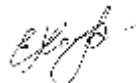


На правах рукописи



ХАРИНА ЕВГЕНИЯ ГЕННАДЬЕВНА

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИММЕТРИЧНЫХ
ГРАНИЦ ЗЕРЕН В СПЛАВЕ Ni_3Al**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность

01.04.07 - физика конденсированного состояния

Барнаул - 2010

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова» и ГОУ ВПО «Кузбасская государственная педагогическая академия».

Научный руководитель: заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук,
профессор Старостенков Михаил Дмитриевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Козлов Эдуард Викторович

кандидат физико-математических наук, доцент
Рудер Давыд Давыдович

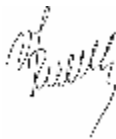
Ведущая организация: Сибирский физико-технический институт при
Томском государственном университете, г.Томск

Защита состоится “23” декабря 2010 года в 14.00 час. на заседании
диссертационного совета Д 212.004.04 Алтайского государственного технического
университета им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Алтайского государственного
технического университета им. И.И. Ползунова.

Автореферат разослан “19” ноября 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные печатью организаций, просим
присылать в 2-х экземплярах на адрес университета.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Специфика свойств как крупнозернистых, так и нанокристаллических материалов определяется наличием в них границ зерен. Что касается атомной структуры границ зерен в поликристаллах, то ее исследования ведутся уже более ста лет и накоплен богатый экспериментальный материал. Методами электронной и ионной микроскопии, рентгеновской дифракции было установлено, что граница не является бесструктурной и ее «ширина» достигает нескольких межатомных расстояний. Кроме того, было выявлено периодическое строение не только специальных границ, но и границ зерен общего типа [1]. Однако нанокристаллические материалы обладают чрезвычайно развитыми границами раздела, что обуславливает отличие их прочностных свойств от свойств крупнозернистых поликристаллов. По этой причине изучение микроструктуры компактных нанокристаллических веществ сосредоточено, в основном, на выяснении особенностей строения межзеренных границ. К одной из главных особенностей относится геометрический тип межзеренной границы.

Материалы с высокой долей специальных границ показывают большую подверженность деформационной ползучести, появлению трещин, а также сопротивление коррозионному разрушению по сравнению с материалами, обладающими высокой долей границ общего типа [2, 3]. Кроме того, специальные границы менее склонны к образованию сегрегаций, являющихся дополнительным концентратором напряжений.

Другим важным вопросом в современном материаловедении является нестабильность структуры наноматериалов, и, как следствие, нестабильность их физико-химических и физико-механических свойств. Так при термических, радиационных, деформационных и т.п. воздействиях неизбежны рекристаллизационные, релаксационные, сегрегационные процессы изменяющие структуру наноматериалов [4]. Все эти процессы в наибольшей степени определяются диффузией в объеме материала и вблизи межзеренных границ. Изучение механизмов атомной перестройки, происходящей на границах зерен при термических и деформационных воздействиях на материал, позволит понять направление, в котором можно воздействовать на этот материал для придания ему необходимых свойств. Особенную важность это приобретает в настоящее время в связи с интенсивным внедрением программного создания и упрочнения материалов [5].

Достаточно подробно была изучена атомная структура и ее изменение при температурно-силовых воздействиях вблизи несимметричных границ зерен в ряде ГЦК металлов и упорядоченных сплавов [6-8]. Среди них был рассмотрен интерметаллид Ni_3Al , обладающий уникальным свойством положительной температурной зависимости предела текучести и имеющий огромные перспективы в качестве основы для суперсплавов в авиационно-космической промышленности. В связи с этим представляется актуальным продолжить начатые ранее исследования по выявлению особенностей атомной структуры межзеренных границ различного типа в перспективном интерметаллическом соединении Ni_3Al .

Цель настоящей работы заключается в изучении методом молекулярной динамики механизмов атомной перестройки вблизи симметричных границ зерен наклана в сплаве Ni_3Al при температурно-силовых воздействиях и сравнении их с механизмами, действующими вблизи несимметричных границ зерен в том же сплаве.

Исходя из цели диссертационной работы, *были поставлены следующие задачи:*

1. Построить трехмерную молекулярно-динамическую модель для исследования на атомном уровне структуры симметричных границ зерен с различными углами и ориентациями осей наклона;
2. Изучить атомные смещения вблизи симметричных границ зерен в процессе низкотемпературной динамической релаксации;
3. Вычислить энергии активации механизмов диффузии вблизи симметричных границ зерен наклона типа $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$;
4. Выявить вклад вакансионного механизма в процессы диффузии вблизи симметричных границ зерен в сплаве Ni_3Al ;
5. Установить механизмы диффузии, влияющие на структурную перестройку сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен в условиях одноосных деформаций сжатия и растяжения;
6. Определить изменение концентрации атомов с ГЦК топологией ближайших соседей при термоактивации и деформации и установить топологию ближайших соседей образующихся дефектных областей.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что на примере упорядоченного сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен наклона впервые изучено влияние атомной структуры на процесс зернограничной диффузии в интервалах низких, средних и высоких температур. На основании результатов молекулярно-динамических экспериментов предложено описание трех линейных участков на графиках зависимости Аррениуса, отвечающих активации определенного механизма диффузии. Выявлен процесс накопления атомов Ni в области межзеренной границы в процессе низкотемпературной динамической релаксации. Проведен сравнительный анализ механизмов диффузии вблизи симметричных и несимметричных границ зерен. Подробно исследованы структурные трансформации сплава Ni_3Al с симметричными границами с учетом топологии ближайших соседей при нагреве и деформации.

Научная и практическая ценность диссертационной работы заключается в том, что результаты расчетов могут быть использованы для исследования процессов, происходящих на межзеренных поверхностях, образованных симметрично разориентированными кристаллитами. Полученная атомная структура симметричных границ зерен может быть использована для анализа электронномикроскопических изображений высокого разрешения. Поведение атомов в приграничной области в условиях температурно-силовых воздействий может быть учтено при программном упрочнении материалов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В сплаве Ni_3Al тип межзеренной границы не влияет на протекание основных механизмов диффузии: вблизи симметричных и несимметричных границ зерен атомные механизмы диффузии одинаковы;
2. Активация определенного механизма диффузии вблизи симметричных границ зерен наклона в сплаве Ni_3Al зависит от температуры сплава, угла разориентации зерен и ориентации оси наклона;
3. Основной вклад в нарушение ближнего порядка при нагреве и деформации вносится атомами Ni;
4. Трансформации структуры сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен при деформации обусловлены образованием локальных областей с ГПУ топологией

ближайших соседей и областей, число ближайших соседей в которых меньше двенадцати.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы доложены на региональных, российских и международных конференциях и симпозиумах: X Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Бийск, Россия, 8–12 сентября 2008 г.); V Международной научно-технической школе-конференции «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию» (Москва, Россия, 10–13 ноября 2008 г.); IX Молодежной школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества «СПФКС–9» (Екатеринбург, Россия, 17–23 ноября 2008 г.); Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации-2008» (Новосибирск, Россия, 4–7 декабря 2008 г.); Первой международной школе-семинаре по фундаментальным проблемам микро- и наносистемной техники «MNST'2008» (Новосибирск, Россия, 10–13 декабря 2008 г.); Первой региональной научно-практической конференции «Наноиндустрия Алтая 2009» (Бийск, Россия, 26 марта 2009 г.); XV Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых «ВНКСФ–15» (Кемерово–Томск, Россия, 26 марта–2 апреля 2009 г.); VI Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и молодежь-2009» (Барнаул, Россия, 23 апреля 2009 г.); XV Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Современная техника и технологии-2009» (Томск, Россия, 4–8 мая 2009 г.); Международном симпозиуме «Перспективные материалы и технологии» (Витебск, Беларусь, 25–29 мая 2009 г.); XVII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (Самара, Россия, 23–25 июня 2009 г.); Международной конференции по физической мезомеханике, компьютерному моделированию и разработке новых материалов (Томск, Россия, 7–11 сентября 2009 г.); Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы. Создание, структура, свойства - 2009» (Томск, Россия, 8–11 сентября 2009 г.); VI Международной научной школе-конференции «Фундаментальное и прикладное материаловедение» (Барнаул, Россия, 16–18 сентября 2009 г.); Третьей международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов-2009» (Москва, Россия, 12–15 октября 2009 г.); Всероссийской научно-технической конференции с международным участием «Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы» (Красноярск, Россия, 15–16 октября 2009 г.); Всероссийской студенческой конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации-2009» (Новосибирск, Россия, 4–5 декабря 2009 г.); Научно-практической конференции «Современные направления теоретических и прикладных исследований'2010» (Одесса, Украина, 15–26 марта 2010 г.); V (XXXVII) Международной научно-практической конференции «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей» (Кемерово, Россия, 19–24 апреля 2010 г.); I Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике (Владивосток, Россия, 12–14 мая 2010 г.); V Международной конференции с элементами школы для молодежи «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений-2010» (Тамбов, Россия, 21–26 июня 2010 г.); XI Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Бийск, Россия, 6–10 сентября 2010 г.); Международной школе-конференции «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы-2010»

(Уфа, Россия, 11–15 октября 2010 г.); VI Международной конференции «Прочность и разрушение конструкций» (Оренбург, Россия, 20–22 октября 2010 г.).

Публикации. Результаты работы опубликованы в 21 статье, четыре из которых в журналах, включенных в список ВАК Минобрнауки РФ для публикации материалов диссертационных работ, и в 5 тезисах докладов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 237 наименований. Работа изложена на 236 страницах машинописного текста, содержит 14 таблиц и 82 рисунка.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 09-08-00695-а

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность, практическая значимость и научная новизна выбранного направления исследований. Сформулирована цель диссертационной работы и поставлены задачи, необходимые для ее достижения. Представлены защищаемые положения и краткое содержание работы по главам.

В первой главе дается обзор представлений о строении межзеренных границ различного типа и их влиянии на прочность металлов и сплавов. В первом разделе главы подробно рассмотрены модели границ зерен: аморфной прослойки, дислокационные и решетки совпадающих узлов.

Во втором разделе рассматривается деформационное поведение материалов, содержащих границы зерен различного типа. Интерес к данной проблеме вызван отличием поведения мелкозернистых и крупнозернистых материалов в условиях пластической деформации. Поскольку в мелкозернистых материалах на долю межзеренных границ приходится более 50% атомов всего объема, то высока вероятность наличия в таких материалах наборов границ зерен с произвольными ориентациями плоскости границы относительно зерен. Также обсуждаются некоторые результаты по исследованию зернограницного проскальзывания (ЗГП) и внутризеренного скольжения (ВЗС) как основных механизмов пластической деформации. Отмечено, что трудности в исследовании микромеханизмов ЗГП и ВЗС могут быть устранены при применении компьютерного эксперимента.

В третьем разделе главы рассматриваются этапы становления теории зернограницной диффузии. Описываются результаты экспериментальных исследований, показывающих значительные отличия коэффициентов диффузии в объеме зерен и на их границах. Рассмотрены механизмы диффузии, выявленные вблизи несимметричных границ зерен при проведении молекулярно-динамических экспериментов в работе [7].

Четвертый раздел главы касается вопросов применения методов компьютерного моделирования в физике конденсированных сред. Приводятся основные достоинства и недостатки наиболее популярных методов моделирования. Обосновывается выбор метода молекулярной динамики для проведения экспериментов в рамках диссертационной работы. В основе метода молекулярной динамики лежит описание поведения заданной совокупности атомов системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона. Решение системы уравнений осуществляется посредством численного интегрирования дифференциальных уравнений. Температура расчетной ячейки задается через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. При этом начальные

скорости атомов принимаются равными по абсолютной величине, но произвольными по направлениям. Полная кинетическая энергия должна соответствовать заданной температуре, а суммарный импульс расчетной ячейки быть равным нулю.

Во второй главе описываются этапы построения компьютерной модели сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен, применяемой при проведении молекулярно-динамических экспериментов. При построении компьютерной модели необходимо учитывать реалистичность потенциала межатомных взаимодействий, производительность машинных расчетов, погрешность вычислений, а также наглядность применяемых визуализаторов атомной структуры.

В первом разделе главы обосновывается выбор потенциальной функции для описания межатомных взаимодействий в модельном расчетном блоке Ni_3Al с симметричными границами зерен. Основной проблемой при выборе закона межатомных взаимодействий является сочетание достоверности получаемых результатов и простоты потенциальной функции, от которой напрямую зависит скорость производимых вычислений. Считается, что использование более простых парных эмпирических потенциалов не дает достоверных результатов в применении к металлическим системам. Для оценки надежности получаемых результатов в настоящей работе проведено две серии компьютерных экспериментов. В первой серии экспериментов межатомные взаимодействия в расчетном блоке задавались парным центральным потенциалом Морза:

$$j(r_{ij}) = Dbe^{-ar_{ij}}(e^{-ar_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, a – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, $b = e^{a \cdot r_0}$, r_0 – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами.

Во второй серии экспериментов межатомные взаимодействия описывались при помощи многочастичного tight-binding потенциала Клери-Розато, согласно которому потенциальная энергия кристалла E равна [9]:

$$E = \sum_i \left[- \left(\sum_{i \neq j} x_{ab}^2 e^{-2q_{ab}(r_{ij}/r_{ab}^0 - 1)} \right)^{1/2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} A_{ab} e^{-p_{ab}(r_{ij}/r_{ab}^0 - 1)} \right], \quad (2)$$

здесь первое слагаемое представляет собой функцию от электронной плотности компонент, а второе слагаемое – ион-ионное отталкивание Борна-Майера. Здесь $\zeta_{\alpha\beta}^0$, $p_{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$ и r_{ab}^0 – параметры потенциала. Индексы α и β относятся к атомам различных типов.

В следующем разделе описаны основные этапы процесса моделирования симметричных границ зерен в расчетном блоке сплава Ni_3Al . Для сопоставления результатов настоящей работы с результатами, полученными при моделировании несимметричных границ зерен, в расчетном блоке задавались углы разориентации зерен 7° , 16° и 22° . Такие же значения углов разориентации принимались в работе [7] при моделировании несимметричных границ зерен с осями наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в интерметаллиде Ni_3Al .

В четвертом разделе главы описаны основные визуализаторы атомной структуры, используемые в работе. На всех этапах исследования применялся

визуализатор атомных смещений, который позволяет определить положения атомов относительно начального положения в любой момент времени. При помощи данного визуализатора были установлены основные механизмы диффузии вблизи симметричных границ зерен, направления движения атомов в процессе ЗГП и ВЗС при деформации. Для описания атомной структуры зернограницных дислокаций (ЗГД) эффективным оказался визуализатор распределения атомов по потенциальным энергиям, позволяющий отображать только атомы с максимальной энергией. Кроме того, при исследовании использовались визуализаторы ближнего порядка, топологии ближайших соседей, диаграммы разориентации по кластерам.

В последнем разделе данной главы приводятся основные формулы для вычисления количественных характеристик процесса диффузии. Как правило, количественная оценка процесса диффузии производится с использованием трех численных параметров входящих в уравнение Аррениуса. Уравнение (3) показывает, что к таким численным параметрам относятся коэффициент диффузии D , энергия активации E и предэкспоненциальный множитель D_0 .

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \quad (3)$$

где k – постоянная Больцмана. Продолжительность молекулярно-динамических исследований для нахождения коэффициентов диффузии составляла $0,005-0,1$ нс при заданной температуре, которая поддерживалась постоянной в ходе эксперимента при помощи термостатирования.

В третьей главе изучаются механизмы зернограницной диффузии с учетом атомной структуры симметричных границ зерен в интерметаллиде Ni_3Al .

В настоящей работе принято следующее обозначение границ зерен [10]: сначала указывается угол разориентации зерен в градусах, затем кристаллографическое направление оси наклона. Например, запись $7^\circ \langle 100 \rangle$ означает границу, образованную разворотом зерен на 7° вокруг общего кристаллографического направления $\langle 100 \rangle$.

Для приведения расчетного блока в состояние с минимальной энергией проводилась низкотемпературная динамическая релаксация. В первой части главы исследуются атомные смещения при сопряжении зерен в процессе релаксации. Атомы при сопряжении зерен смещаются равномерно относительно плоскости границы без образования вихревых атомных смещений, выявленных в работе [7] вблизи несимметричных границ зерен. В ходе низкотемпературной динамической релаксации формируется атомная структура симметричных границ зерен.

Во второй части главы описываются атомные структуры симметричных границ зерен типа $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ с углами разориентации 7° , 16° , 22° в сплаве Ni_3Al . Показано, что основным элементом атомной структуры границ зерен обоих типов являются зернограницные дислокации. На границах $\langle 100 \rangle$ зернограницные дислокации находятся в 2-х конфигурациях: вершинных и единичных краевых дислокаций. За счет этого плотность их на границах типа $\langle 100 \rangle$ выше, чем на границах $\langle 111 \rangle$. В структуре симметричных границ зерен типа $\langle 111 \rangle$ образуются 60° -е вершинные дислокации. Важным элементом в структуре малоугловых границ $\langle 100 \rangle$ являются антифазные границы (АФГ) $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{100\}$ термического и сдвигового типов. Если в атомной структуре несимметричных границ зерен происходило чередование АФГ термического типа с прослойками идеальной упаковки атомов, то на симметричных границах зерен чередуются АФГ термического типа из атомов подрешеток Ni и Al. В атомной структуре границ зерен $\langle 111 \rangle$

внедренные атомы Al образуют краудионы, кроме того, с увеличением угла разориентации зерен появляется тенденция к накоплению атомов Ni в приграничной области. Наибольшие отличия в структуре границ зерен $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ выявлены при углах разориентации кристаллитов $\theta=7^\circ$. При $\theta>16^\circ$ происходит перекрытие полей напряжений соседних ЗГД, и граница выглядит как единый дефект. Атомная структура границ $7^\circ\langle 100 \rangle$ и $7^\circ\langle 111 \rangle$ показана на рис. 1 и рис. 2 соответственно.

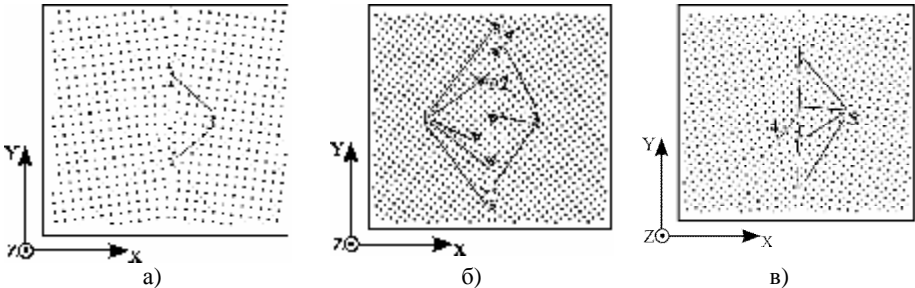


Рис.1. Атомная структура симметричных границ зерен $7^\circ\langle 100 \rangle$ в сплаве Ni_3Al :
а) подрешетка Al; б) подрешетка Ni; в) сверхструктура $L1_2$.

- 1) зернограничные вакансии;
- 2) внедренные атомы Ni;
- 3) зернограничные дислокации различных конфигураций;
- 4) АФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ сдвигового типа;
- 5) АФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ термического типа.

Условные обозначения: \bullet – атомы Al, \circ – атомы Ni.

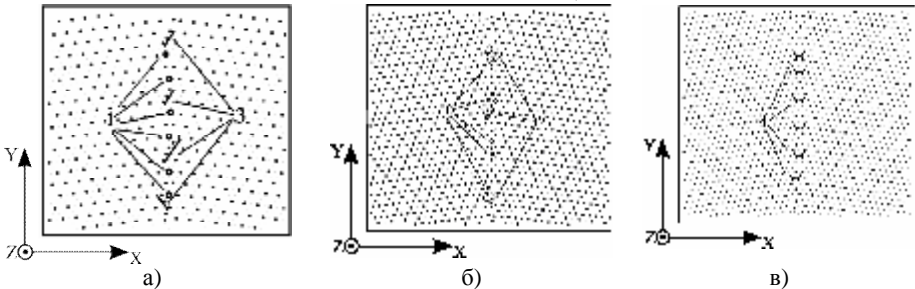


Рис.2. Атомная структура симметричных границ зерен $7^\circ\langle 111 \rangle$ в сплаве Ni_3Al :
а) подрешетка Al; б) подрешетка Ni; в) сверхструктура $L1_2$.

- 1) зернограничные вакансии;
- 2) внедренные атомы Ni;
- 3) внедренные атомы Al, образовавшие краудионы;
- 4) вершинные зернограничные дислокации.

Условные обозначения: \bullet – атомы Al, \circ – атомы Ni.

Вероятность возникновения механизмов диффузии во многом зависит от геометрической структуры ЗГД, в частности, от наличия на них ступенек. С увеличением температуры наблюдается перестройка в структуре ЗГД, связанная с изменением расстояния между ступеньками и их конфигурации. Плотность ступенек на ЗГД в структуре границ $\langle 100 \rangle$ выше, по сравнению с ЗГД в структуре границ $\langle 111 \rangle$. Атомы Al, в основном, играют роль при достройке ступенек на ЗГД, которые

образованы преимущественно атомами Ni. При уширении ступенек и их перестройке, в результате нагрева сплава, создаются условия для возникновения определенных механизмов диффузии.

В третьей части главы исследуются механизмы диффузии в монокристаллах Ni_3Al с 1, 8 и 12 внедренными вакансиями. Данные эксперименты проводились с целью оценки вклада вакансионных механизмов в процесс диффузии вблизи симметричных границ зерен. На графиках зависимости $Ln(D)$ от T^{-1} выявлены три линейных участка. Температура, при которой происходит переход от одного линейного участка к другому, соответствует активации определенного механизма диффузии. Переход от первого линейного участка ко второму для всех рассмотренных монокристаллов Ni_3Al с вакансиями возникает при $T=400 K$. При данной температуре начинает действие первый механизм диффузии, заключающийся в элементарных актах миграции вакансий. При более высоких температурах, отвечающих второму изгибу на графиках зависимости $Ln(D)$ от T^{-1} , становятся возможными циклические перестановки атомов по треугольнику ближайших соседей и миграции вакансий на расстояния много большие межатомных. В процессе миграции вакансий образуются локальные области нарушения сверхструктурного порядка. В таблице 1 представлены вычисленные значения энергии активации каждого из механизмов диффузии в монокристалле Ni_3Al .

Таблица 1
Энергии активации диффузии в монокристалле сплава Ni_3Al с различным числом внедренных вакансий

Тип расчетного блока	Температурный интервал	Q, эВ	
		Элемент сплава	
		Ni	Al
Чистый монокристалл	-	0,1239	0,1260
Монокристалл с 1 вакансией	$T < 400K$	0,0069	0,0048
	$400K < T < 1200K$	0,1089	0,1312
	$T > 1200K$	0,9978	1,2902
Монокристалл с 8 вакансиями	$T < 400K$	0,0101	0,0081
	$400K < T < 1000K$	0,1074	0,0996
	$T > 1000K$	0,9661	0,9232
Монокристалл с 12 вакансиями	$T < 400K$	0,0083	0,0083
	$400K < T < 900K$	0,0965	0,1275
	$T > 900K$	0,9868	0,9689

В четвертом разделе главы исследовались механизмы диффузии вблизи симметричных границ зерен в сплаве Ni_3Al . На основании полученных результатов произведен сравнительный анализ механизмов диффузии вблизи симметричных и несимметричных границ зерен. На графиках зависимости $Ln(D)$ от T^{-1} , построенных для бикристаллов Ni_3Al с симметричными границами зерен, также как и для монокристаллов Ni_3Al с вакансиями, выявлены три линейных участка (рис. 3). Единичные акты миграции вакансий вблизи ядер ЗГД возникают уже при температурах $T=100-200K$. Энергия активации миграции вакансий вблизи симметричных границ зерен более чем в 10 раз меньше, по сравнению с монокристаллами Ni_3Al . Таким образом, в интервале низких температур вакансионный механизм является доминантным механизмом зернограничной диффузии.

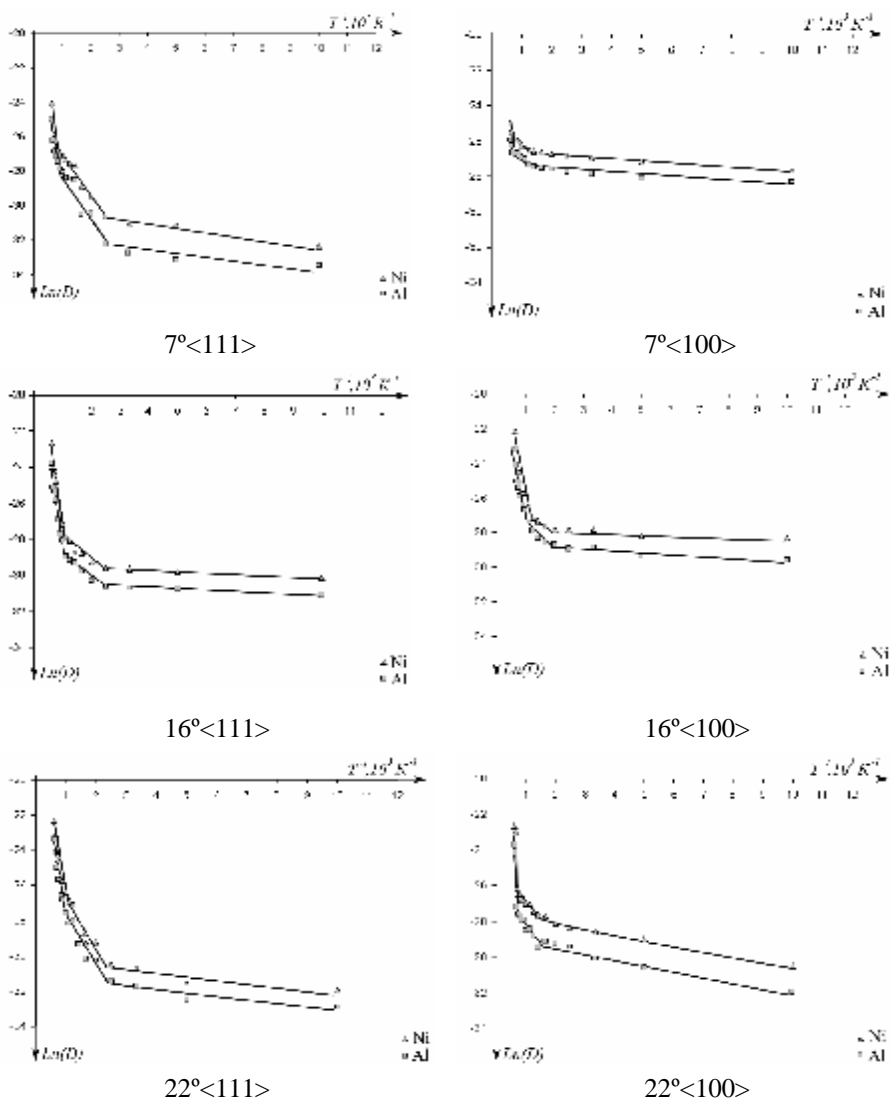


Рис.3. Графики зависимости $Ln(D)$ от T^{-1} для сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен наклона.

Так же как и в сплаве Ni_3Al с несимметричными границами зерен, в настоящей работе выявлены три основных механизма диффузии вблизи симметричных границ зерен: а) миграция атомов вдоль ядер ЗГД; б) циклические перестановки 3-5 атомов в области ядер ЗГД; в) образование цепочек смещенных атомов от ядра одной дислокации к ядру другой. Активация каждого из этих

механизмов происходит в определенном интервале температур. Энергии активации механизмов диффузии на соответствующих температурных интервалах представлены в таблицах 2 и 3. Первый изгиб на зависимости Аррениуса означает активацию механизма миграции атомов вдоль ядер ЗГД. В такой миграции участвуют 3-4 атома одновременно и их перемещения затрагивают три атомные плоскости. Механизм циклической перестановки атомов возникает при температурах 600-700K, в зависимости от значения угла разориентации зерен.

Таблица 2
Энергии активации диффузии атомов Ni и Al в сплаве Ni₃Al вблизи симметричных границ зерен наклона <111>

$\theta, ^\circ$	Потенциал Клери-Розато			Потенциал Морза		
	Температурный интервал	Q, эВ		Температурный интервал	Q, эВ	
		Ni	Al		Ni	Al
7	T<400K	0,0184	0,0098	Ni: T<500K Al: T<600	0,0080	0,0101
	400K< T <1200K	0,2041	0,2405	Ni: 500K< T <1200K Al: 600K< T <1300K	0,1457	0,1713
	T>1200K	1,0398	0,9177	T>1200K T>1300K	0,9580	1,1892
16	T<400K	0,0065	0,0049	T<400K	0,0175	0,0166
	400K< T <900K	0,1060	0,1093	400K< T <1200K	0,1626	0,1613
	T>900K	0,9144	0,9107	T>1200K	1,0354	1,0809
22	T<400K	0,0163	0,0161	T<400K	0,0265	0,0237
	Ni: 400K< T <900K Al: 400K< T <1000K	0,2145	0,2195	400K< T <1100K	0,1341	0,1379
	Ni: T>900K Al: T>1000K	0,7854	0,9412	T>1100K	0,8971	0,9514

Таблица 3
Энергии активации диффузии атомов Ni и Al в сплаве Ni₃Al вблизи симметричных границ зерен наклона <100>

$\theta, ^\circ$	Потенциал Клери-Розато			Потенциал Морза		
	Температурный интервал	Q, эВ		Температурный интервал	Q, эВ	
		Ni	Al		Ni	Al
7	T<800K	0,0107	0,0093	T<400K	0,0106	0,0106
	800K< T <1200K	0,1423	0,1438	400K < T < 1200K	0,0618	0,0627
	T>1200K	0,3303	0,2989	T >1200K	0,7575	0,7534
16	T<500K	0,0062	0,0088	T<500K	0,0031	0,0009
	500K< T <900K	0,1192	0,1231	500K < T < 900K	0,2323	0,2436
	T>900K	0,6985	0,6716	T >900K	0,5507	0,5918
22	T<500K	0,0053	0,0055	T<500K	0,0135	0,0118
	500K< T <1000K	0,1658	0,1681	500K < T < 900K	0,2134	0,2276
	T>1000K	0,6245	0,5883	T >900K	0,5998	0,5951

На втором линейном участке, вблизи границ зерен <100>, механизм циклической перестановки атомов является доминирующим среди всех остальных механизмов за

счет более высокой плотности ступенек на ЗГД. В расчетных блоках Ni_3Al с симметричными границами $\langle 100 \rangle$ выявлено до 7 циклов, происходящих одновременно, вблизи нескольких ЗГД. Второй изгиб на зависимости Аррениуса соответствует активации механизма цепочек смещенных атомов между соседними ЗГД. Для инициации данного механизма требуются наибольшие температуры, способные обеспечить перекрытие полей напряжений соседних дислокаций.

Как правило, второму линейному участку на графиках зависимости $\ln(D)$ от T^{-1} соответствует активация первого и второго механизмов диффузии. Исключение составляет расчетный блок сплава Ni_3Al с границей зерен $7^\circ \langle 100 \rangle$. За счет высокой доли АФГ термического типа в структуре границы, первый изгиб на зависимостях соответствует температуре в два раза большей, чем для расчетных блоков с другими значениями угла разориентации и оси наклона. Первый и второй механизм диффузии в данном случае локализованы между вершинными ЗГД и полосками АФГ.

С увеличением угла разориентации зерен температура необходимая для инициации третьего механизма диффузии уменьшается. Вблизи симметричных границ зерен с углами $\theta=16^\circ$ и $\theta=22^\circ$ при $T=500-600 \text{ K}$ возникает механизм диффузии, который не был выявлен при исследовании несимметричных границ зерен. Там, где область перекрытия полей напряжений ЗГД образована чередующимися участками высоких и низких энергий, возникают парные смещения атомных рядов лежащих на линии нового ядра в направлении перпендикулярном этой линии.

При температурах близких к плавлению происходит интенсификация всех механизмов диффузии вблизи межзеренной границы, и, как следствие, ее аморфизация. На симметричных границах с $\theta=7^\circ$ плавление имеет локальный очаговый характер и не охватывает всю межзеренную границу. С увеличением угла разориентации зерен от 7° до 22° температура, при которой начинается процесс аморфизации уменьшается от 1600 K до 1200 K .

Значения энергии активации механизмов диффузии, вычисленные в рамках данной работы, находятся в пределах интервалов экспериментальных данных. В [11, 12] приводятся данные для энергии активации диффузии в поликристалле Ni: 1,13-1,36 эВ. В [13] энергии активации диффузии по границам зерен для поликристаллических никеля и алюминия составляют: Ni – 1,19 эВ, Al – 0,86 эВ. Энергия активации по дислокационным трубкам в поликристаллическом никеле и алюминии согласно [13]: Ni – 1,7 эВ, Al – 0,8 эВ. Сравнение таблиц 1, 2 и 3 показывает, что в основе всех трех механизмов зернограничной диффузии лежит процесс миграции вакансий. Низкие значения энергии активации механизмов диффузии вблизи границам зерен обусловлены локализацией свободного объема в области ЗГД.

В заключительном разделе главы исследуется процесс нарушения ближнего порядка в результате нагрева сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен. Для этого вычисляется значение параметра ближнего порядка σ на первой координационной сфере в объеме расчетного блока и в приграничной области. Ширина приграничной области в расчетах принимается равной 2 нм. Погрешность в вычислении параметра ближнего порядка составляет 5% от параметра решетки. Анализ графиков зависимости $\sigma(T)$ показывает, что изменение параметра ближнего порядка в объеме расчетного блока варьируется от -0,35 до -0,25. Как видно, величина $\sigma=-0,33$, характеризующая идеальный порядок упаковки атомов компонент сверхструктуры L_{12} , находится в рамках данного интервала. Наибольшее отклонение параметра ближнего порядка ($\sigma=-0,2$) от идеального значения обнаружено при

температуре 1700 K и вызвано расширением границы зерен в процессе плавления. Из графиков зависимости $\sigma(T)$ видно, что основной вклад в нарушение ближнего порядка вносят атомы Ni. Однако при увеличении температуры до $1600\text{-}1700\text{ K}$ вклад атомов Ni и Al становится равноценным. Внутри зерен значение σ остается отрицательным на всем интервале температур. Таким образом, построенная модель показывает хорошую выполнимость основного свойства интерметаллидов сохранять ближний порядок вплоть до температуры плавления. Вблизи границ $\langle 111 \rangle$ происходит рост величины σ с увеличением угла разориентации. При $\theta=22^\circ$ наблюдается ближнее расслоение по подрешеткам атомов Ni в области границы, т.е. окружение атомов Ni атомами Ni. Ближний порядок для подрешеток атомов Al сохраняется, поскольку их ближайшее окружение составляют атомы Ni, так же как в сверхструктуре $L1_2$ решетки сплава Ni_3Al .

Сравнение графиков зависимости $\sigma(T)$ для симметричных и несимметричных границ зерен в сплаве Ni_3Al показывает, что при нагреве вблизи симметричных границ ближний порядок нарушается в 2-3 раза интенсивнее, чем вблизи несимметричных границ при прочих равных условиях. Степень нарушения определяется из соотношения величины σ при каждом значении температуры.

В четвертой главе приводятся результаты экспериментов по исследованию процессов диффузии в сплаве Ni_3Al с симметричными границами зерен в условиях одноосных деформаций сжатия и растяжения. Для того чтобы определить изменение интенсивности диффузии атомов при деформировании расчетного блока, строились графики зависимости коэффициентов диффузии от величины и направления одноосной деформации $D(\epsilon)$. Анализ графиков зависимости $D(\epsilon)$ показывает, что деформирование расчетного блока происходит в три этапа: пластическая деформация сжатия, упругая деформация, пластическая деформация растяжения. Для расчетного блока Ni_3Al с симметричными границами зерен $\langle 111 \rangle$ каждая из этих трех стадий отчетливо проявляется на графиках зависимостей $D(\epsilon)$, в то время как для блоков с границами зерен $\langle 100 \rangle$ выделить некоторые из стадий проблематично.

В первом разделе главы установлены механизмы диффузии вблизи симметричных границ зерен при упругой деформации. Из графиков зависимости $D(\epsilon)$ определены интервалы зоны упругих деформаций в сплаве Ni_3Al с симметричными границами зерен при различных углах разориентации зерен и ориентациях оси наклона. Результаты представлены в таблице 4.

Таблица 4.

Интервалы упругой деформации в Ni_3Al с симметричными границами зерен наклона при различных углах θ , ориентациях оси наклона и направлениях деформирования

Направление одноосной деформации	Значение угла θ , °					
	7		16		22	
	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
ϵ_x , %	-10 – 2	-8 – 6	-5 – 2	-8 – 2	-10 – 2	-6 – 6
ϵ_y , %	-4 – 5	-4 – 8	-4 – 4	-4 – 6	-6 – 5	-5 – 8
ϵ_z , %	-5 – 5	-7 – 7	-6 – 5	-6 – 4	-5 – 5	-8 – 8

На этапе упругих деформаций в расчетном блоке происходит интенсификация основных механизмов диффузии атомов, рассмотренных выше. На стыке областей упругих и пластических деформаций выделить каждый из механизмов диффузии в отдельности затруднительно. Отличия атомного строения границ зерен $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ оказывают влияние на поведение графиков зависимости $D(\epsilon)$ в области упругих

деформаций. Так, для блоков Ni_3Al с границами зерен $\langle 111 \rangle$ эта область является прямолинейной, строго параллельной оси X, тогда как для блоков с границами зерен $\langle 100 \rangle$ происходит постепенный рост коэффициентов диффузии при увеличении степени деформации.

Изменение ширины области упругих деформаций с увеличением угла разориентации зерен немонотонно. С увеличением угла разориентации от 7° до 16° происходит сужение данной области, а при 22° вновь расширение, причем, как правило, в сторону деформации сжатия. Похожая немонотонность зависимости ширины области упругих деформаций от угла разориентации кристаллитов была выявлена ранее, в экспериментах для сплава Ni_3Al с несимметричными границами зерен. В целом, для сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен наклона ширина области упругих деформаций больше, чем для того же сплава с несимметричными границами зерен.

Вторая часть данной главы посвящена изучению основных закономерностей процесса диффузии вблизи симметричных границ зерен в сплаве Ni_3Al в условиях пластических деформаций сжатия и растяжения. Анализ деформированных расчетных блоков, проведенный при помощи визуализаторов атомных смещений и распределения потенциальной энергии, показал, что переход к стадиям пластических деформаций сопровождается увеличением интенсивности и усложнением механизмов диффузии, по сравнению с областью упругих деформаций. Одновременно с увеличением интенсивности трех основных механизмов диффузии, вблизи симметричных границ зерен возникают коллективные смещения атомов, вызывающие взаимное смещение зерен - ЗГП. Особенностью ЗГП вблизи симметричных границ является преимущественное направление атомных смещений вдоль оси Z (направления $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ для соответствующих типов оси наклона) практически при любых направлениях одноосной деформации.

Атомные смещения при ЗГП, в процессе деформации расчетного блока, инициируют ВЗС. Одним из основных механизмов ВЗС при пластической деформации является движение расщепленных ЗГД. На границах зерен $\langle 111 \rangle$ при одноосной деформации сжатия происходит перекрытие полей напряжений соседних ЗГД. При перекрытии полей напряжений энергия ЗГД увеличивается, что приводит к их расщеплению. При расщеплении образуются дислокации с меньшим вектором Бюргерса, которые скользят вглубь зерен в плотноупакованных плоскостях (рис. 4а). Скольжение дислокации происходит с образованием нестабильного комплексного дефекта упаковки (КДУ), исчезающего после прохождения следующей расщепленной дислокации.

В отличие от бикристаллов Ni_3Al с границами зерен $\langle 111 \rangle$, расщепление ЗГД в структуре границ зерен $\langle 100 \rangle$ происходит при пластической деформации растяжения. Так, в расчетном блоке Ni_3Al с симметричной границей зерен $7^\circ \langle 100 \rangle$ при $\epsilon_s > 12\%$ происходит расщепление ЗГД на дислокации с вектором Бюргерса меньшим, чем у исходных ЗГД. При скольжении расщепленных дислокаций возникает дополнительный механизм диффузии в виде цепочек смещенных атомов между движущимися расщепленными дислокациями и между исходными и расщепленными (рис. 4б).

Перекрытие полей напряжений соседних ЗГД в большеугловых границах велико даже в отсутствии внешних воздействий. При одноосной деформации сжатия вдоль оси Z перекрытие полей напряжений соседних ЗГД достигает критического значения и вызывает одновременное расщепление большого числа дислокаций. При

значениях деформации сжатия $\epsilon_z < -10\%$ число испущенных дислокаций достигает такого количества, что выявить одну из них как отдельный структурный дефект становится невозможно. При скольжении в расчетном блоке они взаимодействуют друг с другом, изменяя тем самым плоскости скольжения. Скольжение многочисленных дислокаций приводит к разбиению расчетного блока на мелкие кристаллические кластеры.

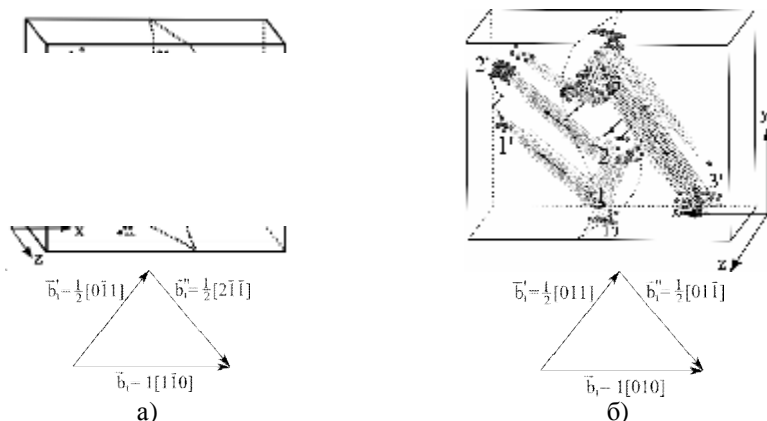


Рис. 4. Расщепление дислокаций и их движение вглубь зерен: а) с границы $7^\circ \langle 111 \rangle$ при одноосной деформации сжатия $\epsilon_x = -8\%$; б) с границы $7^\circ \langle 100 \rangle$ при одноосной деформации растяжения $\epsilon_z = 12\%$.

Показаны цепочки смещенных атомов между движущимися расщепленными дислокациями и между исходной и расщепленной.

1, 2, 3 исходные ЗГД. 1', 2', 3' дислокации, образовавшиеся после расщепления. b_1'' вектор Бюргера ЗГД после расщепления.

Стрелками показано направление смещения атомов.

Процесс пластической деформации растяжения сплава Ni_3Al с малоугловыми симметричными границами зерен $\langle 111 \rangle$ вдоль осей X и Y имеет одинаковые внешние проявления. Одноосная деформация растяжения $\epsilon > 5\%$ вдоль осей X и Y приводит к образованию пор в области границы. По мере повышения нагрузки линейные размеры поры увеличиваются, вплоть до разрушения расчетного блока (рис. 5). На границах зерен с углами разориентации 16° и 22° поры образуются также при деформации растяжения вдоль оси Z.

Процессы в расчетном блоке Ni_3Al с симметричной границей $7^\circ \langle 111 \rangle$ при деформации растяжения вдоль оси Z качественно отличаются. Зернограничное проскальзывание в направлениях типа $\langle 111 \rangle$ инициирует внутри зерен коллективные атомные смещения – ВЗС. За счет коллективного смещения блоков атомов происходит формирование областей деформационных субструктур, как следствие, исчезают исходные структуры расчетного блока и межзеренной границы. Формирование деформационных субструктур может являться механизмом упрочнения сплава.

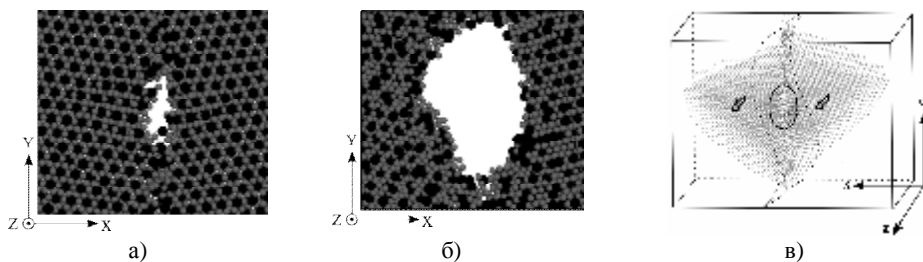


Рис. 5. Образование поры и ее рост на границе $22^\circ\langle 111 \rangle$ при одноосной деформации растяжения ϵ_z : а) размер поры при $\epsilon_z = 7\%$; б) размер поры при $\epsilon_z = 10\%$; в) направления атомных смещений вблизи поры при ЗГП и ВЗС.

Атомные смещения при ЗГП вблизи симметричных границ зерен $\langle 100 \rangle$ имеют явно выраженный вихревой характер. Из рис. 6 видно, что «вихри» сосредоточены между ядрами соседних ЗГД. Подобный характер атомных смещений наблюдался ранее в работе [14] при рассмотрении сдвиговых деформаций. Считается, что образование вихревых атомных смещений является результатом несоответствия деформаций, имеющей место на границах зерен. Гипотетически, подобные атомные смещения могут являться механизмом высокоскоростного перемещения межзеренной границы. Данный механизм требует более детального и обширного изучения в материалах с различными конфигурациями межзеренных границ.

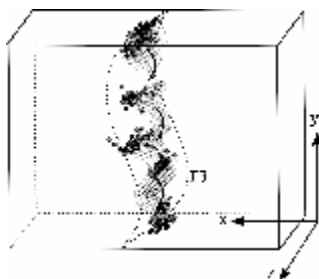


Рис. 6. Зернограничное проскальзывание вблизи симметричной границы зерен $7^\circ\langle 100 \rangle$ при одноосной деформации сжатия $\epsilon_x = -7\%$. Стрелками показан вихревой характер атомных смещений. Смещения атомов меньше 1 \AA не отображаются. Выделены ЗГД, обладающие более высокими энергиями, чем остальные атомы.

В третьей части главы исследуется изменение состояния упорядоченности сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен в процессе одноосных деформаций сжатия и растяжения. Изучение подобных процессов представляется актуальным, поскольку, влияя на степень порядка, можно активизировать одни механизмы пластической деформации и затруднять возникновение других. Для выявления основных аспектов процесса разупорядочения в исследуемом расчетном блоке Ni_3Al с симметричными границами зерен строились графики зависимости параметра ближнего порядка от величины и направления одноосной деформации $\sigma(\epsilon)$. В процессе молекулярно-динамических экспериментов изменялась величина и направление деформации, в то время как температура поддерживалась постоянной, равной $0,6 \cdot T_{\text{пл}}$. Анализ полученных графиков зависимости $\sigma(\epsilon)$ показывает, что в области упругих деформаций параметр σ близок по величине к значению параметра ближнего порядка идеальной упаковки атомов компонент в сверхструктуре $L1_2$, и находится в интервале $-0,4 - -0,2$ независимо от угла и типа межзеренной границы. При переходе к области пластических деформаций происходит скачкообразное

изменение параметра ближнего порядка. В процессе деформации, так же как и при нагреве расчетного блока, основной вклад в разупорядочение вносят атомы Ni. Однако при пластической деформации расчетных блоков разупорядочение не локализовано в области границы зерен, а распространяется во внутризеренные области. Разупорядочение внутри зерен происходит за счет движения расщепленных дислокаций, сопровождающегося образованием комплексных дефектов упаковки, поскольку составляющим элементом КДУ являются полосы антифазных границ. При расщеплении большого числа ЗГД, и последующего движения расщепленных дислокаций, образуются протяженные локальные области с нарушенным ближним порядком.

Пятая глава затрагивает вопросы механизмов формирования областей локальных структурных искажений в расчетном блоке Ni_3Al с симметричными границами зерен при температурно-силовых воздействиях. При трансформации расчетного блока образуются локальные дефектные области внутри зерен и вблизи межзеренной границы. Детальное изучение структур, образующихся дефектных областей, проведено в настоящей главе при помощи компьютерного моделирования на основе алгоритма Ван Швегенховена [15]. Данный алгоритм учитывает топологию структурных связей каждого атома с ближайшими соседями. Так, каждой паре атомов можно сопоставить набор из четырех чисел: 1-е число показывает «отношения» атомов («1» атомы являются соседями, «2» не являются соседями); 2-е число задает количество общих соседей у данной пары атомов; 3-е число определяет число связей между общими соседями; 4-е число показывает количество связей в самой длинной непрерывной цепочке, которая проходит через соседние атомы данной пары. Наборы чисел, характеризующие каждый атом в идеальных ГЦК-, ГПУ- и ОЦК- структурах, представлены в таблице 5. Расчет наборов чисел для каждого атома в расчетном блоке осуществлялся программно [16]. Помимо этого, если структура дефекта не отвечала ни одному из наборов чисел в таблице 5, вычислялось число ближайших соседей для каждого атома.

Таблица 5
Наборы чисел для описания топологии структурных связей ближайших соседей в основных структурах

Структура	ГЦК	ГПУ	ОЦК
Наборы чисел	12 наборов {1/4/2/1}	6 наборов {1/4/2/1} и 6 наборов {1/4/2/2}	8 наборов {1/0/0/0}

Для изучения влияния симметричных границ зерен различной конфигурации на формирование дефектных областей в сплаве Ni_3Al при нагреве и деформации, вычислялись концентрации атомов: а) с ГЦК топологией ближайших соседей; б) с ГПУ топологией ближайших соседей; в) с ОЦК топологией ближайших соседей; г) имеющих менее 12-ти соседей в ближайшем окружении; д) имеющих более 12-ти соседей в ближайшем окружении; е) имеющих 12 соседей из произвольно расположенных атомов Ni и Al в ближайшем окружении.

В первом разделе главы изучаются трансформации структуры сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен при нагреве. Для этого строились графики зависимости концентрации атомов с определенной топологией структурных связей от температуры для сплава Ni_3Al с границами $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ при углах разориентации зерен 7° , 16° , 22° . Следует отметить, что даже в исходных расчетных блоках, не подвергнутых каким-либо воздействиям, концентрация атомов с ГЦК топологией

ближайших соседей не достигает 100% за счет нарушения числа соседней и порядка упаковки атомов в области ЗГД. Как показывает анализ структур и графиков зависимости $n(T)$, формирование локальных дефектных областей в расчетных блоках Ni_3Al при нагреве, происходит преимущественно за счет уменьшения числа атомов в ближайшем окружении. Кроме того, обнаружены области с упаковкой атомов не соответствующей сверхструктуре $L1_2$ сплава Ni_3Al . Области минимальной концентрации атомов с ГЦК топологией ближайших соседей сосредоточены около границ зерен, при этом не прослеживается четкой корреляции с величиной угла разориентации. Так, в бикристалле Ni_3Al с симметричной границей $7^\circ\langle 111 \rangle$ уменьшение концентрации атомов с ГЦК топологией ближайших соседей начинается при температурах порядка $800-900\text{ K}$. Для границ $\langle 111 \rangle$ с углами разориентации 7° и 16° зависимость $n(T)$ плавная, в то время как при значении угла $\theta=22^\circ$ происходит скачкообразное уменьшение концентрации атомов с ГЦК топологией ближайших соседей в точке $T=1400\text{ K}$. В расчетном блоке с промежуточным значением угла разориентации 16° концентрация атомов с ГЦК топологией ближайших соседей имеет наибольшее значение.

Во втором разделе главы топология ближайших соседей атомов в расчетном блоке Ni_3Al с симметричными границами исследуется в условиях одноосных деформаций сжатия и растяжения вдоль осей X, Y и Z. Поскольку пластическая деформация расчетного блока сопровождается ЗГП и ВЗС, образованием мелких кристаллических кластеров, то основные структурные трансформации уже не обусловлены только изменением числа ближайших соседей.

Движение расщепленных дислокаций приводит к формированию областей с ГПУ топологией ближайших соседей. Максимальная концентрация таких атомов выявлена в расчетных блоках с большеугловыми границами зерен. В местах сопряжения плоскости скользящей дислокации и области идеального кристалла, где скольжения нет, образуются полосы произвольной упаковки атомов Ni и Al. При движении большого числа дислокаций, их взаимодействие приводит к увеличению протяженности таких полос за счет случайного стыкования атомов на границах кристаллических кластеров. Движущиеся расщепленные дислокации обрамляют области, в которых число ближайших соседей для каждого атома в целом меньше 12-ти, что связано с перераспределением свободного объема вблизи экстроплоскости скользящей дислокации. В сплаве Ni_3Al с границами зерен $\langle 111 \rangle$ наибольшая концентрация атомов, окруженных меньше чем 12-ю соседями, выявлена при деформации растяжения вдоль оси Z. Их концентрация достигает 50% от общего числа атомов при деформации растяжения $\varepsilon_z=8\%$. При деформациях растяжения в направлении осей X и Y концентрация таких атомов достигает 30-35% и обусловлена одинаковыми механизмами ВЗС вдоль указанных осей.

Концентрация атомов, имеющих 12 ближайших соседей из произвольно упакованных атомов Ni и Al, в бикристаллах Ni_3Al с границами $\langle 111 \rangle$ меняется на 6-8% при предельных значениях деформации сжатия и растяжения. Максимальная концентрация таких атомов (около 25%) выявлена в сплаве Ni_3Al с границами зерен $\langle 100 \rangle$, подвергнутых одноосной деформации сжатия $\varepsilon_z=-10\%$.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Основным элементом атомной структуры симметричных границ зерен в сплаве Ni_3Al являются вершинные зернограницные дислокации. Помимо зернограницных дислокаций в атомной структуре симметричных границ зерен выявлены другие зернограницные дефекты, появление которых зависит от угла разориентации зерен и ориентации оси наклона. Так, дополнительным элементом атомной структуры симметричных границ зерен $\langle 100 \rangle$ являются АФГ $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{100\}$ сдвигового и термического типов. Вблизи симметричных границ зерен $\langle 111 \rangle$ образуются зоны обогащенные атомами Ni и краудионы из атомов Al.

2. На графиках зависимости $\ln D$ от обратной температуры для сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен выявлены три линейных участка. Переход от одного линейного участка к другому сопровождается изгибом на графиках зависимости $\ln D$ от T^{-1} . Точка изгиба соответствует температуре, при которой активируется определенный механизм диффузии.

3. Вблизи малоугловых симметричных границ зерен в сплаве Ni_3Al имеют место те же механизмы диффузии, что и вблизи несимметричных границ зерен в аналогичном сплаве. В целом для активации всех механизмов диффузии около симметричных границ зерен требуются меньшие энергии, чем для активации диффузии аналогичными механизмами вблизи несимметричных границ. Исключение составляет диффузии, реализуемая посредством цепочек смещенных атомов между ядрами ЗГД границ $\langle 111 \rangle$, поскольку для ее активации вблизи симметричных границ зерен требуется более высокая энергия.

4. При нагреве сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен нарушение ближнего порядка упаковки атомов локализуется вблизи плоскости границы, причем основной вклад в его нарушение вносится атомами Ni. В приграничной области бикристаллов с углами разориентации зерен 22° возникает ближнее расслоение по подрешеткам атомов Ni. В области симметричных границ зерен параметр ближнего порядка с увеличением температуры изменяется в 2-3 раза интенсивнее, чем в области несимметричных границ зерен.

5. Область упругих деформаций имеет большую ширину при деформации бикристаллов Ni_3Al с симметричными границами зерен, чем при деформации того же сплава с несимметричными границами.

6. В процессе ЗГП атомы смещаются преимущественно в направлениях $\langle 111 \rangle$ или $\langle 100 \rangle$, для соответствующей оси наклона границы, независимо от направления одноосной деформации.

7. Зернограницное проскальзывание при деформации сплава Ni_3Al с малоугловыми симметричными границами зерен наклона $\langle 100 \rangle$ осуществляется посредством коллективных атомных смещений вихревого характера и локализовано между ядрами соседних дислокаций.

8. Основным механизмом ВЗС при пластической деформации сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен является скольжение расщепленных зернограницных дислокаций. Скольжение расщепленных ЗГД происходит в плотноупакованных плоскостях и сопровождается образованием комплексных дефектов упаковки.

9. Деформация сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен приводит к образованию областей нарушения ближнего порядка не только в приграничной области, но и внутри зерен. В области упругих деформаций значения параметра

ближнего порядка близки к величине этого параметра при идеальной упаковке атомов компонент в сверхструктуре $L1_2$. В области пластических деформаций сжатия и растяжения по подрешеткам атомов Al обнаруживается тенденция к отсутствию ближнего порядка, тогда как по подрешеткам атомов Ni – тенденция к ближнему расстройению.

10. Термоактивация и деформация сплава Ni_3Al с симметричными границами зерен приводит к структурным искажениям исходного расчетного блока. При этом термоактивация расчетного блока сопровождается образованием локальных областей, в которых число ближайших соседей меньше, чем в идеальной упаковке атомов компонент в сверхструктуре $L1_2$. Процесс деформации расчетного блока, сопровождающийся ВЗС, приводит к формированию областей с ППУ топологией структурных связей ближайших соседей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. - М.: Металлургия, 1980. 156 с.
2. Qiangyong L., Cahoon J.R., Richards N.L. Effects of thermo-mechanical processing parameters on the special boundary configuration of commercially pure nickel // *Materials Science and Engineering A*. 2009. V.527. P.263-271.
3. Cheng Y., Jin Z.-H., Zhang Y.W., Gao H. On intrinsic brittleness and ductility of intergranular fracture along symmetrical tilt grain boundaries in cooper // *Acta Materialia*. 2010. V.58. P. 2293-2299.
4. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы - М.: Физматлит, 2001. 224 с.
5. Неклюдов И.М., Камышанченко Н.В., Кузьменко И.Н. Программное упрочнение кристаллических материалов на примере меди и алюминия // *Физика металлов и металловедение*. 2009. т.108. №4. С.406-411.
6. Ракитин Р.Ю. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона в ГЦК металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.ф.-м.н. -Барнаул, 2006. 23 с.
7. Синяев Д.В. Исследование механизмов структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al . Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.т.н. - Новокузнецк, 2007. 21 с.
8. Полетаев Г.М. Исследование процессов взаимной диффузии в двумерной системе Ni-Al. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. - Барнаул, 2002. 24 с.
9. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Phys. Rev. B*. 1993. V.48. №1. P.22-33.
10. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения материалов. - М.: Металлургия, 1983. 232 с.
11. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах: Справочник. - Киев: Наукова Думка, 1987. 509 с.
12. Смитлз К. Дж. Металлы: Справочник. - М.: Металлургия, 1980. 447 с.
13. Фрост Г.Дж., Эшби М.Ф. Карты механизмов деформации. - Челябинск: Металлургия, 1989. 328 с.

14. Псахье С.Г., Зольников К.П. О возможности вихревого механизма перемещения границ зерен при высокоскоростном сдвиговом нагружении // Физика горения и взрыва. 1998. Т.34. №3. С. 126-128.

15. Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A. Grain-boundary structures in polycrystalline metals at the nanoscale // Phys. Rev. 2000. V.B62. №2. P. 831-838.

16. Ракигин Р.Ю. Границы зерен в сплавах (ГБАЗВ) / РОСПАТЕНТ. Свидетельство № 2009610715 от 30 января 2009.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Статьи, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

1. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Саница Н.В., Яшин А.В., **Харина Е.Г.**, Кулагина В.В. Механизмы структурной перестройки в модели нановолокна интерметаллида Ni_3Al , содержащего длиннопериодические антифазные границы в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения // Известия вузов. Физика. 2010. №8. С.48-54.

2. Ракигин Р.Ю., **Харина Е.Г.**, Старостенков М.Д., Мартынов А.Н., Полетаев Г.М. Исследование атомной структуры и распределения энергии и ближнего порядка в симметричных границах зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al // Изв. вузов. Черная металлургия. 2010. №10. С.72–74.

3. **Харина Е.Г.**, Полетаев Г.М., Ракигин Р.Ю., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д. Исследование механизмов пластической деформации вблизи симметричных границ зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al // Известия Алтайского государственного университета. 2010. № 1/2 (65). Раздел Физика. С.192-195.

4. **Харина Е.Г.**, Полетаев Г.М., Ракигин Р.Ю., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д. Исследование механизмов пластической деформации вблизи симметричных границ зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al . // Вестник Тамбовского университета. Серия естественные и технические науки. 2010. Т.15. вып.3. С. 1099-1100.

Прочие статьи:

5. Старостенков М.Д., Ракигин Р.Ю., **Харина Е.Г.** Атомная структура специальных границ зерен в чистом Ni в плоскостях {111} // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2008. Т.5. №3. С.132–135.

6. Старостенков М.Д., Ракигин Р.Ю., **Харина Е.Г.** Исследование атомной структуры симметричных границ зерен в чистом Ni // Сборник материалов V Международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию» в 4-х частях / Под ред. чл.-корр. РАН А.С. Сигова. - М.: Энергоатомиздат, 2008. ч.3. С. 138–141.

7. **Харина Е.Г.**, Старостенков М.Д. Структурно-энергетические исследования специальных границ зерен в чистом Ni в плоскостях {111} // Сборник материалов Всероссийской научной конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации» (НТИ-2008) в 7-ми частях. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2008. ч.1. С. 95–97.

8. Старостенков М.Д., **Харина Е.Г.**, Ракигин Р.Ю. Атомная конфигурация специальных границ зерен в ГЦК решетках меди и никеля // Ползуновский альманах. 2008. № 3. С.29–32.

9. Харина Е.Г., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю. Механизмы диффузии в специальных границах зерен чистой меди для малых углов разориентации зерен // Электроника Сибири. 2008. вып.3. С. 138–140.

10. Харина Е.Г., Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Исследование энергетических перестроек в металлах при жестком сдвиге // Сборник трудов XV Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых «ВНКФС-15». Кемерово: Изд-во АСФ России, 2009. С. 179–180.

11. Харина Е.Г., Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Моделирование энергетических поверхностей скольжения в нанокристалле Ni. // Сборник трудов XV Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Современные техника и технологии-2009» в 3-х томах. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. Т.3 С. 538–540.

12. Ракитин Р.Ю., Харина Е.Г., Старостенков М.Д. Исследование энергетических характеристик нанокристаллов с симметричными границами зерен наклона // Сборник материалов I Региональной научно-практической конференции «Перспективы развития nanoиндустрии Алтая. Анализ состояния патентно-лицензионной деятельности нанотехнологической сети региона». - Бийск: ФГУП ФНПЦ «Алтай», 2009. С. 47–48.

13. Харина Е.Г., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Демьянов Б.Ф. Компьютерное моделирование энергетических поверхностей скольжения в ГЦК металлах с симметричными границами зерен наклона // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. Т.6. № 1. С. 36–41.

14. Ракитин Р.Ю., Харина Е.Г. Исследование параметров ближнего порядка на АФГ в сплаве Ni₃Al // Сборник трудов Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы: создание, структура, свойства - 2009». - Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. С. 188–192.

15. Харина Е.Г., Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Компьютерное моделирование энергетических поверхностей скольжения в нанокристалле Ni с симметричными границами зерна наклона // Сборник материалов III Международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (DFMN-2009) в 2-х томах. – М.: Интерконтакт Наука, 2009. Т.2. С. 395–396.

16. Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д., Харина Е.Г. Компьютерное моделирование энергетических поверхностей скольжения в ГЦК-металлах с большеугловыми границами зерен наклона // Сборник трудов научно-технической конференции с Международным участием «Ультратдисперсные порошки, наноструктуры, наноматериалы: получение, свойства, применение» (V Ставеровские чтения) / Под ред. В.Е. Редькина. - Красноярск: ИПК СФУ, 2009. С. 68-69.

17. Харина Е.Г., Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Термоактивируемое изменение ближнего порядка в монокристалле сплава Ni₃Al содержащего антифазную границу // Сборник материалов Всероссийской научной студенческой конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации» (НТИ-2009) в 7-ми частях. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2009. ч.2. С. 249–250.

18. Харина Е.Г., Ракитин Р.Ю. Атомная структура малоугловой симметричной границы зерна наклона в плоскостях {100} в сплаве Ni₃Al // Материалы Международной научно-практической конференции «Современные направления теоретических и прикладных исследований 2010». – Одесса: Изд-во Черноморье, 2010. Т.33. С. 59–60.

19. Харина Е.Г., Ракитин Р.Ю. Атомная структура малоугловых симметричных границ зерен наклона в плоскостях {111} в сплаве Ni₃Al // Сборник

материалов V (XXXVII) Международной научно-практической конференции «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей». – Кемерово: ООО «ИНТ», 2010. вып.11. Т.2. С. 637–640.

20. **Харина Е.Г.**, Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Исследование механизмов диффузии вблизи малоугловых симметричных границ зерен наклона в сплаве Ni_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2010. Т.7. №3. С. 48-53.

21. **Харина Е.Г.**, Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д. Исследование механизмов диффузии при деформации кристаллов с симметричными границами зерен наклона $\langle 111 \rangle$ методом молекулярной динамики // Материалы VI Международной научной конференции «Прочность и разрушение материалов и конструкций». – Оренбург: ОГУ, 2010. С. 349-354.

Тезисы докладов:

22. Старостенков М.Д., **Харина Е.Г.** Механизмы диффузии в специальных границах зерен чистого никеля для больших углов разориентации зерен // Сборник тезисов IX Молодежной школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества. – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2008. С. 168–169.

23. Старостенков М.Д., **Харина Е.Г.**, Ракитин Р.Ю. Энергетические поверхности скольжения в плоскостях (100) в металлах с ГЦК структурой // Сборник тезисов Международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии». Витебск: УО ВГТУ, 2009. С. 43–44.

24. Старостенков М.Д., **Харина Е.Г.**, Ракитин Р.Ю., Демьянов Б.Ф. Исследование энергетических профилей скольжения частей бикристалла с ГЦК решеткой // Сборник тезисов XVII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» / Под ред. А.М. Штеренберга. – Самара: Самарский гос. тех. ун-т, 2009. с. 38

25. Ракитин Р.Ю., **Харина Е.Г.**, Старостенков М.Д. Исследование энергетических характеристик нанокристаллов с симметричными границами зерен наклона. // Сборник тезисов Международной конференции по физической мезомеханике, компьютерному моделированию и разработке новых материалов. – Томск: ИФПМ СО РАН, 2009. С. 146-148.

26. Ракитин Р.Ю., **Харина Е.Г.**, Барчук А.А. Изменение ближнего порядка при термоактивации в сплаве Ni_3Al с малоугловой симметричной границей зерна наклона $\langle 111 \rangle$ // Сборник тезисов Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике. – Владивосток: Изд-во ДВГУ, 2010 г. С. 109–110.

Подписано в печать 10.11.2010. Формат 60x84 1/16.

Печать – цифровая. Усл.п.л. 1,39.

Тираж 100 экз. Заказ 2010 – 630

Отпечатано в типографии АлтГТУ,
656038, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46
тел.: (8–3852) 36–84–61