

УДК : 539.37

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО И ТЕРМИЧЕСКОГО УПРОЧНЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ СПЛАВОВ, УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ ПО ТИПУ $L1_2$

Старенченко В. А., Соловьева Ю. В., Пантюхова О. Д.

ТГАСУ, Томск, Россия
star@tsuab.ru

Введение

Современные исследования физики пластичности и прочности твердых тел наряду с дальнейшим развитием аналитических методов исследования, получением более детальных и глубоких сведений об отдельных сторонах явления (в частности большей детализацией механизмов деформации и упрочнения, механизмов генерации и размножения дефектов и тому подобное) требуют деятельности синтетической направленности. Подобное направление исследований возникает с необходимостью при описании систем высокой сложности, поведение которых является результатом связанного и согласованного проявления механизмов различного физического содержания.

Наиболее эффективным способом синтетического описания систем высокой сложности является математическое моделирование, позволяющее решать ряд проблем этого класса. Предполагая описание изучаемых процессов на языке математики, математическое моделирование ставит своей целью, прежде всего, создание математических моделей, выраженных в форме дифференциальных (либо иных) систем уравнений, имитирующих поведение реального объекта. Математическая модель несет разнообразную нагрузку. Имея в основе своей прогностическую цель, она может быть использована и как инструмент исследования целостного явления высокой сложности, обеспечивая возможность машинной (ЭВМ) реализации и работы в диалоговом режиме. Зачастую математическое моделирование оказывается единственной возможностью получения качественных и количественных оценок влияния параметров процесса деформации на свойства деформируемого твердого тела.

Предложенная работа посвящена построению и исследованию математической модели деформационного и термического упрочнения монокристаллов сплавов со сверхструктурой $L1_2$. Мы исходили из представлений о структуре дефектов, законов их взаимодействия, рождения и релаксации, микромеханизмов движения и тому подобное, которые были получены как из теоретических соображений, так и из непосредственных экспериментальных наблюдений. В идеале, при построении структурной математической модели вид зависимостей, прямых и обратных связей, определяемых микромеханизмами, следует получить из рассмотрения конкретной кристаллической структуры, физики образования дефектов, микромеханики их взаимодействия и движения. Во многих случаях это – все еще нерешенные проблемы, имеющие принципиальные и технические трудности, преодоление которых не предвидится в обозримом будущем. Это заставило нас при построении модели в ряде случаев использовать эмпирические соотношения и константы, либо функциональные зависимости гипотетического характера.

В основу предлагаемого математического моделирования положена концепция упрочнения и отдыха, впервые предложенная Большаниной, Орованом и Поповым,

развитие которой привело к современной формулировке, которая в самом общем виде может быть представлена следующим образом.

Интенсивность размножения любого продукта деформации (будь это плотность дефектов i -го типа, выделяемое в процессе деформации тепло, либо величина самой пластической деформации) является следствием суперпозиции процессов генерации, (рождения, производства и размножения продуктов деформации) и релаксации (гибели, аннигиляции и трансформации), что в матричном виде может быть записано как:

$$\begin{cases} \hat{X} = \hat{G}(X, y, t) + \hat{R}(X, y, t), \\ \hat{y}(X, y, t) = 0 \end{cases}, \quad (1)$$

где \hat{X} – матрица, описывающая набор продуктов деформации, \hat{G} – матрица генерации, \hat{R} – матрица релаксации продуктов деформации, \hat{y} – матрица, описывающая условия, в которых осуществляется пластическая деформация (в большинстве простейших случаев она описывает условия эксперимента, задаваемые экспериментатором). Задача моделирования в такой постановке сводится к нахождению явного вида функциональных матриц \hat{X} , \hat{G} , \hat{y} из рассмотрения физики, механики и динамики микропроцессов, осуществляющих деформацию.

1. О природе термического упрочнения сплавов со сверхструктурой L1₂

Закономерности, полученные при исследовании механических свойств и дислокационной структуры монокристаллов Ni₃Ge разной ориентации позволяют нам сделать определенные выводы и предположения о механизмах термического упрочнения в сплавах со сверхструктурой L1₂ [1].

Прежде всего, это касается механизма Кира-Вильсдорф, который традиционно считается основным, а чаще всего и единственным механизмом термического упрочнения. Существующие к настоящему времени экспериментальные данные требуют критического взгляда на этот механизм. Это касается, в первую очередь, невозможности понять эволюцию дислокационной структуры в высокотемпературной области термического упрочнения, где имеют место наиболее сильные эффекты аномалии и в то же время прямолинейные дислокационные конфигурации, характерные для барьеров Кира-Вильсдорф оказываются вытесненными искривленными дислокациями; в некоторых случаях в области максимума температурной аномалии доля прямолинейных дислокаций не превышает 5%. Это заставляет нас относиться критично к определяющей роли механизма Кира-Вильсдорф в высокотемпературной области. В то же время низкотемпературная область термического упрочнения, а также область средних температур, где диффузионные процессы еще не развиты, дают свидетельства о наличии эффектов, связанных с образованием барьеров Кира-Вильсдорф. Здесь имеет место возрастание плотности прямолинейных дислокаций и аномальное изменение параметра междислокационного взаимодействия [2]; интенсивность накопления дислокаций может определяться процессом образования барьеров Кира-Вильсдорф.

Для понимания эволюции дислокационной структуры в высокотемпературной области необходимо учитывать воздействие температуры, как фактора, активирующего процессы диффузии и самодиффузии, а, следовательно, и процессы взаимодействия точечных дефектов с дислокациями. Только с привлечением процессов переползания дислокаций краевой ориентации, как процессов диффузионной самоблокировки сверхдислокаций, могут быть поняты такие факты, как отсутствие прямолинейных дислокаций в области высокотемпературного пика аномалии, малая подвижность краевых дис-

локаций в условиях кубического скольжения, наличие аномальной зависимости напряжений течения и интенсивности накопления дислокаций в условиях кубического скольжения в области высоких температур.

Экспериментальные закономерности позволяют предположить, что термическое упрочнение определяется, по крайней мере, механизмами двух классов – механизмами, связанными с поперечным скольжением сверхдислокаций винтовой ориентации, которые, в конечном счете, являются следствием изменения структуры сверхдислокационного ядра под воздействием температуры, и механизмами, связанными с переползанием краевых сверхдислокаций, вследствие их взаимодействия с точечными дефектами разного типа [3].

Это не означает, что механизмы других классов, например таких как восстановление дальнего порядка, релаксация антифазных границ, образование атмосфер и тому подобное, не имеют места в термическом упрочнении. Однако, большинство особенностей эволюции дислокационных структур может быть понято в предположении существования механизмов двух классов, в разной степени проявляющихся в различных интервалах температур.

Рассмотрим возможные механизмы деформационного и термического упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$ и экспериментальные факты, которые должны быть объяснены с позиций этих механизмов. Они могут быть разделены на два класса: диффузионные и бездиффузионные механизмы. К бездиффузионным механизмам можно отнести: 1) механизм Кира-Вильсдорф [5, 6, 7, 8], 2) изменение спектра междислокационных взаимодействий, 3) механизмы, связанные с увеличением общей площади антифазных границ в процессе деформации: генерация трубок антифазных границ, перерезание антифазных границ, увеличение плотности сверхдислокаций, 4) неопределенность дислокационной оси [9], 5) термоактивируемое движение сверхдислокаций в кубе [5], 6) изменение структуры ядра, движущейся с релятивистскими скоростями [10], 7) температурная зависимость модуля сдвига $G(T)$, 8) образование элементарных порогов на сверхдислокациях [11, 12], 9) деформационное разрушение дальнего порядка [13].

К диффузионным: 1) переползание, 2) образование атмосфер на сверхдислокациях, 3) релаксация дальнего порядка на антифазных границах, 4) восстановление среднего по кристаллу дальнего порядка, 5) неконсервативное волочение порогов, 6) захват точечных дефектов в плоскости скольжения.

Ниже предложена математическая модель термического и деформационного упрочнения, построенная в концепции упрочнения и отдыха, в которой учтены большинство из перечисленных механизмов.

2. Модель термического и деформационного упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$

Проведенные в последние годы рентгеноструктурные исследования этого явления [14-16] выявили ряд особенностей поведения упорядоченных материалов под нагрузкой. Было установлено [14-16], что в сплавах с дальним атомным порядком пластическая деформация вызывает фазовый переход порядок-беспорядок, который протекает по гетерогенному механизму. В деформируемом материале уже при малых степенях деформации образуется разупорядоченная фаза. Ее объемная доля увеличивается с ростом степени деформации. Согласно экспериментальной схеме деформационного разрушения дальнего атомного порядка в сплавах, обладающих различными сверхструктурами ($L1_2$, $L1_2(M)$ и $L1_2(MM)$) [15], частично разупорядоченный пластической деформацией сплав представляет собой совокупность локальных областей, находящихся в упорядоченном и разупорядоченном состоянии. Для разупорядоченных областей ха-

рактены высокие напряжения и сдвиги, обусловленные неоднородным протеканием пластической деформации. Именно в этих областях вследствие высокой концентрации деформационных дефектов (антифазных границ, дислокаций, точечных дефектов, дефектов упаковки и др.) происходило понижение параметра дальнего порядка до критического значения, а затем – резкое падение, и далее – слабое его изменение с деформацией [15]. Одним из возможных объяснений такого поведения параметра дальнего порядка в областях локализации пластической деформации служит активация в этих областях процесса движения одиночных дислокаций [17]. Можно полагать, что сплавы с дальним атомным порядком деформируются как двухфазные, состоящие из упорядоченной и разупорядоченной фаз. Пластическая деформация в них осуществляется посредством движения сверхструктурных и одиночных дислокаций, соответственно. Поскольку структура дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию в упорядоченной и разупорядоченной фазах различна, следует ожидать, что и кинетика накопления деформационных дефектов и разрушения дальнего атомного порядка в этих фазах также будет различна. Кроме того, поскольку уже при малых средних деформациях присутствуют локальные области, в которых носителем сдвига оказываются одиночные дислокации, следует также ожидать, что в деформируемом материале с дальним атомным порядком с начала пластической деформации будут одновременно действовать механизмы, свойственные упорядоченному и разупорядоченному состояниям. Вследствие этого можно полагать, что достигаемые при данных степенях деформации значения плотности дислокаций, концентрации точечных дефектов, параметра дальнего порядка, деформирующего напряжения окажутся равными эффективными значениям, зависящим от долей упорядоченной и разупорядоченной фаз.

Сделанные предположения положены в основу математической модели кинетики деформационного разупорядочения [17], которая сформулирована на базе феноменологической модели термического и деформационного упрочнения в сплавах и интерметаллидах, обладающих сверхструктурой $L1_2$ [18]. Структура, предлагаемой нами модели, имеет вид [17]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\rho}{d\varepsilon} &= \frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon} C^* + \frac{d\rho_I}{d\varepsilon} (1 - C^*), \\ \frac{dC_i}{d\varepsilon} &= \frac{dC_{iII}}{d\varepsilon} C^* + \frac{dC_{iI}}{d\varepsilon} (1 - C^*), \\ \frac{dC_v}{d\varepsilon} &= \frac{dC_{vII}}{d\varepsilon} C^* + \frac{dC_{vI}}{d\varepsilon} (1 - C^*), \\ \frac{d\eta_0}{d\varepsilon} &= -\eta_0 \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_i / kT) C_i C_v, \\ \frac{d\eta}{d\varepsilon} &= \frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} C^* + \frac{d\eta_I}{d\varepsilon} (1 - C^*) + J(\eta), \\ \tau &= \tau_{II} C^* + \tau_I (1 - C^*). \end{aligned} \right\} (2)$$

Локализация пластической деформации, обуславливающая возникновение и сохранение до значительных степеней деформации двухфазности в упорядоченном материале, учтена в модели посредством введения долей упорядоченной $C^*(\varepsilon)$ и разупорядоченной $(1 - C^*(\varepsilon))$ фаз. Зависимость доли разупорядоченной фазы от степени деформации, может быть учтена из следующих соображений. В общем случае упорядоченное состояние материала характеризуется эффективным параметром дальнего порядка η , обусловленным сосуществованием упорядоченной и разупорядоченной фаз. Его величина определяется как степенью упорядоченности фазы с дальним порядком η_0 , так и

объёмной долей C^* этой фазы в сплаве. Действительно, эффективный параметр дальнего порядка определяется: $\eta^2 = I_{cc}/(I_{осн} + I_{раз})$, где $I_{осн}$ и $I_{раз}$ – интенсивности основных рефлексов упорядоченной и рефлексов разупорядоченной фаз, соответственно, с учетом необходимых поправок. Параметр дальнего порядка упорядоченной фазы $\eta^2 = I_{cc}/I_{осн}$. Тогда $\eta^2 = I_{cc}/(I_{осн}(1 + \frac{I_{раз}}{I_{осн}}))$, поскольку интенсивности рефлексов пропорциональны объёмной доле фаз, выражение для η^2 может быть записано в следующем виде $\eta^2 = \eta_*^2 / (1 + \frac{I_{раз}}{I_{осн}})$, следовательно, $\eta^2 = C^* \eta_*^2$. Учитывая, что разупорядоченная фаза сконцентрирована в областях локализации деформационного процесса, можно полагать, что материал, не охваченный деформацией, остаётся практически совершенно упорядоченным, здесь $\eta_* = 1$. Тогда доля упорядоченной фазы в деформируемом материале $C^* = \eta^2$.

Как показывают экспериментальные результаты, восстановление дальнего порядка происходит путем возникновения хорошо упорядоченных зародышей и их последующего роста [19, 20]. При этом величина степени дальнего порядка внутри зародышей может лежать в пределах от 0.66 до 1.00 в зависимости от упорядочивающегося материала [19, 20]. В этом случае эффективный параметр дальнего порядка η также обусловлен сосуществованием упорядоченной и разупорядоченной фаз, а его величина зависит от степени порядка упорядоченной фазы η_* и доли этой фазы C^* в сплаве: $\eta^2 = C^* \eta_*^2$. В первом приближении можно полагать, что как в процессе деформационного разрушения дальнего порядка, так и в процессе его диффузионного восстановления доля упорядоченной фазы будет определяться соотношением:

$$C^*(\epsilon) = \eta^2. \tag{3}$$

При таком выборе зависимости $C^*(\epsilon)$ вклады от механизмов упорядоченного и разупорядоченного состояний оказываются прямо пропорциональными квадрату параметра дальнего порядка. В модели (2) индексами "II" и "I" обозначены вклады от механизмов, связанных с движением сверхструктурных (упорядоченное состояние) и одиночных (разупорядоченное состояние) дислокаций, соответственно. Накопление деформационных дефектов (дислокаций, межузельных атомов и вакансий) и изменение параметра дальнего порядка в данной модели (2) определяются для упорядоченной и разупорядоченной фаз своими уравнениями, учитывающими механизмы, характерные для соответствующих состояний деформируемого сплава [17]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\rho_{II}}{d\epsilon} &= C_I \frac{(\alpha_2 G b)^2 \rho}{\tau_{II}} + \frac{C_2 e^{-U_1/kT} + C_3 e^{-U_2/kT}}{G b \rho^{1/2}} - \\ &- \frac{1}{\epsilon} \min(r_{os}, [\theta \rho]^{-1/2}) \frac{a_1^3 D_0}{\chi k T b} \left(\exp\left[\frac{-E_c}{kT}\right] C_I + \exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right] C_v \right) \tau_{II} \rho^2 \theta^2, \\ \frac{dC_{II}}{d\epsilon} &= \frac{1}{\kappa(\zeta)} p_I \xi B \frac{\tau_{II}}{G} - \frac{1}{\epsilon} \frac{a_1^3 D_0}{\chi k T} \exp\left[\frac{-E_c}{kT}\right] C_I \tau_{II} \rho \theta - \frac{1}{\epsilon} \mu_r D_0 \exp\left[\frac{-E_c}{kT}\right] C_I C_v, \\ \frac{dC_{vII}}{d\epsilon} &= \frac{1}{\kappa(\zeta)} p_I \xi B \frac{\tau_{II}}{G} - \frac{1}{\epsilon} \frac{a_1^3 D_0}{\chi k T} \exp\left[\frac{-E_c}{kT}\right] C_v \tau_{II} \rho \theta - \frac{1}{\epsilon} \mu_r D_0 \exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right] C_I C_v, \\ \frac{d\eta_*}{d\epsilon} &= -\eta_* \frac{1}{\epsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_c/kT) C_I C_v, \end{aligned} \right\} \tag{4}$$

$$\frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} = \frac{-\frac{1}{2}\eta_*^2(1-k_0^2)\delta}{1-\eta_*^2(1-k_0^2)\delta\rho\frac{Gb^2}{2\pi\zeta_0\eta_*^4}} \left\{ \frac{t}{d_0} \exp\left(t\frac{\varepsilon}{\omega}\right) + \frac{\delta't}{2\Gamma b} \left[4b + \frac{Gb^2}{\pi\zeta_0\eta_*^4} \right] \rho^{1/2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_i^3 D_0 \theta}{\chi k T b} \left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] C_i + \exp\left[\frac{-E_r}{kT}\right] C_r \right) \cdot \tau_{II} \rho + \frac{Gb^2}{2\pi\zeta_0\eta_*^2} \frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon} \right\}, \quad (4)$$

$$\tau_{II} = \tau_f^0 + \gamma_1 \tau_0^{(1)} \exp\left[\frac{-U_1}{kT}\right] + \gamma_2 \tau_0^{(2)} \exp\left[\frac{-U_2}{kT}\right] + \alpha_2 G b \rho^{1/2}.$$

$$\frac{d\rho_I}{d\varepsilon} = C_1 \frac{(\alpha_1 G b)^2 \rho}{\tau_i} - \frac{1}{\varepsilon} \min(r_a^*, [\theta\rho]^{-1/2}) \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T b} \left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] C_i + \exp\left[\frac{-E_r}{kT}\right] C_r \right) \tau_i \rho^2 \theta^2, \\ \frac{dC_{Ii}}{d\varepsilon} = \frac{t}{\kappa(\zeta)} p_j \xi_B \frac{\tau_i}{G} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T} \exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] C_i \tau_i \rho \theta - \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] C_i C_v, \\ \frac{dC_{Vr}}{d\varepsilon} = \frac{t}{\kappa(\zeta)} p_j \xi_B \frac{\tau_r}{G} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T} \exp\left[\frac{-E_r}{kT}\right] C_r \tau_r \rho \theta - \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] C_i C_v, \quad (5)$$

$$\frac{d\eta_*}{d\varepsilon} = -\eta_* \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_i/kT) C_i C_v, \\ \frac{d\eta_I}{d\varepsilon} = -\frac{1}{2}\eta_*^2(1-k_0^2)\delta \left\{ \frac{1}{d_0} \exp\left(t\frac{\varepsilon}{\omega}\right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_i^3 D_0 \theta}{\chi k T b} \left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] C_i + \exp\left[\frac{-E_r}{kT}\right] C_r \right) \cdot \tau_I \rho + \frac{1}{b} \right\}, \\ \tau_I = \tau_f^0 + \frac{\zeta_0 \eta_*^2}{b} + \alpha_1 G b \rho^{1/2}.$$

Смысл параметров, входящих в (4), (5), подробно изложен в работах [4, 17, 18, 3, 21].

Первое уравнение системы (2) определяет изменение плотности дислокаций в процессе пластической деформации. Здесь учтены генерация и накопление сдвигообразующих дислокаций, их аннигиляция, протекающая в ходе формирования зоны сдвига вследствие перespoлзания краевых компонент при осаждении на их экстраплоскостях деформационных точечных дефектов (вакансий, и межузельных атомов) [20]. В случае, когда пластическая деформация осуществляется посредством движения сверхструктурных дислокаций, происходит дополнительное увеличение их плотности: в областях с высоким параметром дальнего порядка помимо сдвигообразующих дислокаций, образуются внутризонные дислокационные барьеры, представляющие собой неподвижные дипольные конфигурации, оставленные сдвигообразующими дислокациями в зоне сдвига [18, 3]. Внутризонные дислокационные барьеры разделяются на два типа [3]: барьеры Кира-Вильсдорф и диффузионные барьеры.

Особенности накопления сверхструктурных дислокаций учтены в уравнении $d\rho_{II}/d\varepsilon$ [18, 3] модели (2). Независимо от типа сдвигообразующих дислокаций (сверхструктурные или одиночные) модель (2) учитывает аннигиляцию только их краевых

компонент. Это связано с тем, что в упорядоченных сплавах затруднено поперечное скольжение винтовых дислокаций, так как оно требует дополнительной генерации антифазных границ и приводит к образованию барьеров Кира-Вильсдорф. [18, 3]. В случае движения одиночных дислокаций, в силу их структуры, образование барьеров, характерных для упорядоченных со сверхструктурой $L1_2$ сплавов, не происходит. Учет аннигиляции только краевых компонент является в этом случае достаточно грубым приближением, занижающим интенсивность аннигиляции дислокаций в разупорядоченной фазе.

Второе и третье уравнения системы (2) описывают накопление точечных дефектов соответственно межузельных атомов и вакансий в процессе пластической деформации. Механизмы их генерации и аннигиляции малочувствительны к тонкой структуре дислокаций и поэтому, в рамках модели (2), качественно аналогичны для упорядоченного (где деформация осуществляется сверхдислокациями) и разупорядоченного (где деформация осуществляется одиночными дислокациями) состояний деформируемого материала. В модели (2) полагается, что точечные дефекты генерируются вследствие неконсервативного волочения порогов дислокациями винтовой или близкой к ней ориентации. Подвижность порогов, возникающих на винтовых дислокациях, определяется балансом сил, действующих на порог: составляющей силы линейного натяжения сверхдислокации, направленной вдоль вектора Бюргерса, и силы поверхностного натяжения антифазной границы; а интенсивность генерации деформационных точечных дефектов – долей порогов, способных их генерировать [21]. Следует отметить, что записанная из таких соображений интенсивность генерации точечных дефектов в процессе пластической деформации не зависит от режима движения сдвигообразующих дислокаций (квазистатического или динамического).

Аннигиляция деформационных точечных дефектов в рамках модели (2) обусловлена их осаждением на краевых дислокациях [20] и их взаимной аннигиляцией [17].

Четвертое уравнение системы (2) характеризует изменение с ростом степени деформации эффективного параметра дальнего порядка $\eta = \eta(S^*, \eta_0)$, определяемого методом рентгеновской дифрактометрии (S^* – общая площадь антифазных границ в единице объема кристалла, η_0 – параметр дальнего порядка внутри антифазных доменов) [17].

Атомное упорядочение, протекающее во всем объеме деформируемого сплава, учтено в модели (2) посредством слагаемого $J(\eta)$ уравнения $d\eta/d\epsilon$, которое представляет собой кинетику восстановления дальнего атомного порядка на основе миграции к дислокациям неравновесных деформационных вакансий [22] и имеет вид (1). В зависимости от типа сдвигообразующих дислокаций в уравнении $d\eta/d\epsilon$ системы (2) учтены следующие механизмы деформационного разрушения дальнего атомного порядка, обусловленные накоплением АФГ и точечных дефектов. В случае движения и накопления сверхдислокаций: 1) накопление АФГ вследствие накопления сверхструктурных дислокаций, 2) размножение АФГ при консервативном движении сверхструктурных дислокаций, 3) генерация трубок АФГ, 4) накопление АФГ вследствие переползания краевых сверхструктурных дислокаций, 5) разрушение дальнего атомного порядка вследствие взаимной аннигиляции точечных дефектов. В случае движения одиночных дислокаций: 1) накопление АФГ вследствие накопления одиночных дислокаций, 2) размножение АФГ при консервативном движении одиночных дислокаций, 3) накопление АФГ вследствие переползания краевых одиночных дислокаций, 4) разрушение дальнего атомного порядка вследствие взаимной аннигиляции точечных дефектов.

Интенсивность изменения с общей площади АФГ в обоих случаях записана в приближении линейного суммирования. Оценки интенсивностей размножения АФГ для соответствующих деформационных механизмов являются максимальными [17].

Уравнение $d\eta_s/d\varepsilon$ системы (2) описывает изменение параметра дальнего порядка, характеризующего степень упорядоченности антифазных доменов. Мы полагаем, что понижение η_s с ростом степени деформации ε обусловлено взаимной аннигиляцией деформационных точечных дефектов.

Таким образом, уравнение $d\eta/d\varepsilon$, характеризующее изменение параметра дальнего порядка в целом по образцу, определяется степенью упорядоченности антифазных доменов и интенсивностью накопления площади АФГ, которая задается в общем случае уравнениями баланса АФГ, записанными для случаев: движения сверхструктурных и одиночных дислокаций.

Последнее соотношение системы (2) представляет собой деформирующее напряжение.

Спротивление движению сверхструктурных дислокаций τ_{II} принято в виде [2]:

$$\tau_{II} = \tau_f^0 + \tau_f + \alpha_2 G b \rho^{1/2}. \quad (6)$$

Здесь τ_f^0 – сопротивление движению дислокаций вследствие преодоления стопоров недислокационной природы (преодоление скользящими дислокациями барьеров Пайерлса, и взаимодействие дислокаций с примесными атомами, границами антифазных доменов, с деформационными АФГ, разрушение ближнего и дальнего атомного порядка и т. п.). τ_f – сопротивление движению сверхдислокаций вследствие их термоактивируемого самоторможения. $\alpha_2 G b \rho^{1/2}$ – сопротивление движению дислокаций, обусловленное их взаимодействием с дислокациями леса, α_2 – параметр, характеризующий интенсивность взаимодействия сверхструктурных сдвигообразующих дислокаций с дислокациями леса. В работе [4] показано, что для сплавов со сверхструктурой $L1_2$ величины τ_f и α_2 могут быть представлены в виде:

$$\tau_f = \gamma_1 \tau_0^{(1)} \exp\left[\frac{-U_1}{kT}\right] + \gamma_2 \tau_0^{(2)} \exp\left[\frac{-U_2}{kT}\right], \quad (7)$$

$$\alpha = \alpha_0 - \beta T, \quad (8)$$

где γ_1, γ_2 – весовые коэффициенты (для равномерно расширяющейся прямоугольной дислокационной петли $\gamma_1 = \gamma_2 = 1/2$), $\tau_0^{(1)}, \tau_0^{(2)}$ – предэкспоненциальные множители независимые от температуры, U_1, U_2 – энергии активации самоблокировки винтовых и краевых компонент сверхдислокационных петель, α_0, β – константы, определяющие зависимости $\alpha(T)$, для конкретного $L1_2$ сплава получаемые экспериментально [4].

Спротивление движению одиночных дислокаций обусловлено, так же как и в случае сверхдислокаций, во-первых, преодолением стопоров недислокационной природы τ_f^0 , во-вторых, междислокационным взаимодействием $\alpha_1 G b \rho^{1/2}$, α_1 – параметр, характеризующий интенсивность взаимодействия одиночных сдвигообразующих дислокаций с дислокациями леса. Кроме того, как уже отмечалось ранее, одиночные сдвигообразующие дислокации испытывают дополнительное сопротивление движению со стороны АФГ $\zeta_0 \eta^2/b$. Таким образом, для одиночных дислокаций, накапливаемых в кристалле при пластической деформации, сопротивление их движению τ_I принято в виде [18]:

$$\tau_I = \tau_f^0 + \frac{\zeta_0 \eta^2}{b} + \alpha_1 G b \rho^{1/2}, \quad (9)$$

где $\eta_I = 0,1$ – параметр дальнего порядка в разупорядоченной фазе.

Математическая модель (2) в зависимости от начального условия для параметра дальнего порядка описывает пластическое поведение: монокристаллов упорядоченных по типу $L1_2$ сплавов или монокристаллов твердых растворов с промежуточным состоянием порядка, в том числе и разупорядоченного. Различие в механизмах пластической деформации для упорядоченного и разупорядоченного состояний деформируемого материала учитываются различием в параметрах модели. Атомное упорядочение учитывается как в области низких и умеренных, так и высоких температур деформирования, различие состоит в разных интенсивности его протекания в этих температурных областях.

3. Результаты расчетов

Сплавы, относящиеся к классу сплавов со сверхструктурой $L1_2$, разделяются на две группы. Это интерметаллиды, обладающие высокой энергией АФГ и существующие только в упорядоченном состоянии (разрушение дальнего атомного порядка в них происходит одновременно с разрушением кристаллического состояния при температуре плавления), и упорядочивающиеся твердые растворы, обладающие низкой энергией АФГ и существующие при определенных условиях в частично упорядоченном состоянии. Предлагаемая нами модель (2) может применяться для описания упорядоченных по типу $L1_2$ сплавов, сплавов с промежуточным состоянием порядка, а также разупорядоченных сплавов. Она позволяет получить для сплавов с высокой и низкой энергией АФГ расчетные зависимости плотности дислокаций $\rho(\epsilon)$, концентраций точечных дефектов (межузельных атомов $C_1(\epsilon)$ и вакансий $C_2(\epsilon)$), параметра дальнего порядка $\eta(\epsilon)$ от степени деформации. Могут быть рассчитаны также и кривые деформационного упрочнения $\tau(\epsilon)$. Такая информация необходима для понимания природы пластической деформации рассматриваемых материалов, объяснения закономерностей, экспериментально наблюдаемых на отдельных конкретных сплавах, а также для обобщения этих закономерностей на класс упорядоченных и упорядочивающихся в процессе деформирования сплавов со сверхструктурой $L1_2$.

В рамках модели (2) проведены расчеты перечисленных выше зависимостей для монокристаллов сплавов с высокой и низкой энергией АФГ, в упорядоченном состоянии ($\eta(0) = 1$, $\eta_+(0) = 1$). Для сплавов с низкой энергией АФГ соответствующие зависимости $\eta(\epsilon)$, $\tau(\epsilon)$, $C_1(\epsilon)$, $C_2(\epsilon)$, $\rho(\epsilon)$ получены для разупорядоченного состояния и состояний с промежуточными степенями порядка. Мы полагали, что в разупорядоченном состоянии $\eta(0) = 0,1$, $\eta_+(0) = 0,1$. Для промежуточных состояний порядка были приняты значения $\eta(0) = 0,5$, и $\eta_+(0) = 0,3$. Расчеты проведены для широкого спектра температур деформирования: от 77 до 773 К, с использованием параметров для случая сплавов с высокой энергией АФГ – характерных для сплава Ni_3Ge [4, 18, 3], для случая сплавов с низкой энергией АФГ – характерных для сплава Ni_3Fe [18]. Представлено сопоставление расчетных кривых и экспериментальных данных. Начальные условия, необходимые для решения системы уравнений (2) были приняты равными: $\rho(0) = 10^{10} \text{ м}^{-2}$, $C_1(0) = \exp(-E_1^0/kT)$, $C_2(0) = \exp(-E_2^0/kT)$, где $E_1^0 = 1,6 \text{ эВ}$ и $E_2^0 = 4,8 \text{ эВ}$ – энергии образования междуузельного атома и вакансии соответственно.

4. Кривые деформационного упрочнения и разрушения дальнего атомного порядка

Деформируемый кристалл, обладающий сверхструктурой, является сложной системой, в которой пластическая деформация активизирует ряд процессов, богатых разнообразием проявления своих механизмов. К таким процессам, прежде всего, следует от-

нести процессы деформационного разрушения и восстановления дальнего атомного порядка. Одновременное их протекание в материалах, подвергнутых деформированию, а следовательно, и их конкуренция на протяжении всего времени испытания, сказывается на зависимостях $\eta(\epsilon)$, отражающих характер изменения параметра дальнего порядка с ростом степени деформации. Качественные закономерности этих зависимостей сохраняются (рис. 1, а - 4, а) как для хорошо упорядоченного - $\eta(0) = 1$ (рис. 1), так и для разупорядоченного - $\eta(0) = 0,1$ (рис. 4) состояний, а также для состояний с промежуточной степенью порядка - $\eta(0) = 0,5$ (рис. 2) и $\eta(0) = 0,3$ (рис. 3). Кривые $\eta(\epsilon)$ в разных температурных областях имеют различный вид, который указывает на то, какой из механизмов - разрушение дальнего порядка или его восстановление - оказывается доминирующим (рис. 1, а - 4, а).

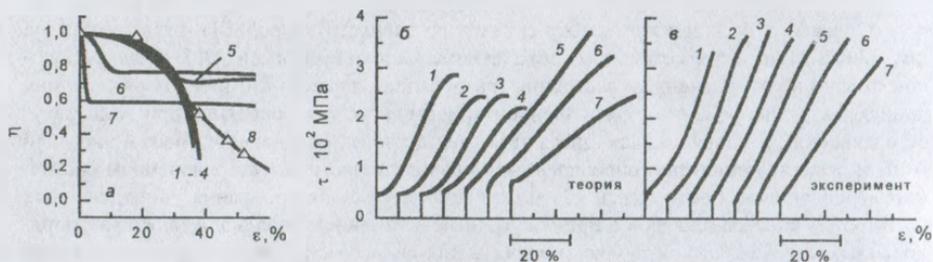


Рис. 1. Зависимости параметра дальнего порядка от степени деформации - а, кривые деформационного упрочнения - б, в (б - модельные расчеты, в - экспериментальные данные [23]) для упорядоченных ($\eta(0) = 1$) по типу $L1_2$ сплавов с низкой энергией АФГ, полученные при различных температурах деформирования, К: кр. 1 - 77, кр. 2 - 293, кр. 3 - 383, кр. 4 - 483, кр. 5 - 573, кр. 6 - 673, кр. 7 - 773.

Кр. 8 на рис. 1, а соответствует экспериментальным измерениям для монокристалла сплава Ni_3Fe , полученным при комнатной температуре рентгеноструктурными исследованиями в работе [14].

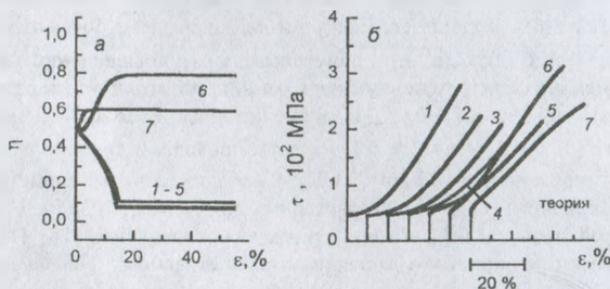


Рис. 2. Зависимости параметра дальнего порядка от степени деформации - а, кривые деформационного упрочнения - б для сплавов с низкой энергией АФГ, обладающих в упорядоченном состоянии сверхструктурой $L1_2$, полученные при начальном значении параметра дальнего порядка $\eta(0) = 0,5$ и различных температурах деформирования, К: кр. 1 - 77, кр. 2 - 293, кр. 3 - 383, кр. 4 - 483, кр. 5 - 573, кр. 6 - 673, кр. 7 - 773.

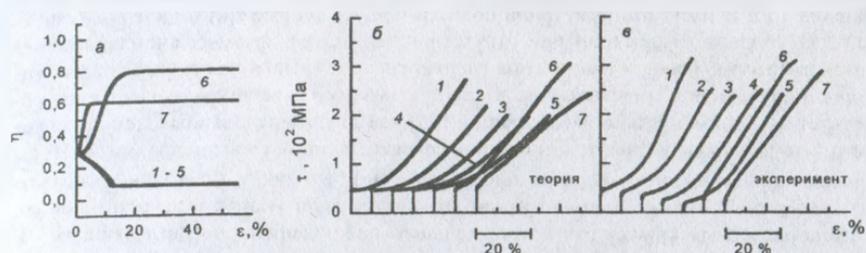


Рис. 3. Зависимости параметра дальнего порядка от степени деформации – *а*, кривые деформационного упрочнения – *б, в* (*б* – модельные расчеты, *в* – экспериментальные данные [23]) для сплавов с низкой энергией АФГ, обладающих в упорядоченном состоянии сверхструктурой $L1_2$, полученные при начальном значении параметра дальнего порядка $\eta(0) = 0,3$ и различных температурах деформирования, К: кр. 1 – 77, кр. 2 – 293, кр. 3 – 383, кр. 4 – 483, кр. 5 – 573, кр. 6 – 673, кр. 7 – 773.

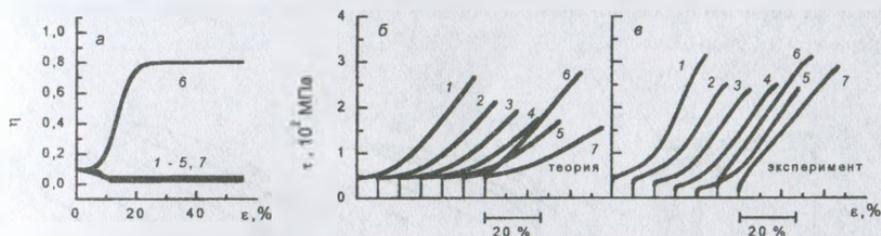


Рис. 4. Зависимости параметра дальнего порядка от степени деформации – *а*, кривые деформационного упрочнения – *б, в* (*б* – модельные расчеты, *в* – экспериментальные данные [23]) для сплавов с низкой энергией АФГ, обладающих в упорядоченном состоянии сверхструктурой $L1_2$, полученные при начальном значении параметра дальнего порядка $\eta = 0,1$ и различных температурах деформирования, К: кр. 1 – 77, кр. 2 – 293, кр. 3 – 383, кр. 4 – 483, кр. 5 – 573, кр. 6 – 673, кр. 7 – 773.

При низких и умеренных температурах наблюдается понижение параметра дальнего порядка – доминируют механизмы разрушения порядка, способствуя установлению в деформируемом сплаве состояния, близкому к состоянию с ближним атомным порядком ($\eta < 0,1$). В области повышенных температур (673, 773 К) доминирующим оказывается процесс восстановления дальнего атомного порядка. На начальных стадиях деформирования происходит возрастание η до значений соответствующих равновесию процессов (процесса разрушения, и процесса восстановления дальнего атомного порядка). При этом следует отметить, что равновесное значение параметра дальнего порядка немонотонно изменяется с температурой и оказывается большим для 673 К, чем для 773 К.

Это связано с тем, что роль интенсивности генерации и накопления дислокаций, определяющей разрушение порядка, возрастает с повышением температуры быстрее, чем роль интенсивности генерации и накопления точечных дефектов, определяющих процесс упорядочения. Наличие в деформируемом материале процессов разрушения и

восстановления дальнего атомного порядка сказывается и на кривых деформационного упрочнения $\tau(\epsilon)$. В низкотемпературной области (77 К) кривые $\tau(\epsilon)$ имеют вид, характерный для кривых деформации при отсутствии термоактивируемых аномальных механизмов самоторможения и накопления сверхдислокаций. Вогнутая форма кривых упрочнения, получаемая в модельных расчетах при низких температурах качественно соответствует экспериментально наблюдаемой [23] как для упорядоченных, так и для разупорядоченных сплавов (рис. 1, б, в и 4, б, в соответственно). Повышение температуры деформирования приводит к спрямлению кривых $\tau(\epsilon)$, что также качественно соответствует экспериментальным данным. Кроме этого следует отметить и качественное соответствие расчетных кривых экспериментальным наблюдениям, представляющим изменения кривых деформационного упрочнения для различных температур при переходе от упорядоченного к разупорядоченному состояниям сплава (рис. 1, б, в – 4, б, в). Наибольшее соответствие между экспериментально наблюдаемыми изменениями кривых деформационного упрочнения и теоретическими для закаленного выше температуры фазового перехода сплава имеет место в случае расчетов, проведенных для исходного состояния порядка $\eta(0) = 0,3$ (рис. 3, б, в). Полученный результат может свидетельствовать о том, что до момента начала деформирования, проводимого при высокой температуре, вследствие длительного разогрева образца до температуры деформирования (время разогрева со составляет, как правило, 1,5 – 2 часа), в монокристалле устанавливался невысокий дальний атомный порядок ($\eta < 0,3$), обусловленный процессами температурного упорядочения.

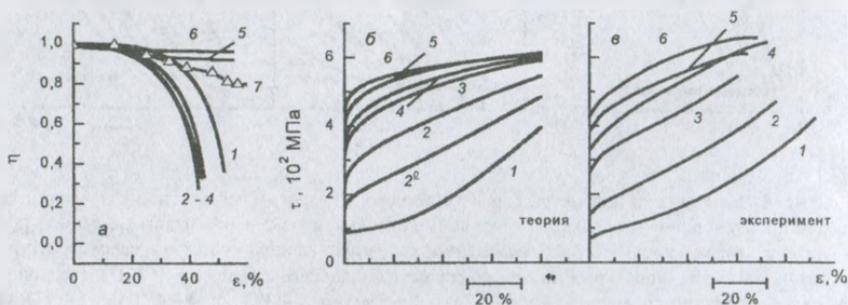


Рис. 5. Зависимости параметра дальнего порядка от степени деформации – а, кривые деформационного упрочнения – б, в (б – модельные расчеты, в – экспериментальные данные [3]) для упорядоченных ($\eta(0) = 1$) по типу $L1_2$ сплавов с высокой энергией АФГ, полученные при различных температурах деформирования, К: кр. 1 – 77, кр. 2^в – 190, кр. 2 – 293, кр. 3 – 423, кр. 4 – 473, кр. 5 – 573, кр. 6 – 673.

Кр. 7 на рис. 2, а соответствует экспериментальным измерениям для поликристалла сплава Ni_3Al , полученным при комнатной температуре рентгеноструктурными исследованиями в работе [14].

Изложенные выше закономерности, наблюдаемые экспериментально [23] и теоретически, получены при использовании параметров характерных для сплава Ni_3Fe , обладающего в упорядоченном состоянии сверхструктурой $L1_2$ и низкой энергией АФГ (низкой энергией упорядочения). Существенное влияние на изменение с температурой формы кривых деформационного упрочнения оказывает величина энергии упорядоче-

ния сплава. Для сплавов с высокой энергией АФГ при низких температурах, как установлено в работах [2, 23], характерными являются кривые деформации, обращенные кривизной вниз (рис. 5, *в*). Повышение температуры деформирования сопровождается спрямлением этих кривых с дальнейшим возникновением параболичности, обращенной кривизной вверх. Такие же характерные изменения наблюдаются и в наших модельных расчетах (рис. 5, *б*), получаемых при решении системы уравнений (2) с использованием параметров для сплава Ni_3Ge [4], обладающего высокой энергией упорядочения.

На рис. 5, *а* представлено сравнение теоретических и экспериментальных [14] зависимостей параметра дальнего порядка от степени деформации $\eta(\epsilon)$ для сплавов с высокой энергией упорядочения. Можно видеть, также как и в случае сплавов с низкой энергией упорядочения (рис. 1, *а*), удовлетворительное согласие этих зависимостей до деформаций порядка 40 %. При более глубоких деформациях модельные представления не соответствуют экспериментальным закономерностям. Это связано, прежде всего, с тем, что в предлагаемой нами модели (2) не учтены особенности формирования разрушения и восстановления ближнего порядка, который в модели (2) представлен как микродоменная структура с малым эффективным дальним порядком равным $\eta(0) = 0,1$. Такое приближение является весьма грубым и вероятно не может быть принято для адекватного описания состояния сплава с ближним порядком, формирующимся под воздействием пластической деформации. По этой причине модель, (2), в которой разрушение дальнего порядка рассматривается преимущественно как процесс механического перемешивания твердого сплава вследствие движения дислокаций, не может быть распространена на деформации, превышающие 35 – 40 %.

Список литературы

1. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В. Природа термического упрочнения в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // Изв. вузов. Физика. 2002. Т.45. № 3. с.41-51.
2. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В., Абзаев Ю.А., Козлов Э.В., Шпейзман В.В., Николаев В.И., Смирнов Б.И. Эволюция дислокационной структуры при деформации монокристаллов сплава Ni_3Ge разной ориентации. // ФТТ. 1998. т. 40. № 4. с. 672 – 680.
3. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В., Абзаев Ю.А. Накопление дислокаций и термическое упрочнение в сплавах со сверхструктурой $L1_2$. // ФТТ. 1999. т. 41. вып. 3. с. 454 – 460.
4. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В., Абзаев Ю.А., Николаев В.И., Шпейзман В.В., Смирнов Б.И. Ориентационная зависимость термического упрочнения монокристаллов сплава Ni_3Ge . // ФТТ. 1996. т. 38. № 10. с. 3050 – 3058.
5. Гринберг Б.А., Сюткина В.И. Новые методы упрочнения упорядоченных сплавов.-Москва: Металлургия. 1985. 176с.
6. Kear В.Н. Cross-slip, antiphase defects and work hardening in ordered Cu_3Au //Acta Met. 1966. 14 p. 659 – 677.
7. Kear В. Н. Dislocation configurations and work hardening in Cu_3Au crystals // Acta Met. 1964. V12. N5. p. 555 – 569.
8. Kear В. Н., Wilsdorf H.G.B. Dislocation configuration in plastically deformed polycrystalline Cu_3Au alloys // Trans. Metallurg. Soc. AIME.-1962. -V224. -N2. -p.382-386.
9. Попов Л.Е., Козлов Э. В., Терешко И.В. Деформационное упрочнение сплава Ni_3Al // ФММ. 1968. 26. Вып.4. с. 709 – 716.
10. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В., Абзаев Ю.А., Попов Л.Е. Динамика дислокаций и термическое упрочнение в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // Изв. Вузов Физика. 1996. № 2. с. 57 – 61.
11. Попов Л.Е., Козлов Э.В. Механические свойства упорядоченных твердых растворов.-М.:Металлургия. 1970. 216с.
12. L.E. Popov, Yu. Sharkeev, N.A. Koneva, N.A. Enshina Conservative jog slipe on superdislocations and work hardening of ordered alloys // Phys. Stat. Sol.(a). 1976. 32. p. 701 – 708.

13. Старенченко В.А., Пантохова О.Д., Старенченко С. В., Колупаева С.Н. Деформационное разрушение дальнего порядка в $L1_2$ – сплавах, связанное с генерацией сверхдислокаций // Изв. Вузов Физика. 2000. № 12. с. 29-34.
14. Старенченко С.В., Замятина И.П., Старенченко В.А. Деформационное воздействие на состояние дальнего атомного порядка крупнокристаллического Ni_3Al и монокристаллического Ni_3Fe сплавов. // Изв. вузов. Физика (Приложение). 2002. № 8. с. 12 – 19.
15. Старенченко С.В., Замятина И.П., Старенченко В.А., Козлов Э.В. Фазовый переход порядок – беспорядок в сплаве Cu_3Pd , индуцированный пластической деформацией. // Изв. вузов. Физика. 2000. № 8. с. 3 – 9.
16. Старенченко С.В., Сизоненко Н.Р., Старенченко В.А., Козлов Э.В. Деформационное разупорядочение сплава Au_4Zn . // ФММ. 1996. т. 81. вып. 1. с. 84 – 90.
17. Старенченко В.А., Пантохова О.Д., Старенченко С.В. Моделирование процесса деформационного разрушения дальнего порядка в сплавах со сверхструктурой $L1_2$. // ФТТ. 2002/ т. 44. вып. 5. с. 950 – 957.
18. Старенченко В.А., Абзаев Ю.А., Черных Л.Г. Феноменологическая теория термического упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$. // Металлофизика. 1987. т. 2. № 9. с. 22 – 28.
19. Старенченко С.В. Закономерности термического и деформационного фазовых переходов порядок-беспорядок в сплавах со сверхструктурами $L1_2$, $L1_2(M)$, $L1_2(MM)$, $D1_a$: Дисс. ... докт. ф.-м. наук. Томск. 2003. 592 с.
20. Попов Л.Е., Пудан Л.Я., Колупаева С.Н., Кобытнев В.С., Старенченко В.А. Математическое моделирование пластической деформации. – Томск: Изд-во Том. ун-та. 1990. 184 с.
21. Старенченко В.А., Старенченко С.В., Колупаева С.Н., Пантохова О.Д. Генерация точечных дефектов в сплавах со сверхструктурой $L1_2$. // Изв. вузов. Физика. 2000. № 1. с. 66 – 70.
22. Пудан Л.Я., Терентьева И.А., Старенченко В.А., Попов Л.Е. Теоретическое описание атомного упорядочения в процессе деформации сплавов со сверхструктурой $L1_2$. // Изв. вузов. Физика. 1989. № 5. с. 113 – 115.
23. Старенченко В.А. Экспериментальное исследование и математическое моделирование деформационного и термического упрочнения монокристаллов ГЦК чистых металлов и сплавов со сверхструктурой $L1_2$: Автореф. дисс. ... доктора физ.-мат. наук. Томск, 1991. 39 с.

СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ПОТОКА Порошковых Частиц

Зельдович В. И., Коршунов Л. Г., Хомская И. В., Фролова Н. Ю.,
Хейфец А. Э., Ушеренко С. М.

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия,
zeldovich@imp.uran.ru*

При воздействии высокоскоростного потока разогнанных взрывом порошковых частиц на металлическую преграду отдельные частицы проникают внутрь преграды на расстояния, превышающие их размер в 100-1000 раз. Это явление называют сверхглубоким прониканием [1]. Считается, что проникание происходит по каналам, которые частично или полностью захлопываются после прохождения частиц. Вследствие небольшой доли (до 1%) проникших частиц структурные изменения в преграде, связанные с прониканием, носят локальный характер. Структурные и фазовые превращения в материале преграды обусловлены, главным образом, воздействием ударных волн, кото-