

*Е.Г. Харина, Г.М. Поletaев, Р.Ю. Ракитин,
А.Н. Мартынов, М.Д. Старостенков*

Исследование механизмов пластической деформации вблизи симметричных границ зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al

*E.G. Kharina, G.M. Poletaev, R.Yu. Rakitin,
A.N. Martynov, M.D. Starostenkov*

The Research of Mechanisms of Plastic Deformation nearby Symmetry Tilt Grain Boundaries in Intermetallide Ni_3Al

Методом молекулярной динамики исследуются структурные превращения вблизи симметричных границ зерен наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в Ni_3Al в условиях деформации сжатия–растяжения. Показано, что внутризеренное скольжение может осуществляться за счет расщепления зернограницных дислокаций при пластической деформации. При этом при испускании с границы частичной дислокации в зерно образуется антифазная граница.

Ключевые слова: молекулярная динамика, границы зерен, деформация, зернограницное проскальзывание, внутризеренное скольжение.

Границы зерен оказывают существенное влияние на деформационное поведение поликристаллов. Экспериментально установлено, что границы зерен и тройные стыки при микропластической деформации являются источниками дислокаций [1, 2]. По мнению многих исследователей, такое явление, как ползучесть, осуществляется при коррелированном действии зернограницного проскальзывания и внутризеренного скольжения [3]. Основным механизмом, отвечающим за сверхпластичность (явление аномально высокой пластичности ультрамелкозернистых металлов и сплавов), согласно [2–4], является зернограницное проскальзывание. До настоящего времени дискуссионным остается вопрос о движущей силе и механизме зернограницного проскальзывания. Как считают авторы работы [5], проскальзывание по границам вызывается скольжением, происходящим в зернах, и может быть результатом сдвига, который развивается в одном зерне, доходит до границы и вызывает скольжение в другом зерне. В публикациях [6, 7], наоборот, утверждается, что сначала происходит зернограницное проскальзывание за счет переползания зернограницных дислокаций, в результате которого возникают напряжения, приводящие к их расщеплению и испусканию дислокаций в зерно (внутризеренное скольжение). В случае, когда вектор Бюргерса зернограницных дислокаций составляет небольшой угол с границей зерен, по мнению авторов работ [2, 4, 8], зернограницное проскальзывание

Structural transformations nearby symmetry tilt grain boundaries $\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ in Ni_3Al in conditions of pressure-tension deformation are studied by the method of molecular dynamics. It is shown that inter-grain shift can take place at the expense of the splitting of grain boundary dislocations at a plastic deformation. For all that anti-phase boundary is formed during emission from boundary of a partial dislocation in the grain.

Key words: molecular dynamics, grain boundaries, deformation, grain boundary sliding, inter-grain shift.

осуществляется за счет их скольжения и испускание дислокаций в зерно происходит не с межзеренной границы, а с тройного стыка.

В настоящей статье рассматриваются результаты, полученные при исследовании методом молекулярной динамики механизмов пластической деформации вблизи симметричных границ зерен наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в интерметаллиде Ni_3Al в условиях одноосной деформации.

Интерметаллид Ni_3Al выделяется из ряда подобных упорядоченных сплавов уникальным свойством – положительной температурной зависимостью предела текучести. В связи с этим такие сплавы находят практическое применение в качестве жаропрочных и высокопрочных конструкционных материалов.

Методика компьютерного эксперимента. Границы наклона создавались посредством поворота двух кристаллов Ni_3Al относительно друг друга на угол разориентации θ вокруг осей $\langle 111 \rangle$ или $\langle 100 \rangle$ (рис. 1). Получающийся расчетный блок обрезался по краям таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот. Атомы, находящиеся за границей этого параллелепипеда, удалялись. Затем удалялись атомы, находящиеся за линией межзеренной границы в области другого зерна. После процедуры удаления лишних атомов проводилась первичная динамическая релаксация при начальной температуре 0 К в течение 10 пс (1000 итераций). При этом атомы смещались в по-

ложения, соответствующие минимуму энергии, что сопровождалось незначительным разогревом расчетного блока. После стабилизации температуры проводилось охлаждение расчетного блока до 0 К.

Количество атомов в расчетном блоке составляло от $2 \cdot 10^5$ до $5 \cdot 10^5$. Оси координат были взяты следующими (рис. 1): ось X – перпендикулярно плоскости межзеренной границы в глубь одного из зерен; Y – вдоль границы зерна и перпендикулярно оси наклона, Z – вдоль оси наклона. Вдоль осей X и Y были наложены жесткие граничные условия, вдоль Z – периодические.

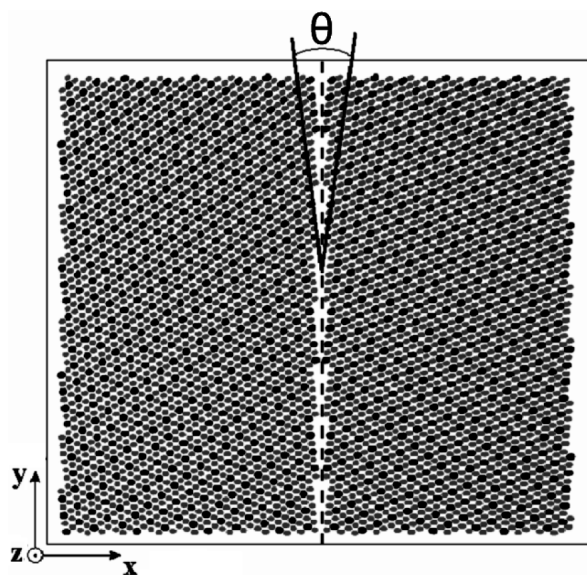


Рис. 1. Пример стартовой конфигурации расчетного блока в проекции на плоскость (111), содержащего симметричную границу зерен наклона $\langle 111 \rangle$ (показана пунктиром) с углом разориентации $\theta = 7^\circ$

При описании межатомных взаимодействий в настоящей работе применялись парные центральные межатомные потенциалы Морза в виде

$$\phi_{KL}(r_{ij}) = D_{KL} \beta_{KL} e^{-\alpha_{KL} r_{ij}} (e^{-\alpha_{KL} r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где α_{KL} , β_{KL} , D_{KL} – параметры потенциалов, определяющих взаимодействие пары атомов сортов K и L ; r_{ij} – расстояние между i и j атомами.

Параметры потенциалов, характеризующие связи пар атомов А–А и В–В определялись по экспериментально известным свойствам чистых металлов: энергии сублимации, параметра решетки и объемного модуля упругости. Параметры потенциалов, соответствующих связям А–В, находились с учетом экспериментальных данных по интерметаллиду Ni_3Al : параметру решетки, объемному модулю упругости и энергиям образования антифазных границ типа $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ и $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ согласно методике, приведенной в [9]. Была проведена апробация потенциалов Морза по температурному коэффициенту линейного расширения, скорости рас пространения продольных и поперечных упругих

волн, энергии образования и миграции вакансий [10, 11]. Полученные значения удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Температура расчетного блока задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. Временной шаг интегрирования в уравнениях движения равнялся $0,01 \text{ пс} = 10^{-14} \text{ с}$.

Одноосная деформация задавалась путем изменения соответствующих межатомных расстояний в стартовой конфигурации расчетного блока. В работе рассматривались деформации вдоль осей X , Y и Z . Продолжительность молекулярно-динамических экспериментов составляла $0,1\text{--}0,2 \text{ нс}$, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной. Температура во всех экспериментах задавалась равной $0,6 \cdot T_{\text{пл}}$, где $T_{\text{пл}}$ – температура плавления рассматриваемого металла. В завершении компьютерного эксперимента, для исключения тепловых смещений атомов, проводилось охлаждение расчетного блока до 0 К. Для изучения атомных механизмов структурной перестройки использовались специальные визуализаторы, основными из которых являлись визуализатор смещений атомов относительно начальных положений и визуализатор распределения потенциальной энергии.

Результаты. Значения стартовой деформации расчетного блока, при которых начинались пластические сдвиги при включении молекулярно-динамического эксперимента, зависели от угла разориентации зерен и от направления деформирования. Для пластической деформации характерным являлось резкое увеличение интенсивности зернограницной диффузии и появление коллективных смещений большого числа атомов. Причиной таких коллективных смещений являлись внутризеренное скольжение и зернограницное проскальзывание.

При малых значениях стартовой деформации в основном реализовывалось зернограницное проскальзывание, при котором происходили смещения атомов вдоль границы зерен. Причем для границ $\langle 111 \rangle$ в процесс проскальзывания вовлекалось большее число атомов, и относительное смещение зерен протекало более интенсивно, чем в случае границ $\langle 100 \rangle$. С увеличением величины стартовой деформации включался механизм внутризеренного скольжения, которое заключалось в испускании дислокации с границы зерен (рис. 2).

Пластическая деформация осуществлялась при этом посредством совместного действия зернограницного проскальзывания и внутризеренного скольжения.

Сильная деформация сжатия вдоль осей Y и Z приводила к расщеплению зернограницных дислокаций и миграции границы, а деформация растяжения, за счет увеличения избыточного свободного объема, приводила к образованию аморфной структуры в области границы зерен. При расщеплении зернограницной дислокации в бикристалле Ni_3Al в зерно испускалась частичная дислокация, в результате чего в зерне возникала антифазная граница (рис. 3).

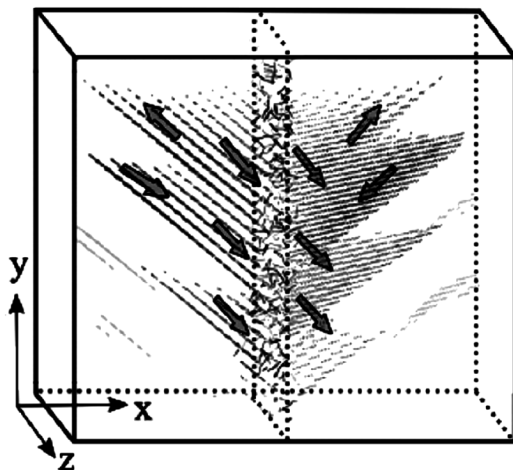


Рис. 2. Совместное действие внутризеренного скольжения и зернограницного проскальзывания в Ni_3Al , содержащем симметричную границу зерен наклона $\langle 111 \rangle \theta = 16^\circ$, при стартовой деформации вдоль оси Y $\epsilon_y = 8\%$.

Отрезками показаны смещения атомов, стрелками – направления сдвигов, пунктирным контуром – положение границы

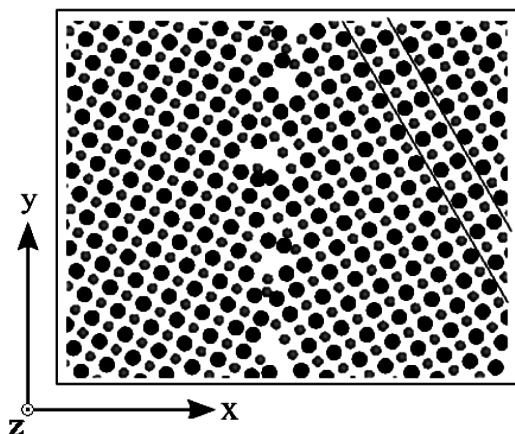


Рис. 3. Образование полосы АФГ при внутризеренном скольжении в Ni_3Al , содержащем симметричную границу зерна наклона $\langle 100 \rangle \theta = 16^\circ$ при стартовой деформации сжатия вдоль оси Y $\epsilon_y = -8\%$. На рисунке изображен срез расчетного блока

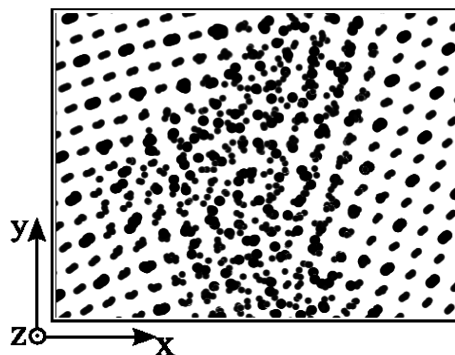


Рис. 4. Аморфизация симметричной границы зерна наклона $\langle 100 \rangle$ при $\theta = 16^\circ$ при стартовой деформации $\epsilon_x = 8\%$. На рисунке изображен срез расчетного блока

При больших значениях стартовой деформации сжатия и растяжения ($|\epsilon| \approx 7-9\%$ в зависимости от параметров границы зерен) происходило интенсивное испускание с границы зерна комплекса дислокаций, что приводило к образованию структуры, состоящей из множества разориентированных относительно друг друга вдоль плотноупакованных плоскостей кристаллических кластеров. Размер кластеров зависел от величины приложенного напряжения.

При высоких значениях стартовой деформации растяжения в границах $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ ($\epsilon > 9\%$) внутризеренное скольжение и зернограницное проскальзывание были менее выражены на фоне разрушения кристаллической структуры вблизи межзеренной границы с образованием аморфной области (рис. 4). Избыток свободного объема, возникающий при растяжении, накапливался в такой области. При охлаждении расчетного блока атомы, находящиеся в аморфной области, оседали на ее границах, что приводило к образованию поры.

Заключение. Таким образом, в настоящей работе показано, что внутризеренное скольжение может осуществляться за счет расщепления зернограницных дислокаций при пластической деформации. Пластическая деформация вблизи границ зерен наклона в Ni_3Al осуществляется преимущественно посредством совместного действия зернограницного проскальзывания и внутризеренного скольжения. При испускании с границы частичной дислокации в зерне образуется антифазная граница.

Библиографический список

1. Дударев Е.Ф. Микропластическая деформация и предел текучести поликристаллов. – Томск, 1988.
2. Гуткин М.Ю., Овидько И.А. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // Успехи механики. – 2003. – №1.
3. Розенберг В.М. Ползучесть металлов. – М., 1967.
4. Гуткин М.Ю., Овидько И.А., Скиба Н.В. Зернограницное скольжение и эмиссия решеточных дис-

- локаций в нанокристаллических материалах при сверхпластической деформации // ФТТ. – 2005. – Т. 47, №9.

5. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. – М., 1987.

6. Kumar K.S., Van Swygenhoven H., Suresh S. Mechanical Behavior of Nanocrystalline Metals and Alloys // Acta Materialia. – 2003. – V. 51.

7. Ханнанов Ш.Х., Никаноров С.П. Стесненное зернограницное проскальзывание и неупругость поликристаллов // ЖТФ. – 2006. – Т. 76, №1.

8. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Skiba N.V. Crossover from Grain Boundary Sliding to Rotational Deformation in Nanocrystalline Materials // Acta Materialia. – 2003. – V. 51.

9. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // ФММ. – 1984. – Т. 58, №2.

10. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Определение температуры плавления и температурного коэффициента линейного расширения методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2004. – №1.

11. Аксенов М.С., Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Локально инициированные упругие волны в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – Т. 2, №3.