

Структура ядра сверхдислокаций в плоскостях пирамиды I и II типов в интерметаллиде Ti_3Al . Скользящие дислокации и дислокационные барьеры

© 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 17 декабря 2002 г. В окончательной редакции 20 февраля 2003 г.)

Для интерметаллида Ti_3Al со сверхструктурой $D0_{19}$ с использованием N -частичных потенциалов межатомного взаимодействия вычислены энергии поверхностных дефектов в плоскостях базиса, призмы и пирамиды I и II типов. Проанализирована структура ядра $2c + a$ сверхдислокаций краевой и винтовой ориентаций в скользящей конфигурации и в конфигурации дислокационного барьера в плоскостях пирамиды I $\{20\bar{2}1\}$ и II типов $\{\bar{1}\bar{1}21\}$ в Ti_3Al .

Введение

Алюминиды титана, такие как $TiAl$, Ti_3Al , $Ti_3(Al, Nb)$ обладают уникальным набором удельных прочностных характеристик при повышенных температурах, коррозионной стойкостью, хорошими усталостными свойствами, что делает их перспективными для практического применения в аэрокосмической, автомобильной и др. промышленности. Интерметаллид Ti_3Al , имеющий упорядоченную гексагональную сверхструктуру $D0_{19}$ (α_2 -фаза) является основной составляющей ряда однофазных и двухфазных сплавов (в том числе и с ламельной структурой). Механические испытания при комнатной температуре показывают [1], что поликристаллический Ti_3Al имеет высокий предел текучести ≈ 500 – 800 МПа и удлинение до разрушения 0.3–5%. Таким образом, для Ti_3Al , так же как и для других алюминидов титана, существует проблема низкотемпературной хрупкости. Электронно-микроскопические исследования показали, что деформация поликристалла α_2 -фазы осуществляется в основном движением a -дислокаций с вектором Бюргера $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в плоскостях базиса (0001) и призмы $\{\bar{1}100\}$.

Экспериментальные исследования последних лет [2–5] обнаружили сильную ориентационную зависимость предела текучести σ_y , существование сложной структуры дислокационного ансамбля, включающей многообразие векторов Бюргера и плоскостей скольжения сверхдислокаций в монокристаллическом Ti_3Al . В зависимости от условий эксперимента (температура, скорость деформации и т.д.) реализуется скольжение a , $c + a$, $2c + a$ сверхдислокаций в плоскостях базиса, призмы и пирамиды. В [2–5] было установлено, что предел текучести при комнатной температуре составляет величину 1000–1300 МПа (пластичность $\varepsilon < 10\%$) для близких к c -направлению [0001] ориентировках оси деформирования, тогда как при других ориентировках $\sigma_y \sim 40$ – 250 МПа (пластичность $\varepsilon \geq 20\%$). Анализ гео-

метрии скольжения показал, что в первом случае деформация осуществляется скольжением $2c + a$ сверхдислокаций с вектором Бюргера $1/3\langle 11\bar{2}6 \rangle$ в плоскостях пирамиды I $\{20\bar{2}1\}$ и II типов $\{\bar{1}\bar{1}21\}$. Во втором случае, когда предел текучести существенно ниже, деформация осуществляется, как и в поликристаллах Ti_3Al , скольжением a -сверхдислокаций в плоскостях базиса и призмы.

В этих двух случаях была также обнаружена различная температурная зависимость предела текучести. Для плоскостей базиса и призмы σ_y имеет нормальную слабо падающую с ростом температуры зависимость. В исследованном температурном интервале при базисном скольжении пластичность несколько ниже, чем при призматическом скольжении. Для плоскостей пирамиды на кривой зависимости предела текучести от температуры наблюдается максимум при $T \sim 500^\circ$ [4] и $\sim 850^\circ$ C [2,3]. В области температур от комнатной до температуры пика наблюдается аномальное возрастание предела текучести с температурой, характерное для многих интерметаллидов со сверхструктурами $L1_2$, $L1_0$, $D0_{19}$.

Электронно-микроскопические исследования показали [6], что 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 (APB). Однако в экспериментах *in situ* наблюдалось также расщепление a -сверхдислокации в плоскости базиса с образованием полосы сверхструктурного дефекта упаковки (SISF). В [7] установлена возможность расщепления $a/2$ сверхчастичной дислокации в плоскости призмы на две частичные, однако векторы Бюргера этих дислокаций определены не были.

В [2] при электронно-микроскопическом изучении в слабом пучке удалось показать, что $2c + a$ сверхдислокации в Ti_3Al расщеплены на две сверхчастичные в плоскости $\{2\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$, расстояние между которыми ≤ 16 nm, тогда как в $Ti_3(Al, Nb)$ это расстояние составило величину ~ 50 nm. Соответствующие значения энергии ан-

тифазной границы в плоскости пирамиды II типа равны $\xi_{\{2\bar{1}\bar{1}\}} \approx 240$ и $74 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$. К сожалению, имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные не могут дать детальной информации о тонкой структуре ядра $\mathbf{c} + \mathbf{a}/2$ сверхдислокаций в плоскостях $\{20\bar{2}1\}$ и $\{2\bar{1}11\}$ и не позволяют прояснить механизм дислокационных превращений, ответственных за особенности деформационного поведения в пирамидальных плоскостях скольжения монокристаллического Ti_3Al . Использование компьютерного моделирования дислокаций в различных плоскостях скольжения дает возможность проанализировать структуру ядра дислокаций и выявить дислокационные конфигурации с наиболее низкой энергией. Такие расчеты с использованием метода молекулярной динамики были проведены нами [8–11] для \mathbf{a} -сверхдислокаций в плоскостях базиса и призмы.

Целью настоящей работы является определение структуры ядра и энергетических характеристик сверхчастичной $1/6(2\bar{1}\bar{1}6)$ дислокации в плоскостях пирамиды I и II типов методом молекулярной динамики с использованием N -частичных потенциалов межатомного взаимодействия для Ti_3Al , полученных методом „погруженного атома“ [12,13]. В настоящей работе проанализированы особенности структуры γ -поверхностей и изоэнергетических контурных карт [12–14], позволяющих сделать выводы о существовании стабильных поверхностных дефектов (антифазные границы, дефекты упаковки) и выявить возможные типы расщепления $2\mathbf{c} + \mathbf{a}$ сверхдислокации в плоскостях пирамиды; изучена структура ядра $2\mathbf{c} + \mathbf{a}$ сверхдислокации винтовой и краевой ориентации.

Результаты компьютерного моделирования

Компьютерное моделирование ядра дислокации в различных структурах показывает, что результаты могут оказаться чувствительными к выбору начальной конфигурации. Большая величина вектора Бюргерса сверхчастичной дислокации предполагает энергетическую выгоду ее расщепления на две или большее число частичных дислокаций (выигрыш энергии при расщеплении тем больше, чем больше вектор Бюргерса и меньше энергия дефекта упаковки SF).

Выбор начальной конфигурации определяется особенностями на γ -поверхности в рассматриваемой плоскости. 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 кристаллита без дефекта, приходящейся на единицу площади, и есть энергия, соответствующая выбранному вектору \mathbf{f} (энергия обобщенного дефекта упаковки). В том случае, когда

на γ -поверхности присутствует глубокий локальный минимум, соответствующий низкоэнергетическому дефекту упаковки, как правило, вектор Бюргерса частичной дислокации совпадает с вектором сдвига, определяющим этот дефект. В том случае, когда на γ -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.

В плоскостях пирамиды I и II типов изучалась структура ядра $\mathbf{c} + \mathbf{a}/2$ сверхчастичной дислокации с вектором Бюргерса $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ винтовой ориентации с осью $[\bar{1}\bar{1}26]$ и краевой ориентации с осями $[\bar{1}\bar{1}20]$ и $[\bar{1}\bar{1}00]$ соответственно. Выбор таких ориентаций обусловлен анализом электронно-микроскопических данных по дислокационной структуре деформированного монокристаллического Ti_3Al . В [3] после деформации монокристаллов Ti_3Al с-ориентации $[0001]$ в интервале температур от комнатной до $\sim 700^\circ\text{C}$ наблюдаются полосы краевых $2\mathbf{c} + \mathbf{a}$ дислокаций в плоскостях $\{11\bar{2}1\}$, в [15–17] при отклонении оси деформации в пределах $\sim 30^\circ$ от точной с-ориентации наблюдались как краевые, так и винтовые $2\mathbf{c} + \mathbf{a}$ сверхдислокации в плоскостях пирамиды $\{11\bar{2}1\}$ и $\{20\bar{2}1\}$. Особенностью выбранных для моделирования

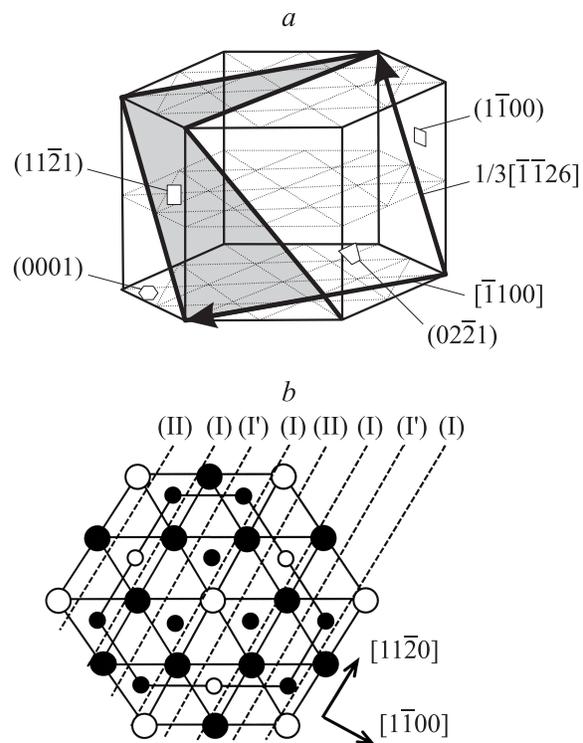


Рис. 1. Элементарная ячейка (a) и ее проекция (b) на плоскость базиса для сверхструктуры D0_{19} . Крупные атомы принадлежат плоскости базиса, мелкие являются проекциями атомов, расположенных на расстоянии $\mathbf{c}/2$, на плоскость базиса.

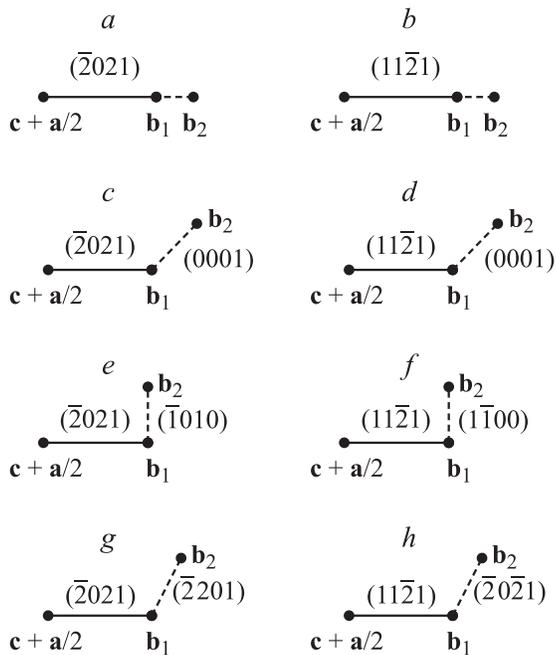


Рис. 2. Схема расщепления $(2c + a)$ сверхдислокации с вектором Бюргерса $1/3[\bar{1}\bar{1}26]$ в плоскостях пирамиды I $(20\bar{2}1)$ и II $(11\bar{2}1)$ типов. (a, b) — скользящие конфигурации; (c–h) — дислокационные барьеры, характеризующиеся расщеплением сверхчастичных дислокаций одновременно в плоскостях пирамиды и базиса (c–d), призмы (e, f), или плоскости другой пирамиды (g, h). — — APB, --- — SF.

ориентаций осей $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ сверхчастичной дислокации является то, что для винтовой дислокации ось $[\bar{1}\bar{1}26]$ принадлежит одновременно плоскостям пирамиды II типа $(11\bar{2}1)$, I типа $(20\bar{2}1)$ и призмы $(\bar{1}\bar{1}00)$, для краевой дислокации ось $[11\bar{2}1]$ принадлежит одновременно плоскостям пирамиды I типа $\{20\bar{2}1\}$ и плоскости базиса, а ось $[\bar{1}\bar{1}00]$ — плоскости пирамиды II типа $(11\bar{2}1)$ и базиса (0001) (рис. 1). Таким образом, в качестве начальной конфигурации сверхчастичной дислокации при моделировании необходимо рассматривать как ее расщепление в исходной (содержащей полосу антифазной границы) плоскости пирамиды, так и в пересекающихся плоскостях пирамиды, призмы и базиса. На рис. 2 представлено схематически расщепление $2c + a$ сверхдислокации в плоскости пирамиды I и II типов. Во всех конфигурациях сверхдислокация расщеплена на две сверхчастичные $c + a/2$ дислокации с вектором Бюргерса $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$, ограничивающие антифазную границу.

При моделировании одна из сверхчастичных дислокаций помещалась в центр кристаллита, вторая находилась на расстоянии, вычисленном в рамках теории упругости для значений энергий антифазных границ, соответствующих выбранному потенциалу межатомного взаимодействия, и присутствовала в рассматриваемом кристаллите своими полями смещений (вторая дислокация на схеме обозначена $c + a/2$). В конфигурации, представленной

на рис. 2, a, b сверхчастичная дислокация внутри кристаллита расщеплена на две частичные с векторами Бюргерса b_1 и b_2 в одной плоскости пирамиды. Векторы Бюргерса b_1 и b_2 зависят от формы γ -поверхностей в плоскостях пирамиды $(20\bar{2}1)$ и $(11\bar{2}1)$. На рис. 2, c, d представлены возможные варианты расщепления краевой сверхчастичной дислокации одновременно в плоскостях пирамиды и базиса, на рис. 2, e, f — расщепление винтовой сверхчастичной дислокации в плоскости пирамиды и призмы, на рис. 2, g, h — расщепление винтовой дислокации в пересекающихся плоскостях пирамиды I и II типов. Векторы Бюргерса b_1 и b_2 будут определяться формой γ -поверхности в плоскостях пирамиды, базиса и призмы. Для конфигурации на рис. 2, a, b все частичные дислокации и полосы планарных дефектов принадлежат одной плоскости пирамиды, поэтому такие конфигурации являются скользящими. Для конфигураций на рис. 2, c–h частичные дислокации и полосы планарных дефектов принадлежат двум пересекающимся плоскостям, поэтому такие дислокации не могут легко скользить в плоскостях пирамиды, образуя дислокационные барьеры. Энергетическая выгодность рассматриваемых конфигураций зависит от энергии взаимодействия частичных дислокаций и энергии планарных дефектов, входящих в состав сверхдислокаций, и определяется в процессе проведения процедуры релаксации при компьютерном моделировании.

1) γ -поверхности в плоскостях базиса, призмы и пирамиды. Выбор начальной конфигурации. На рис. 3, a, b представлены изоэнергетические контурные карты γ -поверхностей в плоскостях пирамиды I и II типов [12–14]. В плоскости пирамиды I типа $(20\bar{2}1)$ существует два различных сечения, для каждого из которых получена зависимость энергии поверхностного дефекта от вектора сдвига в этой плоскости. Для одного из этих сечений, соответствующего близко расположенным плоскостям $\{20\bar{2}1\}$, значения энергий поверхностных дефектов существенно выше, чем для другого сечения. Это означает, что упругая энергия сверхчастичной дислокации в этом сечении будет высока, поэтому мы рассматриваем расщепление дислокации только в сечении, соответствующем большому расстоянию между плоскостями $(20\bar{2}1)$. Зависимость энергии поверхностного дефекта от вектора сдвига в этом сечении представлена на рис. 3, a. Вектор OA на рис. 3, a соответствует антифазной границе со сдвигом $a/2$, вектор OB — антифазной границе со сдвигом $c + a/2$. Соответствующие энергии антифазных границ равны $\xi_{(20\bar{2}1)}(a/2) = 78 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$, $\xi_{(20\bar{2}1)}(c + a/2) = 205 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$. Кроме минимумов, соответствующих антифазным границам, на γ -поверхности существует еще один минимум (вектор OC на рис. 3, a), отвечающий обобщенному дефекту упаковки с вектором сдвига $b_1 = OC = (1 - \alpha)/12[1\bar{2}10] + \beta/4[\bar{1}014]$ и $\alpha = 0$; $\beta = 0.475$. Штриховкой на рис. 3, a показана область сдвигов на γ -поверхности вблизи точки C с низкими

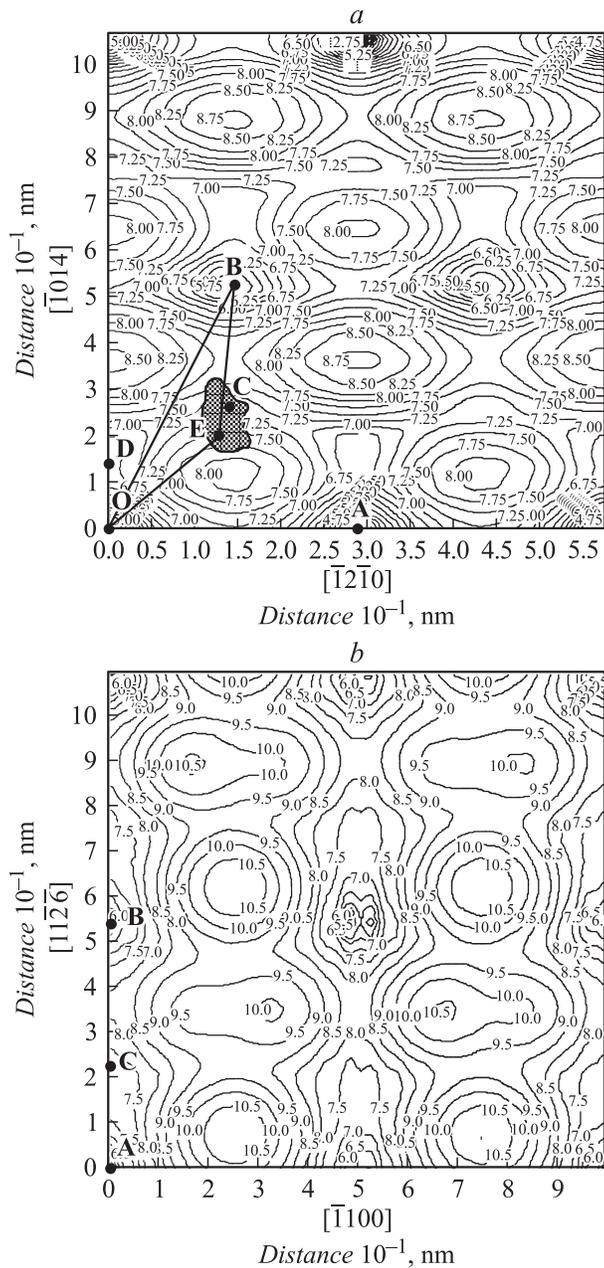


Рис. 3. Изоэнергетические контурные карты γ -поверхностей в Ti_3Al для плоскостей пирамиды $(20\bar{2}1)$ I типа (a), пирамиды $(11\bar{2}1)$ II типа (b).

значениями энергий дефектов упаковки, соответствующая векторам Бюргера частичных дислокаций, на которые может быть расщеплена сверхчастичная $c + a/2$ дислокация. Точка E, принадлежащая заштрихованной области, определяет симметричное расщепление $c + a/2$ сверхчастичной дислокации, использованное нами ранее при вычислении энергии активации образования дислокационных барьеров [18]. Таким образом, в качестве начальной конфигурации сверхчастичной дислокации в плоскости пирамиды I типа выбираем расщепление

в соответствии со следующей реакцией:

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = \mathbf{b}_1 + SF + \mathbf{b}_2, \quad (1)$$

где

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1-\alpha}{12}[\bar{1}\bar{2}10] + \frac{\beta}{4}[\bar{1}014],$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{\alpha}{12}[\bar{1}\bar{2}10] + \frac{1-\beta}{4}[\bar{1}014].$$

Коэффициенты α и β принимают значения $\alpha = 0$; $\beta = 0.475$ и $\alpha = 0.5$; $\beta = 0.5$.

Единственный минимум на γ -поверхности в плоскости пирамиды $(11\bar{2}1)$ II типа на рис. 3, b соответствует антифазной границе со сдвигом $c + a/2$ (вектор \mathbf{AB}). Значение энергии антифазной границы $\xi_{\{11\bar{2}1\}} = 228 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$. Для рассматриваемой плоскости возможно только метастабильное расщепление $c + a/2$ дислокации на частичные. Наименьшие значения энергии дефекта упаковки получены для векторов сдвигов, лежащих вдоль направления $[\bar{1}\bar{1}26]$ от точки A до C (рис. 3, b). Это говорит о том, что наиболее вероятным является расщепление на частичные дислокации с вектором Бюргера, параллельным исходной $c + a/2$ сверхчастичной дислокации, однако характер расщепления не может быть определен однозначно. Число частичных дислокаций n варьировалось от 2 до 10. Для $n = 10$ расстояние между соседними дислокациями порядка радиуса ядра дислокации. Изменяя n в пределах от 2 до 10, мы осуществляем переход от дискретного к непрерывному распределению частичных дислокаций. Таким образом, в качестве начальной конфигурации сверхчастичной дислокации в плоскости пирамиды II типа рассмотрено три варианта расщепления в соответствии со следующими реакциями:

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = 1/6(0.5[\bar{1}\bar{1}26] + SF + 0.5[\bar{1}\bar{1}26]), \quad (2)$$

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = 1/6(0.4[\bar{1}\bar{1}26] + SF + 0.6[\bar{1}\bar{1}26]), \quad (3)$$

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = 1/6(0.1[\bar{1}\bar{1}26] + SF + \dots + 0.1[\bar{1}\bar{1}26]). \quad (4)$$

Реакция (2) — расщепление на частичные дислокации с равными векторам Бюргера $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 = 1/12[\bar{1}\bar{1}26]$ (рис. 2, a); реакция (3) — расщепление на частичные дислокации $\mathbf{b}_1 = \mathbf{AC}$; $\mathbf{b}_2 = \mathbf{CB}$; (рис. 3, b), где вектор \mathbf{AC} соответствует минимальному значению энергии обобщенного ДУ вдоль направления $[\bar{1}\bar{1}26]$; реакция (4) — соответствует непрерывному распределению частичных дислокаций.

γ -поверхность в плоскости базиса аналогична полученным ранее [19] и характеризуется тремя локальными минимумами: антифазной границей APB, комплексным CSF и сверхструктурным SISF дефектами упаковки, отвечающим векторам сдвигов $1/6[\bar{2}110]$, $1/6[0\bar{1}10]$, $1/3[\bar{1}010]$. Энергии этих дефектов составляют величины 161, 197 и $78 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$. Существование трех локальных минимумов на γ -поверхности определяет 3 возможных типа расщепления сверхчастичной дислокации:

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = [0001] + \text{APB} + 1/6[\bar{1}\bar{1}20], \quad (5)$$

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = 1/6[\bar{1}016] + \text{CSF} + 1/6[0\bar{1}10], \quad (6)$$

$$1/6[\bar{1}\bar{1}26] = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 = 1/6[1\bar{1}06] + \text{SISF} + 1/3[\bar{1}010]. \quad (7)$$

Реакция (7) является энергетически невыгодной, поскольку частичные дислокации \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 притягиваются, (5) — энергетически нейтральная, (6) — энергетически выгодная. Поэтому при расщеплении в плоскости базиса в начальной конфигурации $\mathbf{b}_2 = 1/6[\bar{1}\bar{1}20]$ или $\mathbf{b}_2 = 1/6[0\bar{1}10]$.

Сверхструктура D0₁₉ может быть получена трансляцией в направлении $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ четырех плоскостей призмы (II, I', I), различающихся расположением атомов двух сортов и расстоянием между этими плоскостями (рис. 1, b). В [12] было показано, что энергия антифазной границы в плоскости призмы II типа (сечение II на рис. 1, b) равна $318 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$, тогда как в плоскостях призмы I типа (сечения I, I' на рис. 1, b) — $6 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$. Для тройки сечений I, I', I на рис. 1, b энергия антифазной границы одинакова, но форма γ -поверхности и соответственно значения энергии поверхностных дефектов для сечений I и I' различны. В [10,11] мы рассмотрели различные варианты расщепления а-сверхдислокации с вектором Бюргерса $1/3\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ в плоскостях призмы I, I' и II типов. Для всех изученных вариантов оказалось, что в плоскости призмы I' типа полученные в результате релаксации значения энергии существенно ниже, чем в плоскостях призмы I и II типов. Для плоскости I' типа в качестве начальной конфигурации рассматривалось два варианта расщепления сверхчастичной $1/6\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ дислокации винтовой и краевой ориентации. Один вариант — расщепление на n винтовых (или краевых) частичных дислокаций с равными векторами Бюргерса, $\mathbf{b}_n = (1/6\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle)/n$. Второй вариант — расщепление на 2 группы частичных дислокаций. Соответствующие реакции расщепления $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ сверхчастичной дислокации для $n = 2$ имеют вид

$$1/6[\bar{1}\bar{1}20] = 1/12[\bar{1}\bar{1}20] + \text{SF} + 1/12[\bar{1}\bar{1}20], \quad (8)$$

$$1/6[\bar{1}\bar{1}20] = 1/12[\bar{1}\bar{1}2x] + \text{SF} + 1/12[\bar{1}\bar{1}2x], \quad (9)$$

где $x = 1.038$.

Анализ структуры ядра краевой и винтовой сверхчастичной дислокации в плоскости призмы I' типа показал, что ядро является планарным, т. е. область максимальных смещений локализована вблизи плоскости I' типа, содержащей антифазную границу. Оказалось, что для начальной конфигурации с равными векторами Бюргерса (реакция (8)) энергия несколько ниже, чем для другой начальной конфигурации (реакция (9)). Для всех значений n числа частичных дислокаций распределение смещений, характеризующих ядро сверхчастичной дислокации, является неоднородным вдоль плоскости призмы I' типа и может быть охарактеризовано как расщепление на две частичные дислокации. Таким образом, для дислокационного барьера (рис. 2, d) вектор

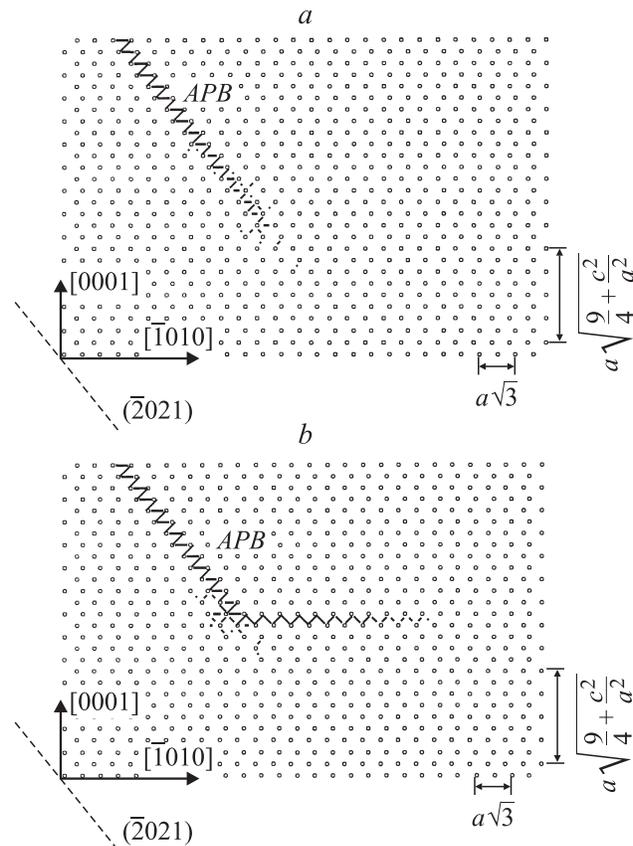


Рис. 4. Структура ядра краевой $1/6[2\bar{1}\bar{1}6]$ сверхчастичной дислокации, расщепленной в плоскости пирамиды I типа $(\bar{2}21)$ (скользящая конфигурация) (a); расщепленной в плоскости пирамиды I типа $(\bar{2}21)$ и в плоскости базиса с образованием КДУ (дислокационный барьер) (b) (представлены краевые компоненты смещений).

Бюргерса \mathbf{b}_2 частичной дислокации в плоскости призмы I' типа выбран равным $\mathbf{b}_2 = 1/12[\bar{1}\bar{1}20]$.

2) Скользящие и заблокированные конфигурации краевой сверхдислокации в плоскостях пирамиды I и II типов. В плоскости пирамиды I типа в качестве начальной конфигурации скользящей сверхчастичной дислокации выбиралось ее расщепление в соответствии с реакцией (1). Схема расщепления скользящей дислокации в рассматриваемой плоскости аналогична представленной на рис. 2, a. На рис. 4, a представлена структура ядра сверхчастичной дислокации с вектором Бюргерса $1/6[2\bar{1}\bar{1}6]$ и осью $[1\bar{2}10]$, расщепленной на две частичные дислокации в соответствии с (1) при $\alpha = 0.5, \beta = 0.5$.¹ При изображении структуры ядра дислокации использовался метод дифференциальных смещений [20]. Кружками обозначены проекции атомов рассматриваемого кристаллита на плоскость $(1\bar{2}10)$, перпендикулярную оси рассматрива-

¹ Для дислокации с осью $[1\bar{2}10]$ угол между направлением ее оси и вектором Бюргерса составляет 85.08° , поэтому будем называть ее в дальнейшем дислокацией краевой ориентации.

емой краевой дислокации. В результате компьютерных расчетов определены положения атомов, соответствующие минимуму энергии кристаллита с введенной в него дислокацией. Смещения, не превосходящие $0.05a$ (a — параметр решетки Ti_3Al), показаны стрелками между парами ближайших атомов. По пространственному распределению стрелок можно судить о структуре ядра дислокации. Ядро рассматриваемой дислокации является планарным, так как основная область как краевой, так и винтовой компоненты смещения локализована вблизи плоскости $(20\bar{2}1)$, содержащей антифазную границу. Для второго набора параметров $\alpha = 0$; $\beta = 0.475$ после проведения процедуры релаксации ядро подобно представленному на рис. 4, *a*, однако значение энергии этой конфигурации оказалось значительно выше.

Для дислокации с вектором Бюргерса $1/6[2\bar{1}\bar{1}6]$ и осью $[1\bar{2}10]$ в плоскости пирамиды I типа рассмотрены два варианта дислокационных барьеров, соответствующих перерасщеплению сверхчастичной дислокации в плоскость базиса с образованием полосы антифазной границы или полосы комплексного дефекта упаковки (реакции (5), (6)). Частичная дислокация Шокли с вектором Бюргерса $1/6[10\bar{1}0]$ и сверхчастичная дислокация с вектором Бюргерса $1/6[2\bar{1}\bar{1}0]$ ограничивают полосы комплексного дефекта упаковки и антифазной границы в плоскости базиса. Структура ядра дислокационного барьера, соответствующего реакции (6), представлена на рис. 4, *b*. Как краевая, так и винтовая компоненты смещений распределены вблизи одной плоскости базиса. Для дислокации, расположенной на линии пересечения рассматриваемых плоскостей, смещения распределены как в плоскости пирамиды, так и в плоскостях призмы и базиса.

В плоскости пирамиды II типа было изучено три варианта расщепления краевой сверхчастичной дислокации с вектором Бюргерса $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ и осью $[\bar{1}100]$, начальная конфигурация которой задавалась в соответствии с реакциями (2)–(4). Результаты расчетов показали, что в этом случае выбор начальной конфигурации оказывает малое влияние на значение энергии и структуру ядра дислокации как краевой, так и винтовой ориентации после релаксации.

Анализ структуры ядра скользящей краевой $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ дислокации в плоскости пирамиды II типа показывает, что конфигурация в целом является планарной, так как основная область смещений сосредоточена вблизи плоскости $(11\bar{2}1)$, содержащей антифазную границу (распределение смещений подобно представленному на рис. 4). Для краевой дислокации с вектором Бюргерса $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ и осью $[\bar{1}100]$ в плоскости пирамиды II типа также рассмотрены два варианта дислокационных барьеров с образованием полосы антифазной границы или полосы комплексного дефекта упаковки. Для дислокационного барьера с полосой антифазной границы в плоскости базиса расщепление на две частичные дислокации сохраняется, несколько увеличивается ширина расщепления в плоскости базиса и становится порядка 4, *a*, смещения

локализованы преимущественно в тех плоскостях, где была расщеплена начальная конфигурация. Энергия дислокационного барьера с полосой комплексного дефекта упаковки в плоскости базиса дислокационного барьера оказалась чуть ниже, чем для рассмотренного выше варианта, что является следствием того, что дислокационная реакция (6) более выгодна, чем реакция (5). Расщепление на две частичные дислокации в плоскости базиса после релаксации сохраняется, однако пространственное распределение становится более сложным. Для дислокации $b_2 = 1/6[0\bar{1}10]$, ограничивающей комплексный дефект упаковки в плоскости базиса, ядро является планарным — и краевая, и винтовая компоненты распределены в плоскости базиса. Для дислокации $b_1 = 1/6[\bar{1}016]$ ядро является непланарным, винтовая компонента дислокации b_1 распределена в нескольких параллельных плоскостях пирамиды и базиса.

Таким образом, результаты моделирования дислокаций краевой ориентации в плоскости пирамиды I и II типов в скользящей конфигурации и конфигурации дислокационного барьера показали, что энергия скользящей конфигурации выше энергии дислокационного барьера.

3) Скользящие и заблокированные конфигурации винтовой сверхдислокации в плоскостях пирамиды I и II типов. Для винтовой скользящей конфигурации в плоскости пирамиды I типа рассмотрено три варианта расщепления сверхчастичной дислокации в начальной конфигурации (формулы (2)–(4)), в плоскости пирамиды II типа — один вариант в соответствии с реакцией (1). Анализ распределения смещений вблизи ядра винтовой сверхчастичной дислокации с вектором Бюргерса $1/6[2\bar{1}\bar{1}6]$, расщепленной на две частичные дислокации в соответствии с (1) при $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.5$ в плоскости пирамиды I типа, после релаксации показывает, что винтовая компонента смещений частичных дислокаций распределена как в плоскости пирамиды $(\bar{2}021)$, так и в плоскости призмы $(01\bar{1}0)$ и пирамиды $(\bar{2}201)$, имеющих одну линию пересечения, параллельную направлению $[2\bar{1}\bar{1}6]$ оси рассматриваемой дислокации. Краевая компонента смещений распределена в четырех соседних плоскостях пирамиды $(\bar{2}201)$, поэтому ядро этой конфигурации в целом может быть охарактеризовано как непланарное. Как и для краевой дислокации, ядро винтовой сверхчастичной дислокации с параметрами $\alpha = 0$; $\beta = 0.475$ имеет более высокое значение энергии.

На рис. 5 представлена структура ядра скользящей винтовой $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ дислокации в плоскости пирамиды II типа после релаксации из начальной конфигурации, соответствующей реакции (3). Распределение винтовой компоненты показано на плоскости, перпендикулярной оси винтовой дислокации $[\bar{1}\bar{1}26]$. Хотя максимальные смещения в области ядра сверхчастичной дислокации сосредоточены вблизи плоскости пирамиды, в целом конфигурация является непланарной (нормаль к плоскости пирамиды $(11\bar{2}1)$ совпадает с направлением $[11\bar{2}2]$ на рис. 5). Распределение смещений неоднородно вдоль

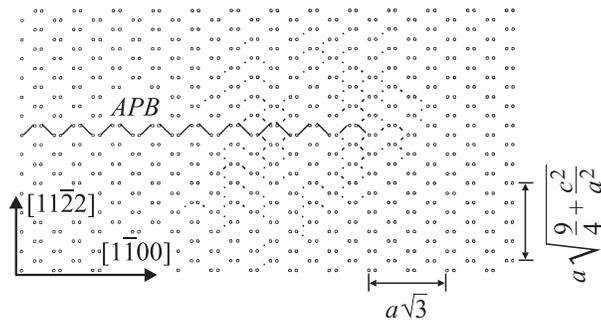


Рис. 5. Структура ядра винтовой сверхчастичной дислокации с вектором Бюргера $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$, расщепленной в плоскости пирамиды II типа $(11\bar{2}1)$.

плоскости пирамиды и может быть охарактеризовано как расщепление на две частичные дислокации. Смещения вблизи каждой из частичных дислокаций распределены не только вблизи плоскости пирамиды, но и на расстоянии $\sim (6-7)a$ в плоскости $(1\bar{1}00)$. Такой характер расщепления реализуется в том случае, когда энергия дефекта упаковки в исходной плоскости (в нашем случае в плоскости пирамиды $(11\bar{2}1)$) высока и энергетически выгодным становится ее перерасщепление в той плоскости, которая проходит через линию дислокации и имеет более низкую энергию дефекта упаковки (в нашем случае это плоскость призмы $(1\bar{1}00)$).

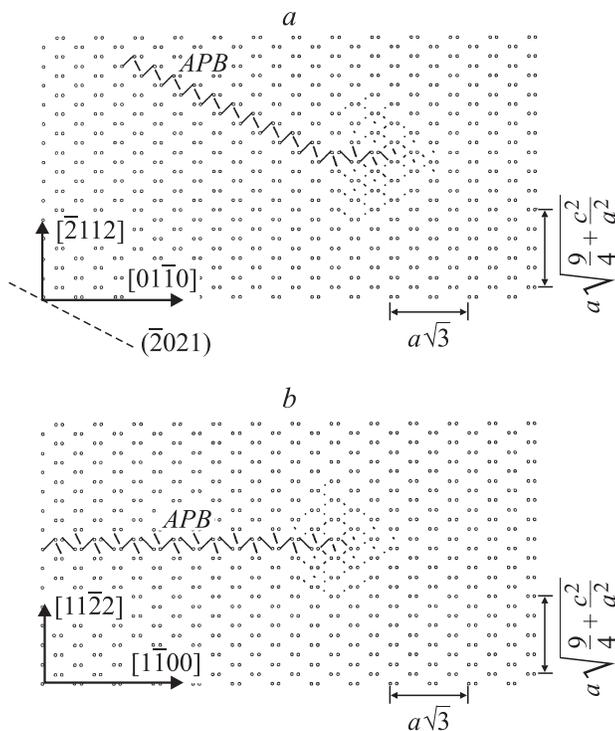


Рис. 6. Структура ядра винтовой $1/6[2\bar{1}\bar{1}6]$ сверхчастичной дислокации (дислокационный барьер), расщепленной в плоскости пирамиды I типа (2021) и II типа (2111) (a), нерасщепленной дислокации (b).

В плоскости пирамиды I типа $(\bar{2}021)$ для винтовой сверхчастичной дислокации с вектором Бюргера $1/6[2\bar{1}\bar{1}6]$ рассмотрены три варианта дислокационных барьеров. Для первого варианта сверхчастичная дислокация расщеплена в плоскости пирамиды I типа и в плоскости призмы I' типа $(01\bar{1}0)$; для второго варианта — в плоскости пирамиды I типа и пирамиды II типа $(\bar{2}111)$; для третьего варианта — в двух плоскостях пирамиды I типа $(\bar{2}021)$ и $(\bar{2}201)$. Для винтовой дислокации в плоскости пирамиды II типа рассмотрено два варианта дислокационных барьеров. Для первого варианта сверхчастичная дислокация расщеплена в плоскости пирамиды II типа и призмы I' типа, для второго варианта — в плоскостях пирамиды II и I типов (рис. 2, f-h). Все перечисленные плоскости пересекаются вдоль направления $[2\bar{1}\bar{1}6]$, совпадающего с вектором Бюргера и осью дислокации.

Расчеты показали, что энергия дислокационного барьера в первом варианте (перерасщепление в плоскостях пирамиды I или II типа и в плоскости призмы I' типа) выше энергии скользящей конфигурации и энергии дислокаций в двух других вариантах дислокационных барьеров, поэтому образование таких барьеров невыгодно. На рис. 6, a показана структура ядра винтовой сверхдислокации, расщепленной в плоскостях пирамиды I и II типов. Структура ядра этих конфигураций в целом может быть охарактеризована как непланарная, смещения вблизи которой распределены одновременно в плоскостях пирамиды I, II типов и призмы. Ядро дислокационного барьера, характеризуемого перерасщеплением сверхчастичной дислокации в двух пересекающихся плоскостях пирамиды I типа (рис. 2, g), подобно рассмотренному выше. В конечной конфигурации основные смещения распределены главным образом в тех плоскостях пирамиды I типа, где задавались начальные расщепления сверхчастичной дислокации. На рис. 6, b показана структура ядра винтовой сверхдислокации, полученной из нерасщепленной конфигурации сверхчастичной дислокации $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$. Полученная конфигурация может быть охарактеризована как непланарная, поскольку смещения распределены одновременно в пирамидальных и призматических плоскостях. Расчет показал, что энергии всех дислокационных барьеров близки (несколько ниже для конфигурации на рис. 6, b), а ядро сверхчастичной $c + a/2$ дислокации винтовой ориентации в целом может быть охарактеризовано как непланарное.

Заключение

В работе с использованием N -частичных потенциалов межатомного взаимодействия для Ti_3Al построены γ -поверхности в плоскостях базиса, призмы и пирамиды. На γ -поверхностях в этих плоскостях имеются локальные минимумы, отвечающие антифазной границе. Энергии антифазных границ, равные

$\xi_{(0001)} = 161 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$, $\xi_{(1100)} = 6 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$, $\xi_{(11\bar{2}1)} = 228 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$, $\xi_{(20\bar{2}1)} = 225 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$, близки к их экспериментальным значениям [10].

Получены также локальные минимумы на γ -поверхности, соответствующие сверхструктурному и комплексному дефектам упаковки в плоскости базиса. Энергии этих дефектов, равные $\gamma_{\text{CSP}} = 78 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$; $\gamma_{\text{SISF}} = 197 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$, также близки к экспериментальным величинам. Показано, что в плоскостях призмы и пирамиды I и II типов отсутствуют глубокие локальные минимумы, соответствующие стабильным дефектам упаковки.

При моделировании структуры ядра сверхдислокаций в плоскостях пирамиды I и II типов всегда полагалось, что они расщеплены на две сверхчастичные дислокации с векторами Бюргера $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$, связанные полосой антифазной границы. Такая конфигурация сверхдислокации обусловлена существованием глубоких минимумов на γ -поверхностях в плоскостях пирамиды I и II типов (рис. 3, *a, b*), соответствующих вектору сдвига $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$. В свою очередь для сверхчастичной дислокации в начальной конфигурации исследован один вариант расщепления в плоскости пирамиды I типа и несколько вариантов расщепления в плоскости пирамиды II типа, поскольку на γ -поверхности в плоскости пирамиды II типа отсутствуют другие глубокие минимумы. Анализ структуры ядра скользящей сверхчастичной дислокации краевой ориентации после проведения процедуры релаксации показал, что ядро сверхчастичной дислокации в целом является планарным (рис. 4, *a*) и распределение смещений может быть интерпретировано как расщепление $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ дислокации на две частичные, так как основные смещения вблизи частичных дислокаций локализованы вблизи плоскости пирамиды. Для винтовой дислокации с осью $[\bar{1}\bar{1}26]$ ядро сверхчастичных дислокаций оказалось непланарным (рис. 5, *b*), так как смещения вблизи каждой из частичных дислокаций распределены не только вблизи плоскости пирамиды, содержащей АФГ (АРВ), но и в плоскостях призмы и других пересекающихся плоскостях пирамиды.

До настоящего времени компьютерное моделирование структуры ядра дислокаций в плоскости пирамиды в сверхструктуре $D0_{19}$ не проводилось, известны [21] только результаты моделирования дислокаций в плоскостях базиса и призмы. Сравним результаты, полученные в настоящей работе, с результатами расчета структуры ядра дислокаций в ГПУ металлах [20–22] в системе скольжения $1/3\langle\bar{1}\bar{1}23\rangle\{11\bar{2}2\}$, проведенного с использованием парных потенциалов Леннарда–Джонсона. Система скольжения $1/3\langle\bar{1}\bar{1}23\rangle\{11\bar{2}2\}$ для ГПУ кристаллов эквивалентна системе $1/6\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle\{11\bar{2}1\}$ для упорядоченной решетки со сверхструктурой $D0_{19}$. Расчет структуры ядра дислокации винтовой ориентации показал, что как для ГПУ решетки, так и для сверхструктуры $D0_{19}$, результат зависит от выбора начальной конфигурации.

Для скользящей конфигурации результаты для ГПУ и $D0_{19}$ решеток близки. Для ГПУ кристаллов рассмотрен только один барьер для дислокации, расщепленной одновременно в плоскости пирамиды I и II типов. В настоящей работе для сверхструктуры $D0_{19}$ было рассмотрено несколько типов барьеров для сверхчастичной дислокации винтовой ориентации (рис. 2, *c–h*). Один из вариантов (рис. 2, *h*) эквивалентен рассмотренному для ГПУ решетки, в других вариантах сверхчастичная дислокация расщеплена одновременно в плоскостях пирамиды и призмы. Энергии рассматриваемых дислокационных барьеров оказались близки.

Для дислокации краевой ориентации результаты моделирования в ГПУ и $D0_{19}$ структурах различны. Основываясь на экспериментальных данных для ряда ГПУ металлов, авторы [23,24] в качестве начальной конфигурации при моделировании краевой дислокации рассмотрели ее расщепление с образованием двухслойного двойника в плоскости $\{11\bar{2}2\}$ и трехслойного дефекта упаковки в плоскости $\{11\bar{2}1\}$. Анализ экспериментальных данных для Ti_3Al и других кристаллов со сверхструктурой $D0_{19}$ показал, что двойникование наблюдается только при очень высоких температурах деформации. В области умеренных температур, близких к температурам эксплуатации этих материалов, двойникование не наблюдается, скольжение осуществляется движением сверхдислокаций.

В работе проведено сравнение скользящих конфигураций сверхчастичной дислокации и дислокационных барьеров. Для краевой дислокации с вектором Бюргера $1/6[\bar{1}\bar{1}26]$ в области ее ядра смещения распределены в основном в плоскостях пирамиды I и II типов. В результате проведения процедуры релаксации показано, что для сверхчастичной дислокации энергия скользящей конфигурации выше, чем дислокационного барьера. Для винтовых сверхдислокаций с осью $[\bar{1}\bar{1}26]$ рассмотрены три варианта дислокационных барьеров с перерасщеплением сверхдислокаций из плоскостей пирамиды I или II типов в другие плоскости (призмы I' типа, пирамиды I или II типов), пересекающиеся в исходной вдоль направления, параллельного вектору Бюргера дислокаций. Рассматривалась также нерасщепленная конфигурация сверхчастичной дислокации в плоскостях пирамиды. Энергии всех рассмотренных вариантов расщепления (скользящих конфигураций и дислокационных барьеров) винтовой сверхчастичной дислокации близки.

Таким образом, в результате компьютерного моделирования структуры ядра винтовой и краевой сверхчастичной дислокации в плоскостях пирамиды I и II типов установлено, что для дислокации краевой ориентации скользящая конфигурация имеет более высокое значение энергии, чем дислокационный барьер, тогда как для дислокации винтовой ориентации энергии всех конфигураций близки. Более низкое значение энергии дислокационного барьера является необходимым условием термоактивированного превращения скользящей

конфигурации в дислокационный барьер, что в свою очередь может быть положено в основу механизма термического упрочнения, которое наблюдается экспериментально в Ti_3Al . Более подробно о механизмах термоактивированной перестройки сверхдислокаций и особенностях деформационного поведения Ti_3Al будет рассмотрено в [25].

Рабовская М.Я. выражает благодарность Комиссии РАН по работе с молодежью (грант № 69 6-го конкурса-экспертизы 1999 г. научных проектов молодых ученых РАН).

Список литературы

- [1] *Lafvander J.P.A., Couret S.A., Kuroath P., Fraser H.A.* // Phil. Mag. A. 1989. Vol. 59. P. 280–298.
- [2] *Minonishi Y., Yoo M.H.* // Phil. Mag. Lett. 1990. Vol. 61. P. 203–208.
- [3] *Minonishi Y.* // Phil. Mag. A. 1991. Vol. 63. P. 1085–1093.
- [4] *Umakoshi Y., Nakano T., Takenaka T.* // Acta Metall. Mater. 1993. Vol. 41. P. 1149–1154.
- [5] *Legros M., Couret A., Caillard D.* // Phil. Mag. A. 1996. Vol. 73. P. 61–80.
- [6] *Legros M., Couret A., Caillard D.* // Ibid. P. 81–99.
- [7] *Minonishi Y.* // Phil. Mag. Lett. 1990. Vol. 62. P. 153–158.
- [8] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я.* // Физ. мет. металловед. 2002. Т. 93. Вып. 3. С. 1–9.
- [9] *Карькина Л.Е., Яковенкова Л.И.* // Изв. АН. Сер. физ. 2001. Т. 65. Вып. 6. С. 807–810.
- [10] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я.* // Изв. АН. Сер. физ. 2002. Т. 66. Вып. 6. С. 891–894.
- [11] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 1. С. 60–66.
- [12] *Яковенкова Л.И., Кирсанов В.В., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я., Балашов А.Н.* // Физ. мет. металловед. 2000. Т. 89. Вып. 3. С. 31–38.
- [13] *Yakovenkova L.I., Kirsanov V.V., Karkina L.E., Rabovskaya M.Ya., Balashov A.N.* // Society of Photo-optical Instrumentation Engineering (SPIE). 1999. Vol. 3987. P. 159–163.
- [14] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я.* // Сб. конф. „Структура и свойства металлов и сплавов“. Изд-во УрО РАН, 1999. С. 237–242.
- [15] *Панова Е.В., Карькина Л.Е., Романов Е.П.* // Физ. мет. металловед. 1993. Т. 75. Вып. 4. С. 166–175.
- [16] *Панова Е.В., Романов Е.П., Карькина Л.Е.* // Физ. мет. металловед. 1995. Т. 80. Вып. 3. С. 166–173.
- [17] *Панова Е.В., Карькина Л.Е., Гринберг Б.А., Романов Е.П.* // Физ. мет. металловед. 1998. Т. 85. Вып. 1. С. 111–116.
- [18] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я.* // Физ. мет. металловед. 1999. Т. 87. Вып. 3. С. 20–25.
- [19] *Vitek V.* // Crystal Lattice Defects. 1974. Vol. 5. P. 1–34.
- [20] *Cserti J., Khantha M., Vitek V., Pope D.P.* // Mat. Sci. Eng. A. 1992. Vol. 152. P. 95–102.
- [21] *Ando S., Gotan T., Tonda H.* // Met. and Mat. Trans. A. 2002. Vol. 33. P. 823–830.
- [22] *Vitek V., Igarashi M.* // Phil. Mag. A. 1991. Vol. 63. P. 1059–1075.

- [23] *Minonishi Y., Ishioka S., Koiwa M., Morizumi S.* // Phil. Mag. A. 1982. Vol. 45. P. 835–850.
- [24] *Minonishi Y., Ishioka S., Koiwa M., Morizumi S.* // Phil. Mag. A. 1982. Vol. 46. P. 761–770.
- [25] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 10. С. 70–76.