

УДК 539.4.015

ВКЛАД ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ТЕМПЕРАТУРНУЮ АНОМАЛИЮ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА Ni_3Ge

Ю. А. Абзаев

Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003 Томск
E-mail: Abzaev@tsuab.ru

Исследована температурная зависимость предела текучести τ_* монокристаллов Ni_3Ge . Установлено, что температурная зависимость $\tau_*(T)$ в высокотемпературной области (свыше 420 К) обусловлена термоактивированным накоплением плотности невинтовых компонентов сверхдислокаций. Проведен анализ взаимодействия точечных дефектов с краевыми дислокациями и его влияния на температурную аномалию предела текучести монокристаллов Ni_3Ge . Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: предел текучести, температурное упрочнение, краевые сверхдислокации, точечные дефекты, сверхструктура $L1_2$.

В монокристаллах сплава Ni_3Ge наблюдается значительная температурная аномалия предела текучести τ_* [1–5]. В работах [2–5] проведен подробный анализ характеристик кривых течения и данных об эволюции дислокационных субструктур в процессе деформации в монокристаллах Ni_3Ge при различных температурах испытания. Установлено, что зависимости $\tau_*(T)$ являются немонотонными и на восходящей ветви имеются участки с разной интенсивностью температурного упрочнения. В низкотемпературной области (до 420 К) в сплаве Ni_3Ge увеличение предела текучести с увеличением температуры обусловлено формированием барьеров Кира — Вильсдорфа на винтовых компонентах сверхдислокаций. Недостаточно изучен механизм взаимодействия краевых компонентов с точечными дефектами, а также их влияние на предел текучести.

Целью данной работы является анализ механизма взаимодействия краевых компонентов сверхдислокаций с точечными дефектами и влияния этого взаимодействия на увеличение предела текучести монокристаллов Ni_3Ge с увеличением температуры (при температурах свыше 420 К).

Методика приготовления образцов, проведения механических испытаний и исследования дислокационной структуры монокристаллов Ni_3Ge приведена в работах [2, 4]. На рис. 1, а для различных значений деформации ε представлены температурные зависимости предела текучести монокристаллов сплава Ni_3Ge с направлениями оси деформации [001], $[\bar{1}39]$, $[4917]$, $[\bar{2}34]$, $[\bar{1}11]$. Температура, при которой проводятся испытания указанных монокристаллов Ni_3Ge , оказывает значительное влияние на зависимость $\tau_*(T)$. На восходящей ветви кривой $\tau_*(T)$ выделяются участки, которые характеризуются разной интенсивностью температурного упрочнения. До $T \approx 420$ К имеет место низкотемпературный участок, при $T > 420$ К — высокотемпературный участок. На втором участке наблюдается температурная аномалия предела текучести, и максимум на зависимостях $\tau_*(T)$ (температура пика $T_p \approx 873$ К) слабо зависит от ориентации оси деформации (рис. 1, а).

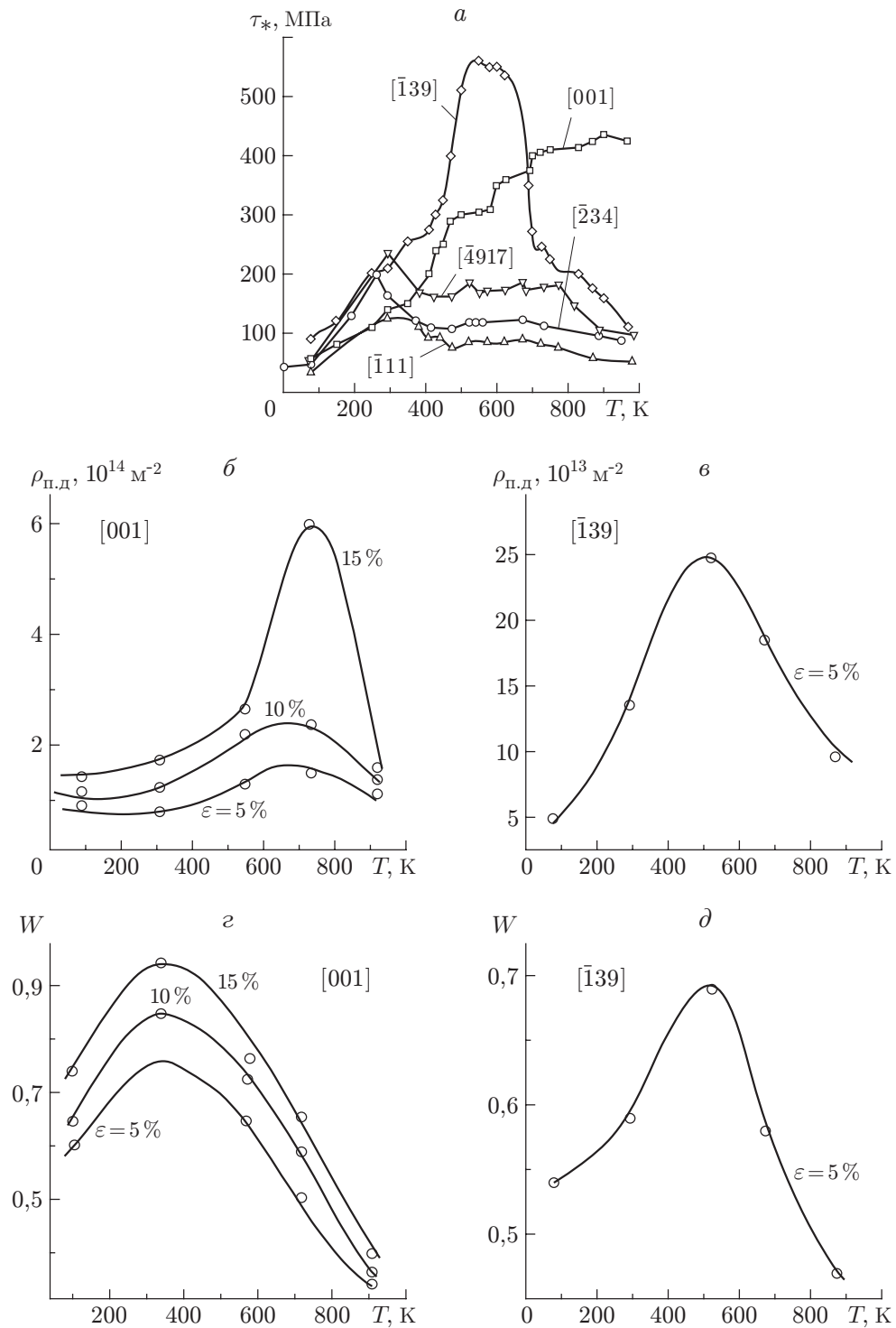


Рис. 1. Зависимости предела текучести τ_* (а), плотности прямолинейных дислокаций $\rho_{\text{п.д}}$ (б, в) и доли прямолинейных дислокаций W (г, д) от температуры в монокристаллах Ni_3Ge различной ориентации

Исследование эволюции дислокационной субструктуры с деформацией монокристаллов Ni_3Ge показало, что она соответствует хаотическому и однородному типу субструктур [6]. Основными конфигурациями являются прямолинейные и искривленные сверхдислокации, диполи и дипольные конфигурации, осколки дислокаций [7] в виде рядов петель малого радиуса и узких диполей. В работе исследованы температурные зависимости скалярной плотности дислокаций и плотности прямолинейных дислокаций $\rho_{\text{п.д}}(T)$ при различной степени деформации. Скалярная плотность и плотность прямолинейных дислокаций возрастают с увеличением деформации и температуры испытания в интервале температур $T = 77 \div 293$ К. Более того, доля прямолинейных дислокаций W возрастает с увеличением температуры в низкотемпературном интервале (рис. 1, б–д). Доля W равна отношению плотности прямолинейных дислокаций к скалярной плотности. Анализ зависимости $\tau_*(T)$ (рис. 1) показывает, что она коррелирует с зависимостями $\rho_{\text{п.д}}(T)$ и $W(T)$ в низкотемпературной области. С возрастанием зависимостей $\rho_{\text{п.д}}(T)$ и $W(T)$ наблюдается возрастание зависимости $\tau_*(T)$. В литературе имеется большое количество данных, свидетельствующих о том, что прямолинейные дислокации являются барьерами Кира — Вильсдорфа [8–12]. Подвижность винтовых сверхдислокаций с ростом температуры снижается и приводит к возрастанию зависимости $\rho_{\text{п.д}}(T)$, а также к существенному увеличению количества барьеров Кира — Вильсдорфа, которые в монокристаллах Ni_3Ge идентифицируются с прямолинейными дислокациями. В работе [13] проведены расчеты движущей силы формирования барьеров Кира — Вильсдорфа на винтовых компонентах сверхдислокаций и оценено их влияние на температурную аномалию $\tau_*(T)$.

На рис. 1, г, д видно, что в высокотемпературной области ($T > 420$ К) для монокристаллов Ni_3Ge с ориентациями [001] и $[\bar{1}39]$ значительная температурная аномалия предела текучести обусловлена накоплением дислокаций непрямолинейных конфигураций. Температурный рост плотности непрямолинейных конфигураций сверхдислокаций обусловлен взаимодействием краевых компонентов сверхдислокаций с деформационными точечными дефектами [2–4]. В результате осаждения-захвата точечных дефектов подвижными сегментами сверхдислокаций происходит закрепление этих сегментов с последующим сохранением искривленной формы. До температуры пика $T \approx 873$ К температурная аномалия $\tau_*(T)$ обусловлена накоплением указанных конфигураций сверхдислокаций на начальных стадиях деформации. Все это обуславливает сложную температурную зависимость предела текучести, соответствующую восходящей ветви $\tau_*(T)$, в монокристаллах сплава Ni_3Ge с различными ориентациями. Степень влияния указанных механизмов зависит от температуры испытания.

В монокристаллах Ni_3Ge деформация осуществляется сверхдислокациями, которые состоят из двух сверхчастичных дислокаций $a/2 \langle 110 \rangle$ (a — параметр решетки), соединенных антифазной границей (АФГ). Сверхчастичные дислокации расщеплены на частичные дислокации Шокли, связанные комплексным дефектом упаковки (КДУ), энергия которого значительна (рис. 2). Действительно, полагая $\gamma_{\text{КДУ}} \approx \gamma_{\text{АФГ}} + \gamma_{\text{ДУ}}$, где $\gamma_{\text{АФГ}} \approx 180$ Дж/м² — энергия АФГ; $\gamma_{\text{ДУ}} \approx 100$ Дж/м² — энергия дефекта упаковки, получим $\gamma_{\text{КДУ}} \approx 280$ Дж/м². Следовательно, ширина сверхчастичной дислокации незначительна: $r \approx 2 \div 4$ нм [8, 11]. Взаимодействие краевых сверхдислокаций с точечными дефектами в Ni_3Ge обладает некоторыми особенностями. Монокристаллы Ni_3Ge упорядочены по типу $L1_2$ сверхструктуры, в основе которой находится ГЦК-упаковка атомов, а между частичными дислокациями Шокли имеется сверхструктура на основе ГПУ-упаковки [12, 14, 15]. Растворимости точечных дефектов в указанных сверхструктурах различны, вследствие чего формируется движущая сила потока точечных дефектов восходящей диффузии в направлении КДУ.

На рис. 2 приведена схема взаимодействия краевого компонента сверхдислокации с точечным дефектом в октаэдрической плоскости скольжения. Точечный дефект, заблоки-

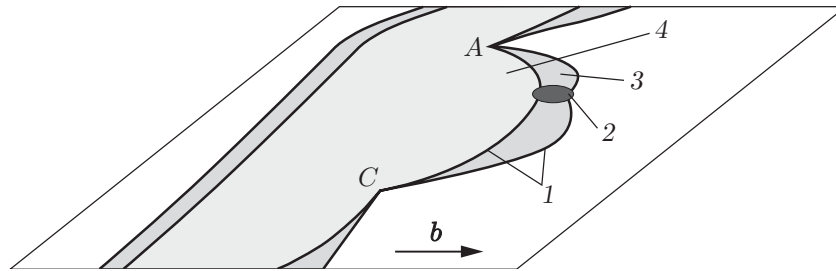


Рис. 2. Схема взаимодействия сверхчастичной дислокации AC с точечным дефектом в октаэдрической плоскости скольжения (111):

1 — сверхчастичная дислокация, состоящая из двух частичных дислокаций Шокли; 2 — деформационный точечный дефект; 3 — комплексный дефект упаковки; 4 — антифазная граница; точки A, C — места закрепления сегмента сверхчастичной дислокации

ровавший сегмент дислокации, является препятствием средней прочности. Поэтому атермическое преодоление точечного препятствия маловероятно. Действительно, для продвижения сверхдислокации на длину вектора Бюргера $2b = b + b$ необходимы напряжения $\tau \geq [\gamma_{\text{КДУ}}/b - (\gamma_{\text{КДУ}} - \gamma_{\text{КДУ}}(C_{\text{д}}))]$ ($C_{\text{д}}$ — концентрация точечных дефектов). Для преодоления сверхдислокацией точечного препятствия необходимы напряжения $\tau \approx \gamma_{\text{КДУ}}(C_{\text{д}})/b$. Наличие точечного дефекта на сверхчастичных дислокациях приводит к существенному уменьшению $\gamma_{\text{КДУ}}$ на величину $\gamma_{\text{КДУ}}(C_{\text{д}})$, поскольку $\gamma_{\text{КДУ}}$ является функцией концентрации точечных дефектов [16]. При малой ширине сверхчастичных дислокаций ($r \approx 2 \div 4$ нм) в случае захвата точечного дефекта (в частности, вакансии) в результате разрыва атомных связей произойдет существенное изменение энергии комплексного дефекта упаковки и поэтому $\gamma_{\text{КДУ}}(C_{\text{д}})$ будет составлять значительную долю $\gamma_{\text{КДУ}}$. В этом случае напряжения $\tau \approx \gamma_{\text{КДУ}}(C_{\text{д}})/b$, необходимые для отрыва дефекта от дислокации, будут сопоставимы с пределом текучести при $T_p \approx 873$ К или превысят его.

Рассмотрим термоактивированное преодоление свободным сегментом сверхдислокации точечного дефекта. Для сплава Ni_3Ge установлено, что при всех исследованных температурах испытания в процессе деформации наблюдается линейная зависимость между сдвиговыми напряжениями и скалярной плотностью дислокаций [3–5]:

$$\tau = \tau_F + \alpha G b \rho^{1/2}. \quad (1)$$

Здесь τ_F — напряжение самоторможения; α — параметр междислокационного взаимодействия; G — модуль сдвига; ρ — плотность дислокаций. В левой части уравнения (1) находятся внешние напряжения, в правой — внутренние: $\tau_{\text{в}} = \tau_F + \alpha G b \rho^{1/2}$ ($\tau_{\text{в}}$ — внутренние напряжения). Равенство (1) свидетельствует о том, что основной вклад во внутренние напряжения вносит линейная плотность стопоров на линии дислокаций. Деформационные точечные дефекты в плоскости скольжения соответствуют указанным стопорам. Увеличение предела текучести с ростом температуры в значительной степени обусловлено увеличением напряжений самоторможения τ_F вследствие роста температуры [3–5]. Напряжение самоторможения возникает вследствие формирования барьеров Кира — Вильсдорфа на винтовых компонентах сверхдислокаций и взаимодействия краевых компонентов с точечными дефектами. Результатом взаимодействия последних является накопление искривленных конфигураций сверхдислокаций на начальных стадиях деформации из-за высокой температуры (см. рис. 1, б, г).

Равенство (1) может быть использовано для определения напряжения самоторможения τ_F , обусловленного взаимодействием краевых сверхдислокаций с дефектами. Для двух последовательных конфигураций прогибы свободных сегментов ABC (рис. 3, а), взаимо-

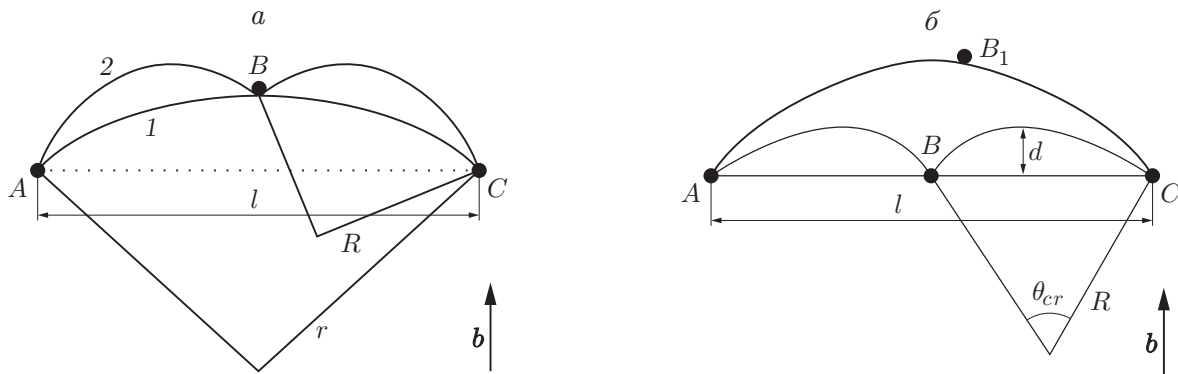


Рис. 3. Схема взаимодействия свободного сегмента сверхдислокации AC с точечным дефектом в точке B :

a — расположение дислокаций и точечного дефекта; b — прогиб сегмента дислокации на пределе текучести; 1 — дислокация ABC в момент касания точечного дефекта; 2 — дислокация ABC в момент отрыва от точечного дефекта

действующих с дефектом, обусловлены напряжениями $\tau(R)$ и $\tau(r)$. Для указанных сегментов напряжения $\tau(R)$ и $\tau(r)$ в соответствии с формулой (1) связаны зависимостью $W_2/R = \tau_F + W_2/r$ (W_2 — линейное натяжение сверхдислокации). Следовательно,

$$\tau_F = W_2/R - W_2/r \quad (2)$$

(R, r — радиусы прогиба сегментов дислокаций).

На рис. 3 точки A, C — это точки закрепления дислокациями леса; B, B_1 — соседние дефекты в плоскости скольжения. Используем уравнение (2) для описания начальных стадий деформации (вблизи предела текучести). В этом случае исходная конфигурация ABC соответствует прямой линии ABC на рис. 3, б. Полагаем, что точечный дефект находится в середине сегмента ABC , на пределе текучести напряжение самоторможения τ_F равно напряжению, необходимому для деформирования сегмента дислокации BC в дугу радиуса R . Критический угол прогиба ($\theta = \theta_{cr}$) соответствует отрыву точечного дефекта от дислокации (рис. 3, б). Следовательно,

$$\tau_F = W_2/R. \quad (3)$$

Расчет τ_F выполнен при следующих допущениях. В плоскости скольжения наблюдается равномерная (хаотическая) концентрация деформационных точечных дефектов. С повышением температуры подвижность порогов возрастает и уменьшается время отрыва точечного дефекта от дислокации [9, 17]. В [18] приводятся расчеты концентрации деформационных точечных дефектов. В частности, концентрация деформационных дефектов при различных температурах испытания может быть найдена по формуле

$$\frac{\partial C_d}{\partial \gamma} = \frac{p_j \xi B \alpha b \rho^{1/2}}{60}, \quad (4)$$

где p_j — доля порогообразующих дислокаций леса; ξ — доля дислокаций леса; $B \approx 500$ — константа, определяемая вероятностью образования дислокационного соединения [18]; γ — сдвиг. Из формулы (4) следует, что даже на начальных стадиях деформации линейная плотность дефектов такова, что среднее расстояние между ними сопоставимо со средним расстоянием между дислокациями. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами имеет нелокальный характер. В результате такого взаимодействия происходит ограничение прогиба свободного сегмента AC (рис. 3, б). Согласно рис. 3, б имеет место соотношение

$d = R(1 - \cos(\theta_{cr}/2))$. Осаждение-захват точечного дефекта сегментом дислокации в точке B является случайным процессом. Благоприятным событием является любой участок сегмента дислокации AC , где возможно осаждение дефекта. Тогда по формуле полной вероятности вероятность события равна $f(AC) = (l/d_1)(d/V)f$, где l — длина сегмента дислокации AC (рис. 3,б); d_1 — линейный размер области контакта дефекта и дислокации; V — скорость движения дислокации; $f = \nu \exp(-U/(kT))$ — вероятность перескока дефекта в единицу времени; ν — частотный фактор; U — энергия активации диффузии точечного дефекта; k — постоянная Больцмана; T — температура. Используем приближение вязкого сопротивления прогибу сегмента AC (рис. 3,б). Тогда $\tau b = BV$. Здесь $B = 5 \cdot 10^{-4}$ дин/(с·см²) — коэффициент вязкости [9]; $\sin(\theta_{cr}/2) = l/(2R)$. В случае захвата точечного дефекта сегментом дислокации это событие является достоверным и, следовательно,

$$\frac{l}{d_1} \frac{d}{V} f = 1. \quad (5)$$

Используя в (5) приведенные выше формулы, найдем радиус прогиба сегмента дислокации

$$R = \left(\frac{d_1 W_2}{4 \sin(\theta_{cr}/2)(1 - \cos(\theta_{cr}/2)) B f} \right)^{1/3}.$$

Подставляя радиус R в формулу (3), имеем

$$\tau_F = \frac{2W_2 \sin(\theta_{cr}/2)}{b} \left(\frac{\cos(\theta_{cr}/2) B \nu}{W_2 d_1} \right)^{1/3} e^{-U/(3kT)}. \quad (6)$$

Полагая, что линейное натяжение сверхдислокации близко к энергии, необходимой для создания сверхдислокации единичной длины, получим

$$W_2 \approx \gamma_{\text{АФГ}} r - \frac{Gb^2}{2\pi} \ln \frac{r}{R_1} + 2Gb^2. \quad (7)$$

Здесь первое слагаемое — энергия антифазной границы, второе — энергия взаимодействия сверхчастичных дислокаций, третье — собственная энергия дислокаций; r — ширина сверхчастичной дислокации; R_1 — среднее расстояние между дислокациями. Положим $G = 8 \cdot 10^4$ МПа, $r \approx 10$ нм, $b \approx 0,25$ нм, $\nu \approx 10^{13}$ с⁻¹, $\ln(r/R_1) \approx -3$, $d_1 \approx 0,25$ нм. Подставим эти значения в формулу (7). Предэкспоненциальный множитель для приведенных значений приближенно равен $2,05 \cdot 10^4$ МПа.

Проведена аппроксимация температурных зависимостей предела текучести τ_* для монокристаллов Ni₃Ge ориентаций [001] и $[\bar{1}39]$. Установлено, что на восходящей ветви зависимости $\tau_*(T)$ (при $T > 420$ К) предэкспоненциальные множители приближенно равны 10 000 и 46 600 МПа, а плотности энергии активации равны 3 и 3,3 мДж/м² для ориентаций [001] и $[\bar{1}39]$ монокристаллов Ni₃Ge соответственно. В формуле (6) энергия активации U делится на три. Экспериментально полученные значения плотности энергии активации 3 и 3,3 мДж/м², уменьшенные в три раза, оказываются близкими к плотности энергии активации миграции вакансий (порядка 10 мДж/м²). Из результатов сравнения расчетных значений предэкспоненциального множителя в формуле (7) с экспериментально полученными (10 000 и 46 563 МПа соответственно) следует, что они удовлетворительно согласуются. Отметим, что вследствие нелокальности формирования барьеров Кира — Вильсдорфа на винтовых компонентах сверхдислокаций движущая сила образования этих барьеров также занижена в три раза [9–11, 13]. Вследствие нелокального характера взаимодействия дислокации с точечным дефектом эффективная энергия активации существенно

меньше энергии миграции точечных дефектов. Это взаимодействие в плоскости скольжения происходит на площади, пропорциональной среднему расстоянию между дислокациями, и площади, приходящейся на один точечный дефект. Энергии активации термоактивированных процессов, определенные по температурным зависимостям предела текучести и напряжений течения, не могут непосредственно сравниваться с энергией активации миграции точечных дефектов.

Таким образом, проведенное исследование температурной зависимости предела текучести позволило выявить сложные немонотонные температурные зависимости напряжений течения и предела текучести. Детальное исследование дислокационных субструктур при различной температуре испытания показало, что увеличение τ_* с увеличением температуры ($T > 420$ К) обусловлено ростом дислокаций непрямолинейных конфигураций. Формирование непрямолинейных конфигураций сверхдислокаций обусловлено взаимодействием этих сегментов с точечными дефектами в октаэдрической плоскости скольжения. Об этом свидетельствует совокупность данных электронно-микроскопических исследований дислокационных субструктур при различной температуре испытания. Учет взаимодействия краевых компонентов с точечными дефектами без учета рекомбинации частичных дислокаций Шокли позволяет описать значительное увеличение предела текучести с ростом температуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Pak H.-r., Saburi T., Nenno S.** The temperature and orientation dependence of the yield stress in Ni_3Ge single crystals // *Trans. Japan Inst. Metals.* 1977. V. 18, N 9. P. 617–626.
2. **Старенченко В. А., Абзаев Ю. А., Конева Н. А., Козлов Э. В.** Термическое упрочнение и эволюция дислокационной структуры монокристаллов сплава Ni_3Ge // *Физика металлов и металловедение.* 1989. Т. 68, вып. 3. С. 595–601.
3. **Старенченко В. А., Абзаев Ю. А.** Температурная зависимость параметров междислокационного взаимодействия в монокристаллах Ni_3Ge // *Металлофизика.* 1991. № 2. С. 131–136.
4. **Старенченко В. А., Абзаев Ю. А., Соловьева Ю. В., Козлов Э. В.** Термическое упрочнение монокристаллов Ni_3Ge // *Физика металлов и металловедение.* 1995. Т. 79, вып. 1. С. 147–155.
5. **Старенченко В. А., Соловьева Ю. В., Абзаев Ю. А., Смирнов Б. И.** Ориентационная зависимость термического упрочнения монокристаллов сплава Ni_3Ge // *Физика твердого тела.* 1996. № 38. С. 1668–1671.
6. **Конева Н. А., Козлов Э. В.** Природа субструктурного упрочнения // *Изв. вузов. Физика.* 1982. № 8. С. 3–14.
7. **Thornton P. H., Davies R. G., Johnston T. L.** The temperature dependence of flow stress of the phase based upon Ni_3Al // *Met. Trans.* 1970. V. 1. P. 207–218.
8. **Veyssiere P., Saada G.** Microscopy and plasticity of the L1_2 γ' -phase // *Dislocation in solids / Ed. by F. R. N. Nabarro.* Amsterdam: S. n., 1996. V. 10. P. 1–142.
9. **Takeuchi S., Kuramoto E.** Temperature orientation dependence of yield stress in Ni_3Ga single crystals // *Acta Met.* 1973. V. 21, N 4. P. 415–425.
10. **Paidar V., Pope D. P., Vitek V. A.** A theory of anomalous yield behavior in L1_2 ordered alloys // *Acta Met.* 1984. V. 32, N 3. P. 435–448.
11. **Hirsch P. H.** A new theory of the anomaly yield stress in L1_2 alloys // *Philos. Mag. Ser. A.* 1992. V. 65, N 3. P. 569–612.
12. **Suzuki T., Mishima Y., Miura S.** Behavior in $\text{Ni}_3(\text{Al},\text{X})$ single crystal — temperature, strain — rate, orientation and composition // *ISIJ Intern.* 1989. V. 29, N 1. P. 1–23.

13. **Абзаев Ю. А., Старенченко В. А., Козлов Э. В.** Анализ термоактивированного формирования и разрушения барьеров Кира — Вильсдорфа в монокристаллах Ni_3Ge различных ориентаций // ПМТФ. 2005. Т. 46, № 1. С. 116–125.
14. **Yamaguchi M., Vitek V., Pope D. P.** Planar faults in the $L1_2$ lattice stability and structure // Philos. Mag. Ser. A. 1981. V. 43, N 4. P. 1027–1044.
15. **Yamaguchi M., Paidar V., Pope D. P., Vitek V.** Dissociation and core structure of $\langle 110 \rangle$ screw dislocations in $L1_2$ ordered alloys. 1. Core structure in unstressed crystals // Philos. Mag. Ser. A. 1982. V. 45, N 5. P. 867–882.
16. **Козлов Э. В., Попов Л. Е.** Дислокации, антифазные границы и пластическая деформация упорядоченных сплавов // Изв. вузов. Физика. 1967. № 10. С. 102–111.
17. **Судзуки Т.** Динамика дислокаций и пластичность / Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. М.: Мир, 1989.
18. **Старенченко В. А., Старенченко С. В., Колупаева С. Н., Пантюхова О. Д.** Генерация точечных дефектов в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // Изв. вузов. Физика. 2000. № 1. С. 66–70.

Поступила в редакцию 13/VI 2006 г.
