений вблизи области ядра краевой сверхчастичной дислокации в плоскостях призмы I,  $I'$  и II типов (рис. 4, 5, *a*) показывает, что для всех значений  $n$  числа частичных дислокаций распределение смещений является неоднородным вдоль плоскости призмы и может быть охарактеризовано как расщепление на две частичные дислокации. Экспериментально расщепление сверхчастичной дислокации  $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  в плоскости призмы на две частичные дислокации наблюдалось в [3].

Непланарный характер ядра сверхчастичной дислокации в плоскостях I и II типов предполагает их низкую подвижность. Таким образом, в результате компьютерного моделирования показано, что в плоскости призмы  $\{01\bar{1}0\}$  могут наблюдаться как скользящие, так и заблокированные сверхдислокации с вектором Бюргерса  $1/3\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ . Дислокации а-типа с различной подвижностью в плоскости призмы наблюдались в экспериментах *in situ* в [2]. В соответствии с проведенными расчетами подвижные дислокации могут быть отождествлены с конфигурацией в плоскости призмы I' типа, тогда как заблокированные дислокации в плоскостях призмы I и/или II типа. Для начала движения дислокации с непланарным ядром необходимо перераспределение смещений в области ядра, что в конечном итоге приводит к скачкообразному ее движению. Поэтому наблюдение в экспериментах *in situ* такого движения дислокаций свидетельствует о непланарной структуре ядра. Скачкообразное движение наблюдалось в [2] для  $Ti_3Al$  и в ряде других материалов, например в ОЦК металлах, в области низких температур при движении винтовой дислокации с вектором Бюргерса  $1/2\langle 111 \rangle$  [9].

Таким образом, результаты компьютерного моделирования показали, что призматическое скольжение связано с движением  $1/3\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  сверхдислокаций в плоскости призмы I' типа. Энергия непланарных конфигураций в плоскостях призмы I и II типов выше, поэтому отсутствует необходимое условие для перестройки скользящей конфигурации в заблокированную. Именно тот факт, что скользящая конфигурация а-сверхдислокации в плоскости призмы I' типа имеет наименьшую энергию, а перестройка их в заблокированную конфигурацию является энергетически невыгодной, что объясняет слабую температурную зависимость предела текучести, наблюдаемую экспериментально при призматическом скольжении в  $Ti_3Al$  [1].

## Заключение

В работе приведен анализ структуры ядра сверхдислокаций с вектором Бюргерса  $1/3\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$  в плоскости призмы  $\{01\bar{1}0\}$ .

1. В результате компьютерного моделирования обнаружено, что в неэквивалентных плоскостях призмы (типа I, I' и II) существуют три различные конфигурации ядра сверхчастичной дислокации.

2. Показано, что в плоскости призмы I' типа ядро является планарным для сверхдислокации как винтовой, так и краевой ориентации. Энергия таких конфигураций имеет наиболее низкое значение.

3. Установлено, что в плоскостях призмы I и II типов ядро как краевой, так и винтовой сверхдислокации является непланарным.

## Список литературы

- [1] Legros M., Couret A., Caillard D. // *Phil. Mag. A.* 1996. Vol. 73. N 1. P. 61–80.
- [2] Legros M., Couret A., Caillard D. // *Phil. Mag. A.* 1996. Vol. 73. N 1. P. 81–99.
- [3] Minonishi Y. // *Phil Mag. Let.* 1990. Vol. 62. P. 153–158.
- [4] Яковенкова Л.И., Кирсанов В.В., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я., Балашов А.Н. // *ФММ.* 2000. Т. 89. № 3. С. 31–38.
- [5] Карькина Л.Е., Яковенкова Л.И. // *Изв. АН Сер. физ.* 2001. Т. 65. № 6. С. 807–810.
- [6] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // *ФММ.* 2002. Т. 93. № 1. С. 1–9.
- [7] Карькина Л.Е., Яковенкова Л.И. // *Изв. АН. Сер. физ.* 2001. Т. 65. № 6. С. 842–845.
- [8] Kroupa F., Vitek V. // *Czech. J. Phys.* 1964. Vol. B14. P. 337–346.
- [9] Vitek V. // *Crystal Lattice Defects.* 1974. Vol. 5. P. 1–34.
- [10] Vitek V., Igarashi M. // *Phil. Mag. A.* 1991. Vol. 63. N 5. P. 1059–1075.
- [11] Cserti I., Khantha M., Vitek V. et al. // *Mat. Sci. Eng.* 1992. Vol. A152. P. 95–102.
- [12] Карькина Л.Е., Гринберг Б.А., Яковенкова Л.И. // *ФММ.* 1986. Т. 61. С. 695–701.