

На правах рукописи

ПОПОВА ГАЛИНА ВЛАДИМИРОВНА

СТАБИЛЬНОСТЬ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ КОМПОЗИЦИОННЫХ
МАТЕРИАЛОВ СИСТЕМЫ Ni-Al

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Барнаул - 2006

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете им. И. Ползунова и Восточно-Казахстанском государственном университете им. С. Аманжолова

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Старостенков Михаил Дмитриевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Неверов Валерий Владимирович

кандидат физико-математических наук,
доцент Рудер Давыд Давыдович

Ведущая организация: Томский государственный архитектурно-
строительный университет

Защита состоится «27» декабря 2006г. в 11⁰⁰ час. на заседании диссертационного совета Д212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете по адресу: 656049, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета.

Автореферат разослан «18» ноября 2006 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

Жданов А.Н.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Среди новых материалов особое место занимают композиционные материалы, обладающие целым комплексом различных свойств, рациональное сочетание которых позволяет получать оптимальные конструкции. Композиционные материалы могут быть представлены в виде последовательности упаковок различных компонент. Экспериментальное определение свойств композиционных материалов с различными схемами армирования требует весьма большого объема дорогостоящих исследований. В связи с этим возникает необходимость построения теоретических моделей композиционных материалов, которые позволили бы определить не только осредненные характеристики, но и описать локальную структуру процессов, происходящих в таких средах под действием связанных полей. Особенностью композиционных материалов является то, что они обладают возможностью объединения полезных свойств отдельных компонентов, и в то же время проявляют новые свойства, отличные от свойств компонентов. Сочетание высоких прочностных свойств и минимального удельного веса обуславливает широкое применение композиционных материалов. Подбором соответствующих условий нагрева, термообработки, отжига можно регулировать изменения структуры и свойств композиционных материалов в широких пределах [1]. Свойства таких материалов во многом зависят от структуры и стабильности межфазной границы, как важной составляющей такой системы. Наиболее динамично структура межфазной границы может меняться в процессе различного типа термоактивируемого воздействия, в таких случаях основным элементом перестройки границ является диффузия. В настоящей работе исследуется диффузия, имеющая место в гетерогенной системе, представляющей собой композит на основе комбинаций Ni, Al и интерметаллида Ni₃Al. Каждая из составляющих композита – матрица и включения имеют собственные характеристики диффузии. К ним добавляются и особенности диффузии относительно межфазной границы. Они во многом зависят от состояния границы, наличия на ней дефектов, свободного объема и областей локальных напряжений.

Изучение процессов диффузии на микроскопическом уровне связано в первую очередь со сложностью проведения соответствующих экспериментов. Реальные эксперименты позволяют изучать диффузию в композиционных материалах, как правило, по начальным и конечным состояниям структуры, что дает лишь косвенное представление о тех или иных механизмах диффузии.

Для наглядного и более детального изучения механизмов диффузии в настоящее время все более интенсивно применяются методы компьютерного моделирования, позволяющие отслеживать траектории смещений атомов и получать подробные картины реализации в динамике отдельно взятых диффузионных механизмов. Данный метод является дополнением к

известным экспериментальным и теоретическим методам исследования, зачастую выступая в роли связующего звена между ними. Компьютерная модель может служить, как средством апробации теоретических представлений, так и наоборот, объяснять или прогнозировать явления, ранее не освещенные теорией и экспериментом в полной мере.

Таким образом, представляется актуальным исследование на микроскопическом атомном уровне стабильности межфазных границ композиционных материалов методом компьютерного моделирования для анализа и подтверждения теории и реальных экспериментов в физике конденсированного состояния.

Целью работы является исследование на атомном уровне стабильности межфазных границ композиционных материалов с помощью метода молекулярной динамики.

Научная новизна заключается в том, что методом молекулярной динамики исследована стабильность межфазных границ нанокристаллических композиционных материалов системы Ni-Al. Выявлены факторы, которые могут вызвать изменение температуры начала диффузионных процессов в этих материалах. Это, прежде всего, различие в эффективных размерах атомов Ni и Al, а, следовательно, в параметрах решетки Ni, Ni₃Al, Al, возрастания с температурой различия в коэффициентах температурного расширения данных материалов, наличие локальных упругих напряжений на границе раздела фаз. Локальные напряжения могут приводить к уплотнению материала и блокировке диффузионных процессов. В этом случае требуется более высокая температура для начала диффузии. В то же время на границе раздела фаз могут возникать упругие напряжения, соответствующие деформации растяжения, что вызывает образование эффективного свободного объема, и температура начала активации диффузионных процессов может понизиться. Показано, что механизмы диффузии и характер разрушения межфазной границы зависят от структуры и формы включений в матрицу. Установлено, что точечные дефекты значительно снижают предельную температуру диффузионной стабильности исследуемых композиционных материалов.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что результаты исследований на микроуровне позволяют дополнять и корректировать макроскопические модели, кроме того, результаты настоящего моделирования могут быть полезны при конструировании новых материалов и оптимизации их свойств.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В связи с различием параметра решеток компонент, формирующих композит, вследствие теплового расширения, на границах фаз возникают напряжения.

2. Температура, при которой начинается диффузионная перестройка композита, возрастает при увеличении локальной плотности вещества, и понижается при уменьшении, что связано с различием параметра решеток,

вследствие расширения, вызываемого термоактивируемой деформацией системы, вблизи межфазной границы.

3. Преобладающими механизмами диффузии в композиционном материале Ni-Ni₃Al, Ni₃Al-Ni являются кольцевые, смещения атомов по краудионному механизму и механизм образования пар Френкеля, который начинает проявляться только при температурах, близких к температуре плавлению. В композиционном материале Ni-Al, Ni₃Al-Al преобладают кольцевые механизмы диффузии, смещения атомов по краудионному механизму. При повышении температуры, а также с увеличением числа атомов Al в прослойках, наблюдается миграция атомов вблизи ядер дислокаций несоответствия. В композитах системы Al-Ni, Al-Ni₃Al преобладают дислокации несоответствия вблизи межфазной границы, вызывающие структурную перестройку системы.

4. При наличии свободного объема, к перечисленным выше механизмам добавляется вакансионный, который значительно снижает предельную температуру диффузионной стабильности исследуемых композиционных материалов.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях:

– 2th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM-II), Los-Angeles, USA (2004);

– 8-я международная конференция “Физика твердого тела”, Алматы, Казахстан (2004);

– Международная школа- семинар по физике конденсированного состояния, Усть-Каменогорск, Казахстан (2004);

– 10-я Межвузовская конференция по математике и механике, Алматы, Казахстан (2004);

– XLIII международная конференция «Актуальные проблемы прочности», Витебск, Беларусь (2004)

– 5-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика», Алматы, Казахстан (2005);

– Международная научно- практическая конференция «Аманжоловские чтения-2005», Усть-Каменогорск, Казахстан (2005);

– 59-ая Научная конференция студентов и молодых ученых, посвященная международному году физики, Алматы, Казахстан (2005);

– Международная научно - техническая конференция «Композиты в народное хозяйство», Барнаул, Россия (2005).

– 9-ая Международная научно-техническая конференция «Физика твердого тела» Караганда, Казахстан (2006).

– IX Международная школа - семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», г. Барнаул (2006);

Публикации. Результаты работы опубликованы в 9 статьях в центральных и зарубежных изданиях и 9 тезисах докладов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 119 наименований. Работа изложена на 202 страницах машинописного текста, содержит 3 таблицы и 195 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе диссертации рассмотрены композиционные материалы в общем, дана их классификация, описаны физические и физико-механические свойства композиционных материалов, проводится обзор методов получения композиционных материалов, а также дана характеристика наноконпозиционных материалов. Рассмотрены физические основы диффузии и адгезии композиционных материалов. Далее, в первой главе описаны методы компьютерного моделирования, которые применяются на различных масштабных уровнях для описания характеристик и свойств композиционных материалов. В конце первой главы сформулированы основные задачи диссертационной работы.

Во второй главе описана модель компьютерного эксперимента, обосновываются допущения, используемые в модели. Рассмотрены основные достоинства метода молекулярной динамики (ММД), по сравнению с другими методами компьютерного моделирования, применительно к физике конденсированного состояния. Сущность этого метода заключается в том, что атомы не привязаны к узлам идеальной кристаллической решетки, и это позволяет моделировать явления, связанные с аморфизацией структуры и смещениями атомов [2]. Обоснован выбор двумерного варианта металлического композита, тем, что и в объемных кристаллах диффузионные процессы реализуются вдоль плотноупакованных направлений, которые располагаются в плоскостях $\{111\}$ ГЦК решетки. Двумерный кристалл с упаковкой атомов, соответствующей плоскости $\{111\}$ является, как бы разверткой таких плоскостей в объемном материале. Кроме того, двумерные модели позволяют проводить структурный анализ с применением более простых и наглядных визуализаторов по сравнению с теми, которые используются в трехмерных моделях.

В ММД взаимодействие атомов зависит от межатомного расстояния, и потенциальная энергия системы N атомов представляется в виде

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1, i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

где ϕ_{ij} – потенциальная функция взаимодействия пары отдельных атомов i и j ; r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомом.

При рассмотрении замкнутой системы, сила, действующая на i -й атом, будет равна

$$F_i = - \sum_{j=1}^N \frac{d}{d(r_i - r_j)} j_{ij}(r_i - r_j) \quad (2)$$

Система уравнений движения в нерелятивистском случае имеет вид:

$$\frac{dr_i}{dt} = \mathbf{x}_i, \quad m_i \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \quad (3)$$

где m_i и u_i – масса и вектор скорости i -го атома, t – время.

Позиции и скорости всех N атомов расчетной ячейки характеризуется $2zN$ координатами (z – мерность расчетной ячейки):

$x_i^k(t)$ – описывают координаты в пространстве,
 $u_i^k(t) = \dot{x}_i^k(t)$ – скорости, (k – индекс координатной оси)

Для решения системы уравнений (3) используется метод Эйлера с полшагом. В качестве критерия выбора шага интегрирования Δt используют эмпирическое правило: флуктуации полной энергии системы не должны превышать флуктуации потенциальной энергии. Для уменьшения энергетических флуктуаций на величину Δt накладывают математические и физические ограничения.

Для избежания ошибок численных вычислений, связанных с накоплением ошибок в модели, применялись методы контроля за общей энергией системы (потенциальной (1) и кинетической (4)).

$$E = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i u_i^2 \quad (4)$$

Начальные скорости атомов задавались одинаковыми по абсолютной величине и со случайными направлениями. При этом полная кинетическая энергия должна соответствовать заданной температуре, а суммарный импульс расчетной ячейки должен быть равен нулю. Если начальные координаты атомов соответствуют идеальной решетке, то начальные скорости определяются согласно распределению Больцмана:

$$|\mathbf{x}_i| = u_{\text{кв}} \sqrt{2} = \sqrt{\frac{2z k_B T}{m_i}}, \quad \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{x}_i = 0 \quad (5)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура,

$u_{\text{кв}}$ – среднеквадратичная скорость атома.

Температура расчетной ячейки находится по выражению

$$T = \frac{2E}{zNk_B} \quad (6)$$

В главе был рассмотрен один из параметров модели – потенциал для задания межатомного взаимодействия. Потенциал был построен с применением эмпирических и полуэмпирических функций. В качестве функции, описывающей взаимодействие компонент сплава использовались парные потенциалы Морза:

$$j_{KL}(r) = D_{KL} b_{KL} \exp(-a_{KL} r) [b_{KL} \exp(-a_{KL} r) - 2] \quad (7)$$

где α_{KL} , β_{KL} , D_{KL} – параметры, определяющие взаимодействие пары атомов сорта K и L ; r – расстояние между атомами. Параметры потенциальной функции взяты из [3].

Объектом исследования служили двумерные металлические композиты, которые составляли следующим образом: прежде всего, выбирался матричный материал – это чистый Al, либо чистый Ni, либо интерметаллид Ni_3Al . Расчетный блок матричного материала представлялся упаковкой атомов, в плоскости $\{111\}$ ГЦК решетки в виде последовательности ста плотноупакованных атомных рядов, в направлении $\langle 112 \rangle$. В каждом из плотноупакованных атомных рядов типа $\langle 110 \rangle$ содержалось 100 атомов. Таким образом, расчетный блок кристалла состоял из 10^4 атомов, за пределами этого блока кристалл повторялся с помощью периодических граничных условий. Было рассмотрено 6 композитов из выбранной группы металлов. Это матрица – интерметаллид Ni_3Al , в которую включаются блоки, состоящие из чистого Al или Ni; матричный материал Ni, в который вкладывались прослойки интерметаллида Ni_3Al , матричный материал Al с включением интерметаллида Ni_3Al ; Al - ая матрица с включениями Ni, и наконец Ni-ая матрица с Al-ыми включениями.

Выполнялась процедура построения расчетного блока кристалла композита: в матричном блоке кристалла «вырезались» пустоты определенных конфигураций, которые заполнялись другим типом материала: это могли быть отдельные слои, состоящие из n – плотноупакованных атомных рядов, либо из n – атомных рядов направления $\langle 112 \rangle$. Исследовался двумерный кристалл, состоящий из матричного материала и второго компонента, врезанного в него, в конфигурации типа ромба. Кроме того, рассмотрены случаи заполнения матричного материала вторым компонентом в виде сетки, состоящей из двух взаимоперпендикулярных слоев атомов, ориентации $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$.

Затем проводили процедуру релаксации расчетного блока кристалла. Начальные скорости атомов задавались равными 0, что соответствовало начальной температуре 0К. В процессе релаксации температура ячейки повышалась. При достижении некоторого значения, при котором происходила стабилизация кинетической энергии, рост температуры прекращался. После стабилизации температуры ячейка подвергалась сверхбыстрому охлаждению. Все скорости атомов периодически, когда колебания кинетической энергии достигали максимумов, приравнялись 0 до тех пор, пока атомы не занимали равновесных позиций, и больше не наблюдался рост температуры, связанный с релаксационными явлениями. При запуске основного эксперимента считалось, что созданная структура расчетной ячейки стабильна при температурах близких к абсолютному 0.

На следующем этапе проводили импульсный разогрев кристалла композита до некоторой температуры с последующей выдержкой в течение времени компьютерного эксперимента, составляющего 0,1 нс. Затем кристалл быстро охлаждали до температуры - 0К.

Важным элементом компьютерного моделирования является подбор соответствующих критериев и параметров, по которым должен происходить анализ результатов компьютерного эксперимента. Конечную структуру материала исследовали с помощью определенного набора визуализаторов: анализа фазового состава, картины плотноупакованных атомных рядов при разных углах (-30° - 30° , 30° - 90° и -90° - 150°), начальной конфигурации с последующими атомными смещениями, изменения коэффициентов диффузии в двух ориентациях [4].

В главе оценены параметры диффузии (энергия активации, предэкспоненциальный множитель D_0 , в соответствующем уравнении Аррениуса) основных компонентов, составляющих исследуемую композиционную структуру. Температуры начала диффузионных процессов в идеальных бездефектных двумерных блоках кристаллов Ni, Ni₃Al, Al оказались равными, соответственно, 1920K, 1700K и 1150K, при времени проведения компьютерного эксперимента 0,01 нс. Во всех случаях диффузия реализуется по кольцевым механизмам. При введении дефектов, таких как вакансии и бивакансии, было получено, что введение вакансии в исследуемые структуры резко снижает температуру начала диффузии до значений 1600K, 1500K, 800K, соответственно. Основными механизмами диффузии являются - краудинный и перемещения атомов вдоль ломаной по вакансионному механизму. Введение в решетку кристаллов Ni, Ni₃Al, Al бивакансии вызывает понижение температуры начала диффузионных процессов до 950K, 900K и 250K соответственно. Миграция бивакансии осуществляется по ломаным траекториям, либо происходит трансформация бивакансии в комплекс, состоящий из межузельного атома и трех близкорасположенных вакансий.

Было оценено влияние времени выдержки компьютерного эксперимента до 20,40,80, 160 пс., получили, что интервал времени, при котором изменение коэффициента диффузии оказывается незначительным, составляет 80 пс.

В третьей главе диссертации приводятся результаты исследований с помощью метода молекулярной динамики температурных интервалов стабильности двумерных металлических композитов, состоящих из матрицы интерметаллида Ni₃Al и Ni – вх включений, а также матрицы Ni и включений Ni₃Al.

Интерметаллид Ni₃Al имеет несколько больший параметр решетки по сравнению с чистым Ni, поэтому при включении прослойки Ni в интерметаллид Ni₃Al должны быть преимущественно локальные деформации сжатия на границе фаз.

Температура начала структурной перестройки при включении рядов Ni в направлениях $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ в интерметаллид Ni₃Al, а также при включении рядов Ni₃Al в матрицу Ni близка к тестовым температурам плавления чистого Ni₃Al и Ni, определенным в гл.2. При включении рядов в направлении $\langle 110 \rangle$, она приблизительно на 70-100K выше, чем при

включении рядов в ориентации $\langle 112 \rangle$. Во всех случаях структурная перестройка композиционных материалов характеризуется действием кольцевых механизмов миграции атомов, с увеличением температуры импульсного разогрева весомый вклад в диффузионные процессы вносят динамические пары Френкеля. В матрице интерметаллида диффузионные процессы заметны ранее, чем внутри прослоек Ni. Температура начала структурной перестройки в таких композиционных материалах незначительно зависит от количества рядов, первые разрушения материала начинаются в зоне интерметаллида, вблизи межфазной границы, при увеличении температуры импульсного разогрева наблюдаются разрушения межфазной границы, появляются области разупорядочения как в матрице, так и внутри прослойки. В качестве примера приведены структурные характеристики системы, состоящей из матрицы Ni₃Al и трех рядов Ni после импульсного разогрева до 1900K и закалки.

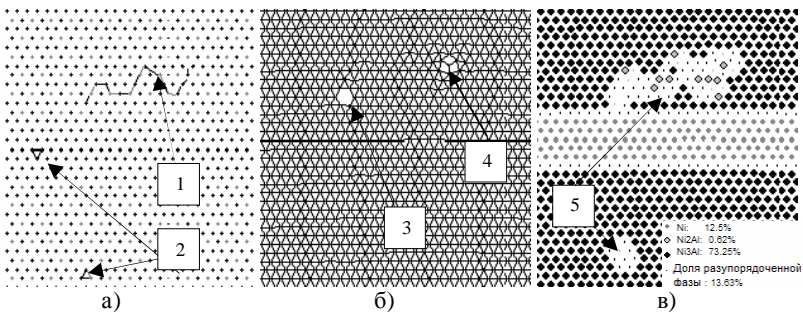


Рис. 1 Структурные характеристики системы, состоящей из матрицы Ni₃Al и трех рядов Ni после импульсного разогрева до 1900K и закалки: а) атомные перемещения; б) распределения атомных рядов в трех направлениях; в) изменение фазового состава (1 – длинная ломаная, соответствующая паре Френкеля; 2 – кольцевые механизмы диффузии; 3 – свободный объем, соответствующий расположению вакансии; 4 – область, соответствующая межузельному атому, которую можно прокомментировать как наличие дислокаций; 5 – области разупорядочения)

Диффузия реализуется как за счет кольцевых механизмов перемещений атомов, так и вследствие образования динамических пар Френкеля (рис.1(а, б)), при этом происходит разрушение не только сверхструктурного порядка матрицы интерметаллида, но и на межфазной границе. Наряду с областями разупорядочения возникают кластеры и сегрегации, соответствующие одиночным зародышам фазы типа Ni₂Al. (рис.1.(в)).

Температура начала диффузионной перестройки в слоистой упаковке с использованием матричного материала Ni₃Al и включений Ni достигает значения 1800K, что на 100K выше тестовой температуры плавления

интерметаллида Ni_3Al , определенной в гл.2. Это можно объяснить различием в параметре решеток, компонент, формирующих композит, вследствие теплового расширения. Структурная перестройка происходит за счет действия кольцевых и краудионных механизмов диффузии, возникающих как внутри прослоек Ni , так и внутри матрицы интерметаллида.

При внедрении в Ni_3Al прослойки Ni в виде ромба температура начала процесса диффузии также соответствует 1800К, по – видимому, по причине наличия на границе локальной области деформации сжатия. В случае прослоек Ni_3Al в виде ромба в Ni , температура начала структурной перестройки кристалла композита ниже на 100К тестовой температуры плавления Ni (гл.2), что может быть связано с возникновением областей локального «размягчения» границы и из-за внедрения в матрицу материала с меньшим параметром решетки. Механизмы диффузии во всех случаях – кольцевые, а также образования и рекомбинации пар Френкеля, возникающие вблизи межфазной границы, вносящие определенный вклад в процесс разупорядочения композиционного материала. Разрушения начинаются, как правило, вблизи излома межфазной границы (рис.2 (а)). В этих местах отмечаются наиболее сложные картины атомных смещений (рис.2(б,в)), а следовательно и локальных деформаций.

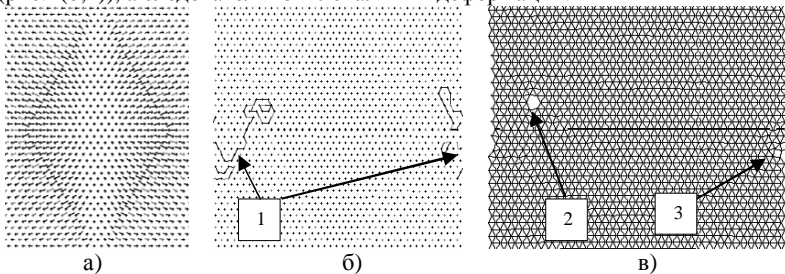


Рис. 2 Структурные характеристики системы, состоящей из матрицы Ni_3Al и прослоек Ni в виде ромба: а) атомные смещения после релаксации системы (М 1:50); б) атомные смещения; в) фазовый состав после импульсного разогрева до 1840К и закалки (1 – сложные ломаные траектории атомов, соответствующие долгоживущим парам Френкеля; 2- свободный объем; 3- область, соответствующая межузельному атому)

Эксперимент по сетчатой упаковке показал, что при включении Ni в матрицу Ni_3Al температура начала структурной перестройки ниже на 100-150К, чем при включении прослойки Ni_3Al в матрицу Ni и близка к тестовой температуре плавления чистого Ni_3Al . Исследование сетчатой упаковки кристалла композита $Ni-Ni_3Al$ показало, что температура начала структурной перестройки ниже температуры плавления Ni на 100-150К. Здесь, по-видимому, может вносить вклад фактор анизотропии упругих свойств

системы в направлениях $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$. Диффузионные механизмы реализуются вблизи межфазной границы и представлены, как кольцевыми механизмами миграции атомов, так и парами Френкеля.

Если сравнивать температуры начала диффузионных процессов в чистых Ni_3Al и Ni (гл.2) они составляют для Ni_3Al 1700К, для Ni - 1920К. В случае построения композитов на основе данных материалов наблюдается корреляция с данными температурами.

В четвертой главе дан общий анализ оценки стабильности исследуемых в главе двумерных металлических композитов, состоящих из матрицы интерметаллида Ni_3Al и Al-ых включений, а также матрицы Ni и включений Al.

Компьютерный эксперимент показал, что температура начала структурной перестройки межфазной границы зависит от числа атомных рядов Al, помещенных в Ni - юю матрицу в направлении $\langle 110 \rangle$ (рис.3).

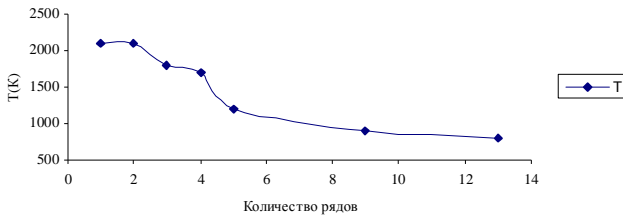


Рис.3 График изменения температуры начала структурной перестройки межфазной границы в зависимости от количества рядов Al в Ni -ой матрице

Также от числа внедренных атомных рядов Al зависят механизмы структурной перестройки. При малом числе это – кольцевые механизмы перемещений атомов, при увеличении числа рядов – механизмы образования дислокаций и пластификация. В первом случае, как угловые распределения атомов по плотноупакованным рядам, так и распределения атомов по координационным сферам, не претерпевают значительного размытия (рис.4 (а,б)), тогда как в случае термоактивируемой пластической деформации эти характеристики размываются, т.е. приграничная область между фазами аморфизуруется (рис. 4 (в,г)).

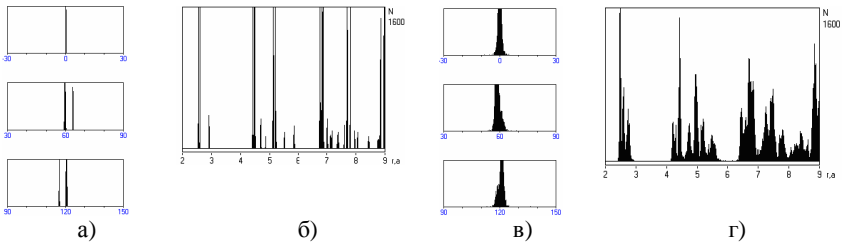


Рис. 4 Структурные характеристики системы в зависимости от количества рядов: а) угловые распределения атомов; б) радиальные распределения атомов при включении в Ni-ую матрицу 5 рядов Al ($T=1200\text{K}$); в) угловые распределения атомов; г) радиальные распределения атомов при включении в Ni-ую матрицу 13 рядов Al ($T=800\text{K}$)

Таким образом, при толщинах алюминиевой прослойки от 1 до 4 атомных рядов в Ni – ой матрице структурная перестройка в композиционном материале осуществляется за счет кольцевых и краудинных механизмов диффузии. Перемещения атомов наблюдаются, в основном, внутри Al – ой прослойки, а в случае захвата Ni-ой части возникают зародыши новых фаз. При этом температура начала диффузионной перестройки понижается до 1700K. Начиная с прослойки в пять атомных рядов Al, структурная перестройка характеризуется возникновением дислокаций несоответствия по параметру решетки Ni и Al внутри, и на границе Al –ой прослойки, т. е. за счет термоактивируемой пластической деформации материала. При этом температура начала структурной перестройки значительно снижается. Начиная с прослойки, состоящей из девяти атомных рядов Al, температура начала процесса термоактивируемой деформации стабилизируется и составляет 900K. Сравнивая с тестовыми данными, приведенными в гл.2, температура начала структурной перестройки оказывается даже ниже, чем температура начала структурной перестройки в чистом Al. Основной причиной этому является наличие точечных дефектов по границе раздела фаз, создаваемых дислокациями несоответствия.

Атомные ряды в направлении $\langle 112 \rangle$ не являются плотноупакованными. Вследствие этого, наблюдается некоторое снижение температуры начала структурной перестройки, по сравнению с включениями рядов Al ориентации $\langle 110 \rangle$ в Ni-матрицу (рис.5).

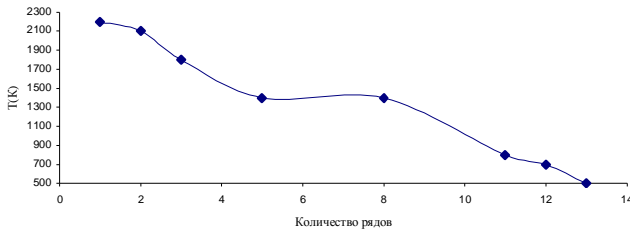


Рис.5 График изменения температуры начала структурной перестройки межфазной границы в зависимости от количества рядов Al ориентации <112>

В случае слоистой упаковки, представляющей собой укладку в Ni-ой матрице трех рядов атомов Al плотность локальных деформаций растяжения со стороны Al-ых рядов приводит к тому, что вся система оказывается, деформирована посредством одноосного сжатия (рис.6).

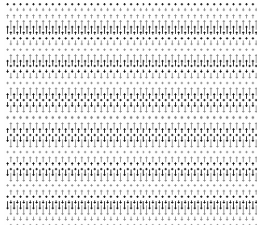


Рис.6 Атомные смещения в слоистой упаковке, представляющей собой укладку в Ni-ой матрице трех рядов атомов Al.

В реальном эксперименте такой способ получения композиционных материалов позволяет избежать термоактивируемого процесса структурной перестройки системы, соответствующей реакции самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС)-синтеза. Построенный таким способом композит оказывается стойким по отношению к диффузионным процессам вплоть до температуры 1700К. При этой температуре структурная перестройка характеризуется коллективными смещениями атомов, как вдоль межфазной границы, так и через нее.

В примере сетчатой упаковки металлического композита, заметная диффузия была обнаружена при импульсном разогреве системы до температуры 900К. Структурная перестройка системы характеризуется действием двух механизмов: переползанием относительно межфазной

границы дислокаций, связанных с размерным несоответствием атомов Al и Ni, наличием пар Френкеля (вакансии и межузельного атома).

При построении композита, включающего в Ni-матрице ромб из атомов Al, уже при релаксации на границах двух металлов появляются дислокационные несоответствия. Соответственно, размываются структурные характеристики системы. Очевидно, что поля упругих напряжений в данном случае оказываются достаточно высокими. В результате данная структура сохранила заданный порядок вплоть до температуры – 600К. Внутри Al-го слоя распределения потенциальной энергии имеют области локального повышения энергии, соответствующие зонам, где находятся дислокации, в Ni –ой зоне в трех ближайших слоях к межфазной границе относительный уровень потенциальной энергии оказывается более высоким.

Так как упаковка атомных рядов в Ni₃Al представляет чередующуюся последовательность моноатомных и биатомных рядов, то при замене нечетного числа атомных рядов интерметаллида существует два варианта образования межфазной границы в интерметаллиде. В первом случае граница представляется парой моноатомных рядов, а во втором случае граница представляется парой биатомных рядов.

Распределение температур начала перестройки межфазной границы в данной последовательности экспериментов приводится на рис.7. Из графика видно, что в целом, с увеличением числа атомов прослойки Al уменьшается температура начала разрушения межфазной границы. Более стабильными, или требующими более высокую температуру для активизации диффузионного процесса, являются конфигурации, которые соответствуют межфазной границе, состоящей из моноатомных рядов.

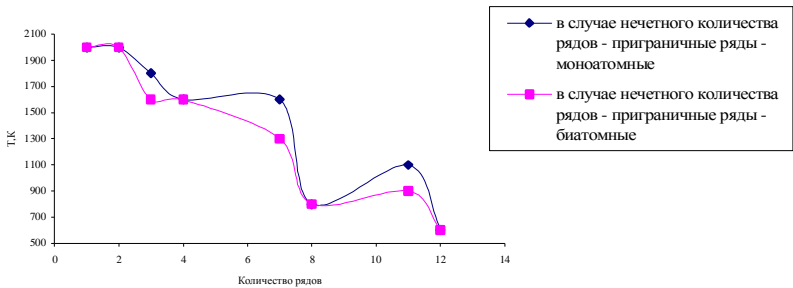


Рис. 7 График изменения температуры начала структурной перестройки межфазной границы в зависимости от количества рядов Al ориентации <110>

Уровень понижения энергии в таких конфигурациях с увеличением числа внедренных рядов атомов Al оказывается меньшим, по сравнению с включением четного числа рядов атомов Al в матрицу Ni₃Al. В итоге при большей толщине прослойки Al температура начала структурной

перестройки снижается до 600К. В основном при низких температурах работают термоактивируемые механизмы образования и движения (переползания) дислокаций.

Упаковка атомных рядов в направлении $\langle 112 \rangle$ является менее плотной, по сравнению с ориентацией $\langle 110 \rangle$. Поэтому, в этом случае, можно ожидать изменение температурных интервалов в момент разрушения межфазной границы, по сравнению с рядами, ориентированными в плоскостях $\langle 110 \rangle$, так как упругие поля будут менее интенсивными. Это связано с различием эффективных атомных размеров Ni и Al. Так же, как при исследовании атомных рядов, ориентированных в направлении $\langle 110 \rangle$, при замещении атомных рядов в матрице интерметаллида Ni_3Al при четном количестве рядов существует один вариант упаковки, при нечетном – два варианта. В первом варианте – пограничный слой состоит из атомов Ni, во втором пограничные ряды являются биатомными. В ориентации атомных рядов в направлении $\langle 112 \rangle$ скорость изменения понижения температуры в зависимости от числа атомных рядов, включаемых в матрицу Ni_3Al , оказывается меньшей по сравнению с предшествующей ориентацией. При внедрении нечетного количества рядов Al различие по температуре между двумя конфигурациями не наблюдается (рис.8).

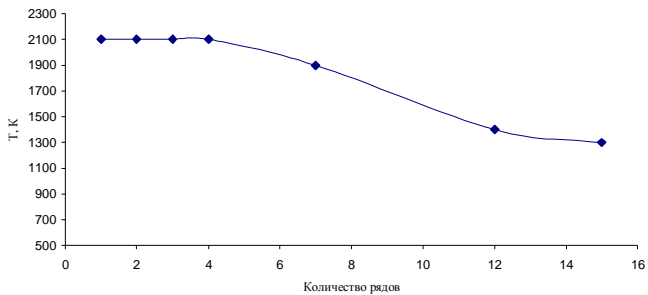


Рис.8 График изменения температуры начала структурной перестройки межфазной границы в зависимости от количества рядов Al ориентации $\langle 112 \rangle$

В случае сетчатой упаковки композиционного материала $\text{Ni}_3\text{Al}-\text{Al}$ при импульсном разогреве уже до 600К наблюдаются определенные нарушения системы, имеющие место, в основном в Al-ой прослойке ориентации $\langle 110 \rangle$. Слой Al в направлении $\langle 112 \rangle$ сохраняет свою стабильность, в слое $\langle 110 \rangle$ происходят коллективные перемещения рядов атомов Al вдоль межфазной границы, появляются дислокации несоответствия, прорастающие вглубь Al – ой прослойки. Дислокации несоответствия по обе стороны межфазной границы образуют дислокационные диполи. При этом заметного изменения

фазового состава не происходит, за исключением возникновения области пластической деформации. В дальнейшем, при повышении температуры до 900К, в зоне деформации, появляются области разрушения межфазной границы, приводящие к образованию областей разупорядочения в матрице интерметаллида. В зонах разупорядочения появляются элементы, которые можно отнести к сегрегациям фаз NiAl_2 , Ni_2Al , NiAl_3 .

При включении ромба из атомов Al в матрицу интерметаллида Ni_3Al после температуры импульсного разогрева до 600К и закалки на межфазной границе образуются дислокации. Общая энергия системы понижается, очевидно, за счет образования новых фаз интерметаллида. Структурные характеристики системы размываются.

Сборка композиционных материалов на основе Ni-ой и Ni_3Al – ой матриц с включением в качестве армирующих элементов Al-ых упаковок приводит, при малых размерах включений Al, к повышению температуры диффузионной стабильности межфазной границы. Этот эффект прежде всего связан с большими эффективными размерами атомов Al по сравнению с атомами Ni. При увеличении размера Al-ого включения, оно начинает играть роль демпфирующих прослоек, на которых происходит поглощение энергии внешнего воздействия за счет пластической деформации. В основе таких превращений, по-видимому, лежат внутренние напряжения, возникающие в материале на атомном уровне, связанные не только с различием эффективных размеров Al и Ni, а также в различии приращения температурного коэффициента линейного расширения в исследуемых материалах.

В 5-ой главе приводятся результаты исследований композиционных материалов, которые составлялись из блоков пластичной матрицы Al, в качестве армирующих элементов выступают высокопрочные прослойки Ni и Ni_3Al .

С увеличением числа атомов Ni в матрице Al на границе раздела фаз возникают дислокации несоответствия. В качестве примера приведены картины угловых распределений атомных рядов в направлениях 30° - 30° и 30° - 90° при наличии 2-х рядов Ni в Al-ой матрице при импульсном разогреве кристалла композита до 1300К (рис.9). Обнаружено, что внутри и по границе прослойки Ni, параллельно межфазной границе образуется дислокационный диполь.

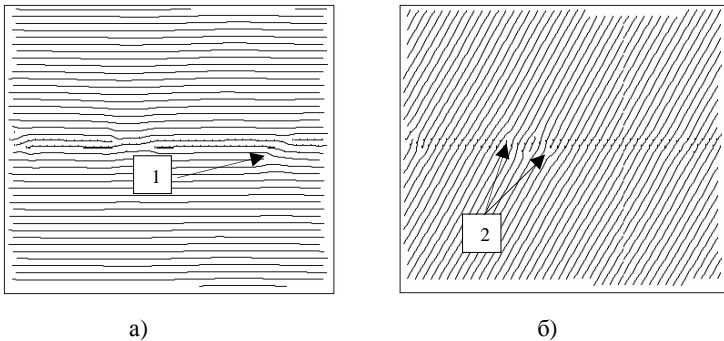


Рис.9 Диаграммы распределения плотноупакованных атомных рядов при импульсном разогреве до 1300К и закалке: а) для углового диапазона -30° - 30° ; б) 30° - 90° (1- дислокационный диполь, 2- дислокации)

При упаковке от 1 до 5 атомных рядов Ni, включаемых в направлении $\langle 110 \rangle$, в матрицу Al общий уровень температуры, при котором происходит нарушение сплошности межфазной границы, равен 1300К. Затем температура спадает к 7 ряду до уровня 1100К. Эта температура соответствует предельному значению температур, при котором начинается диффузия в идеальной решетке чистого Al (гл.2).

При включении рядов Ni (от 1 до 3) в направлении $\langle 112 \rangle$ в матрицу Al разрушение структуры композита начинается в Al-ой матрице и представляет собой кольцевые механизмы диффузии, при повышении температуры разрушения возникают вблизи и на межфазной границе, представляя собой кольцевые и краудинные перемещения атомов. В дальнейшем повышение температуры приводит к появлению кооперативных перемещений, возникающих в Ni –ой прослойке и пронизывающих Al-ую матрицу, приводящих к пластической деформации кристалла композита.

С увеличением числа рядов Ni в Al – ой матрице отмечается возрастание плотности дислокаций несоответствия, возникающих на границе раздела фаз композиционного материала. При включении рядов Ni в Al-ую матрицу в ориентации $\langle 112 \rangle$ наблюдается небольшое снижение температуры начала структурной перестройки по сравнению с включением рядов Ni в направлении $\langle 110 \rangle$, причем температура начала диффузионных процессов незначительно зависит от числа включаемых рядов в направлении $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$.

В случае сетчатой компоновки композиционного материала Al-Ni, а также включений типа ромба наблюдается снижение температуры начала структурной перестройки материала до 600К, что ниже тестовых данных приблизительно на 300К. Вблизи межфазной границы появляются дислокации. Коллективные смещения атомов наблюдаются как в зоне Al-ой матрицы, так и внутри Ni-ой прослойки

Температура начала структурной перестройки в композиционных материалах Al – Ni₃Al близка к тестовой температуре плавления для чистого Al (гл.2) и незначительно зависит от количества рядов Ni₃Al, помещенных в Al-ую матрицу, в направлении <110>. При малом количестве рядов это кольцевые механизмы диффузии, возникающие в основном вблизи межфазной границы, при большом - кооперативные смещения атомов, вызывающие пластическую деформацию материала.

При включении рядов Ni₃Al в Al-ую матрицу в направлении <112> в количестве от 3 до 5 механизмы диффузии представляют собой кольцевые перемещения атомов вблизи межфазной границы. При большем количестве рядов это миграции атомов вблизи ядер дислокаций несоответствия.

В композиционном материале, состоящем из матрицы Al и прослойки Ni₃Al в виде ромба уже при температуре импульсного разогрева 500K наблюдаются коллективные перемещения атомов, начинающиеся на межфазной границе и пронизывающие Al-ую матрицу.

В случае сетчатой упаковки композиционного материала Al-Ni₃Al разрушения межфазной границы начинаются в направлении <112> при температуре 600K, в направлении <110 > межфазная граница остается достаточно стабильной до более высоких температур.

Таким образом, во всех случаях, при включении высокопрочных прослоек Ni и Ni₃Al в блоки пластичной матрицы искажения межфазной границы при увеличении толщины прослоек происходят за счет миграции атомов вблизи ядер дислокаций несоответствия.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В диссертационной работе проведено исследование стабильности межфазных границ композиционных материалов в двумерной системе Ni-Al. В результате исследований сделаны следующие выводы:

1. Температура начала структурной перестройки в композитах, состоящих из матрицы Ni и Ni₃Al-ых включений, а также из матрицы Ni₃Al и включений Ni близка к температурам плавления матрицы. Форма включений в этом случае играет незначительную роль. Наиболее стабильными являются композиты, составленные в виде матрицы и включений, представленных одним или несколькими рядами в направлении <110>.

2. Обнаружено, что форма включений в матрицу существенно влияет на температуру начала структурной перестройки в композиционных материалах Ni₃Al-Al, Ni-Al. Наиболее стабильными являются композиционные материалы исследуемых систем при включении малого количества рядов в направлении <110> и <112>. Температура начала диффузионных процессов в таких системах при включении одного - двух рядов Al в интерметаллид Ni₃Al составляет 1900-2000K, при включении одного-двух рядов Al в матрицу Ni - 2000-2100K. Увеличение количества рядов снижает температуру начала структурной перестройки до 1200K, 1400K, соответственно. При включении нечетного количества рядов Al в интерметаллид Ni₃Al в направлениях <110> и

$\langle 112 \rangle$ установлено, что в случае биатомного типа межфазной границы уменьшается температура начала структурной перестройки исследуемой системы на 100-150К по сравнению с моноатомной. Включение Al в виде ромба в матричные материалы Ni, Ni₃Al уменьшает температуру начала структурной перестройки уже до 600К. Этот эффект прежде всего связан с тем, что приграничные атомы, находятся в более глубоких потенциальных ямах, вследствие чего возникает запирающий слой, препятствующий возникновению диффузии. При увеличении размера Al -ого включения, оно начинает играть роль демпфирующих прослоек, на которых происходит поглощение энергии внешнего воздействия за счет пластической деформации.

3. В композитах, составленных из матрицы Al и включений Ni или Ni₃Al, форма включений также играет роль. При включении рядов в направлении $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ температура начала структурной перестройки повышается на 250-300К. При увеличении количества рядов температура монотонно снижается и стабилизируется на уровне 1100К, что соответствует тестовой температуре плавления Al, определенной в гл.2. Включение прослоек Ni, Ni₃Al в виде ромба, а так же сетчатая упаковка снижает температуру стабильности таких систем до 500-600К.

4. Показано, что механизмы диффузионных превращений зависят от структуры композиционного материала, температуры импульсного разогрева и времени компьютерного эксперимента. Структурная перестройка в композиционных материалах Ni-Ni₃Al, Ni₃Al-Ni осуществляется за счет действия кольцевых и краудсионных механизмов диффузии. При повышении температуры импульсного разогрева появляются и рекомбинируют динамические пары Френкеля, вносящие весомый вклад в процесс разупорядочения композиционного материала. В композиционном материале Ni-Al, Ni₃Al-Al преобладают кольцевые механизмы диффузии, смещения атомов по краудсионному механизму. При повышении температуры, наблюдается миграция атомов вблизи ядер дислокаций несоответствия. В композитах системы Al-Ni, Al-Ni₃Al преобладают дислокации несоответствия вблизи межфазной границы вызывающие структурную перестройку системы.

5. Установлено, что точечные дефекты значительно снижают температуру начала диффузионных процессов в исследуемых композиционных материалах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Достижения в области композиционных материалов: Пер. с англ./ Под ред. Дж. Пиатти. – М.: Металлургия, 1982, 304 с.
2. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статистической физике // УФН 1978. Т.125, №3 с.409-448
3. 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 L1₂ // ФММ, 1984, Т.58, №2, С. 336-343.

4. Полетаев Г.М. Исследование процессов взаимной диффузии в двумерной системе Ni-Al. Диссертации на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук, Барнаул, 2002, 186 с.

Основные результаты диссертационного исследования изложены в следующих работах:

1. Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Попова Г.В., Денисова Н.Ф., Дёмина И.А. Компьютерное моделирование структурно - энергетических превращений в нанокристаллах и низкоразмерных системах // Ползуновский Альманах. - 2003. - №3-4. - С. 115-117.

2. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Гурова Н.М., Попова Г.В. Исследование стабильности интерметаллических соединений системы Ni – Al. // Региональный Вестник Востока. - 2004.- №1.- С. 29-36.

3. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Исследование стабильности композиционного материала (Ni₃Al+Al) в зависимости от температуры. // Тезисы 4 -Международной школы - семинара «Физика конденсированного состояния», г. Усть-Каменогорск, 2004. - С. 116-117.

4. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Компьютерное исследование стабильности интерметаллида Ni₃Al в зависимости от температуры. // Тезисы 4 -Международной школы - семинара «Физика конденсированного состояния», г. Усть-Каменогорск, 2004. - С. 119-121.

5. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Полетаев Г.М, Попова Г.В. The exploration of stability of two dimensional nanocrystalline metallic composites depending on temperature. // Тезисы 8 - Международной конференции «Физика твёрдого тела», г. Алматы, 2004.- С. 316-317.

6. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Исследование термоактивируемой стабильности двумерных металлических композитов. // Сб. тезисов XLIII международной конференции «Актуальные проблемы прочности», г. Витебск, Беларусь, ч.2, 2004. - С.122.

7. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Компьютерный эксперимент по исследованию стабильности интерметаллических соединений системы Ni – Al. // Вестник КарГУ им. Букетова, 2004.- №4.- С.58-62.

8. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Полетаев Г.М., Попова Г.В. Исследование стабильности двумерных нанокристаллических металлических композитов в зависимости от температуры // Тезисы 10-межвузовской конференции по математике и механике., г. Алматы, Каз НУ им. Аль-Фараби, 2004.-С.218.

9. Starostenkov M., Poletaev G., Popova G. The research of the combustion synthesis process in two-dimensional crystals of Ni – Al system // Proceedings of 2nd Intern. Conf. on Multiscale Materials Modeling (MMM-II), Los-Angeles, USA, 2004. – <http://osiris.seas.ucla.edu/mmm/abstracts/s8/807-Star.pdf>

10. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Исследование стабильности межфазных границ в двумерном металлическом композите

$\text{Ni}_3\text{Al} - \text{Al}$ // Вестник Каз НУ им. Аль – Фараби, серия «Физика» №1, 2005. - С.97-101.

11. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Компьютерный эксперимент по исследованию механизмов разупорядочения металлического композита ($\text{Ni}_3\text{Al-Ni}$) // Тезисы 5-Международной конференции «Ядерная и радиационная физика» г. Алматы, 2005. - С. 355-356.

12. Попова Г.В. Механизмы разупорядочения двумерного кристалла металлического композита ($\text{Ni}_3\text{Al-Ni}$) // Тезисы 59 - научно практической конференции молодых учёных, г. Алматы, 2005. - С.72.

13. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Исследование механизмов разупорядочения металлического композита $\text{Ni}_3\text{Al-Ni}$ // Вестник Каз. НТУ им. К.И. Сатпаева, №4, 2005. - С. 134-139.

14. Старостенков М.Д., Скаков М.К., Попова Г.В. Компьютерный эксперимент по исследованию механизмов разупорядочения металлического композита ($\text{Ni}_3\text{Al-Ni}$) // Вестник КарГУ им. Букетова, 2005. №3. - С. 36-40.

15. Старостенков М.Д., Попова Г.В., Холодова Н.Б. Исследование стабильности межфазных границ в двумерных металлических композитах $\text{Ni} - \text{Al}$ // Материалы международной научной – технической конференции «Композиты в народное хозяйство», г. Барнаул, 2005.- С. 108-115.

16. Старостенков М.Д., Денисова Н.Ф., Полетаев Г.М., Попова Г.В., Холодова Н.Б. Компьютерный эксперимент: его место, методы, проблемы, некоторые достижения в физике твёрдого тела // Вестник КарГУ им. Букетова, 2005. –Т.40, №4. С.101-113

17. Старостенков М.Д., Попова Г.В., Полетаев Г.М., Синяев Д.В. Исследование температурных интервалов стабильности межфазных границ в двумерных металлических композитах $\text{Ni}_3\text{Al-Ni}$ // Изв. Вузов. Черная металлургия, 2006.- №6.- С.24-27

18. Попова Г.В., Старостенков М.Д. Исследование стабильности композиционных материалов системы Ni-Al // Тезисы 9-ой Международной научной конференции «Физика твердого тела» г. Караганда, 2006.- С. 118-119.