

## Роль электронных факторов во взаимодействии примесей с дислокациями в ОЦК металлах: эффект твердорастворного размягчения.

Горностырев Ю.Н., Медведева Н.И., Фриман А.Д.



**Механизм взаимодействия примесей с дислокациями в переходных ОЦК металлах исследован в рамках комбинированного подхода, включающего атомистическое моделирование с первопринципной параметризацией межатомных взаимодействий. Показано, что электронные факторы являются ответственными за необычное явление твердорастворного размягчения. Установлено, что в сплавах на основе Mo и W те примеси, которые увеличивают число валентных электронов (Re, Os, Ir, Pt), содействуют зарождению двойных перегибов и увеличению подвижности дислокаций. В результате, легирование такими элементами сопровождается снижением прочности сплава в противоположность элементам, уменьшающим число валентных электронов (Hf, Ta), добавление которых приводит к упрочнению.**

Взаимодействие между дислокациями и растворенными атомами представляет значительный интерес как один из механизмов упрочнения сплавов. Обнаруживаемое при этом твердорастворное упрочнение (ТРУ), является естественным результатом действия примесей, как препятствий для движения дислокаций. Однако в ряде случаев легирование приводит к противоположному результату. Явление твердорастворного размягчения (ТРР) является объектом интенсивного изучения как возможный

способ повышения низкотемпературной пластичности сплавов.

В настоящее время не вызывает сомнения, что ТРР связано с прямым взаимодействием между примесями и дислокациями, приводящим к увеличению их подвижности. Однако механизм этого явления остается предметом дискуссий. В частности, непонятны причины наблюдаемой строгой корреляции между величиной эффекта ТРР и числом валентных ( $s+d$ ) электронов в сплавах на основе Mo и W.

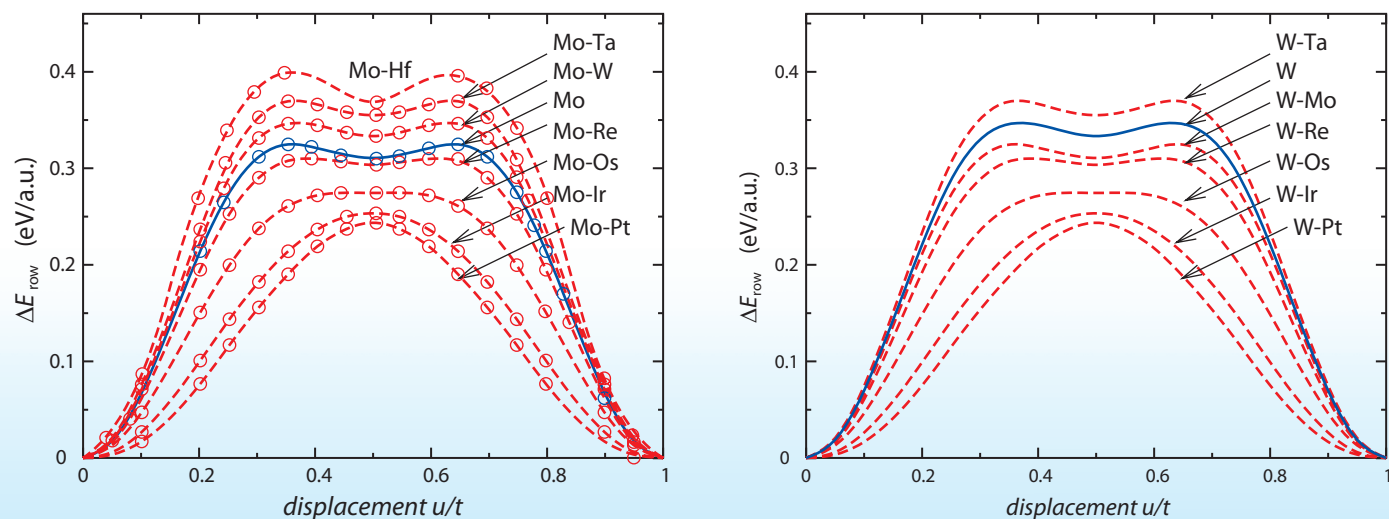


Рис.1

Изменение энергии атомных рядов при их смещении вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  в чистых Mo и W, а также в сплавах замещения Mo-X и W-X.

Чтобы прояснить этот вопрос, нами было предпринято исследование взаимодействия дислокация–примесь на основе первопринципных электронных зонных расчетов.

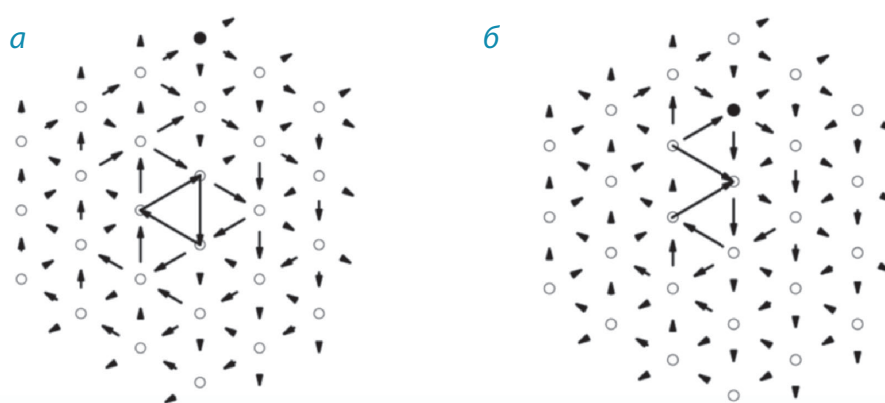
Несмотря на значительный прогресс в развитии современных методов моделирования материалов, задача взаимодействия дислокация–примесь остается слишком трудной для ее прямого решения в рамках первопринципных подходов. В результате, существующие представления продолжают основываться на континуальной теории упругости, которая не в состоянии описать наблюдаемые экспериментально особенности ТРУ и ТРР. Мы используем комплексный подход, который включает модель атомных рядов для описания структуры винтовой дислокации в ОЦК металлах с первопринципными потенциалами взаимодействия между атомными рядами.

На *рис.1* показаны результаты расчетов изменения энергии при смещении отдельных атомных рядов в Mo, W и сплавах на их основе. Видно, что легирование элементами, увеличивающими число валентных электронов (Re, Os, Ir, Pt), приводит к снижению сопротивления смещению атомных рядов, причем его величина увеличивается с ростом числа валентных электронов. Такие легирующие элементы приводят к перестройке изотропной структуры ядра дислокации (*рис.2а*) в

расщепленную (*рис.2б*) и снижают барьер для зарождения двойных перегибов на линии дислокации. В результате увеличивается подвижность дислокаций, что и проявляется как эффект ТРР. В тоже время, элементы, уменьшающие число валентных электронов (Hf, Ta), увеличивают сопротивления смещению атомных рядов, так что легирование ими сопровождается твердорастворным упрочнением. Причина корреляции между числом валентных электронов и прочностными свойствами сплавов на основе Mo и W обусловлена особенностями электронной структуры и формирования химической связи в этих металлах.

Таким образом, полученные результаты позволяют выявить микроскопические причины наблюдаемой корреляции между числом валентных электронов и величиной эффекта ТРР. Они демонстрируют, что энергия обобщенного дефекта упаковки или сопротивления сдвигу атомных рядов являются более адекватными параметрами для описания взаимодействия между дислокациями и растворенными атомами, чем обычно используемые величины размерного или модульного несоответствия между примесным атомом и матрицей.

Более подробно с представленными результатами и выводами можно ознакомиться в публикациях<sup>[1,2]</sup>.



**Рис.2**

*Влияние платины на структуру ядра винтовой дислокации в Mo для различных положений растворенного атома*

<sup>1</sup> N. I. Medvedeva, Yu. N. Gornostyrev, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. Lett.* V. 94 136402 (2005).

<sup>2</sup> N. I. Medvedeva, Yu. N. Gornostyrev, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* v.72, 134107 (2005)