

МЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ВБЛИЗИ СИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ni_3Al

Мартынов А. Н., Полетаев Г. М.*, Ивахин М. П., Старостенков М. Д.*

ГОУ ВПО «Сибирский государственный индустриальный университет»,
г. Новокузнецк, Россия, gromov@physics.sibsiu.ru

*ГОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет»,
г. Барнаул, Россия, genphys@mail.ru

В настоящей работе рассматриваются результаты, полученные при исследовании методом молекулярной динамики механизмов пластической деформации вблизи симметричных границ зерен наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в интерметаллиде Ni_3Al в условиях одноосной деформации. Интерметаллид Ni_3Al выделяется из ряда подобных упорядоченных сплавов уникальным свойством – положительной температурной зависимостью предела текучести. Границы наклона создавались посредством поворота двух кристаллов Ni_3Al относительно друг друга на угол разориентации θ вокруг осей $\langle 111 \rangle$ или $\langle 100 \rangle$.

Одноосная деформация задавалась путем изменения соответствующих межатомных расстояний в стартовой конфигурации расчетного блока. В работе рассматривались деформации вдоль осей X, Y и Z. Продолжительность молекулярно-динамических экспериментов составляла 0,1-0,2 нс, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной. Температура во всех экспериментах задавалась равной $0,6 \cdot T_{пл}$, где $T_{пл}$ – температура плавления рассматриваемого металла. В завершении компьютерного эксперимента, для исключения тепловых смещений атомов, проводилось охлаждение расчетного блока до 0 К.

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

При малых значениях стартовой деформации в основном реализовывалось зернограничное проскальзывание, при котором происходили смещения атомов вдоль границы зерен. Причем для границ $\langle 111 \rangle$ в процесс проскальзывания вовлекалось большее число атомов, и относительное смещение зерен протекало более интенсивно, чем в случае границ $\langle 100 \rangle$. С увеличением величины стартовой деформации включался механизм внутриверенного скольжения, которое заключалось в испускании дислокации с границы зерен. Пластическая деформация осуществлялась при этом посредством совместного действия зернограничного проскальзывания и внутриверенного скольжения.

Сильная деформация сжатия вдоль осей Y и Z приводила к расщеплению зернограничных дислокаций и миграции границы, а деформация растяжения, за счет увеличения избыточного свободного объема, приводила к образованию аморфной структуры в области границы зерен. При расщеплении зернограничной дислокации в бикристалле Ni_3Al в зерно испускалась частичная дислокация, в результате чего в зерне возникала антифазная граница. При больших значениях стартовой деформации сжатия и растяжения происходило интенсивное испускание с границы зерна комплекса дислокаций, что приводило к образованию структуры, состоящей из множества разориентированных относительно друг друга вдоль плотноупакованных плоскостей кристаллических кластеров. Размер кластеров зависел от величины приложенного напряжения.