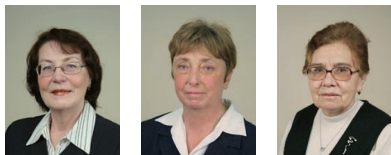


Теоретическое и экспериментальное изучение механизмов деформации и разрушения монокристаллического Ti_3Al

Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Елкина О.А., Рабовская М.Я.



Интерметаллид Ti_3Al обладает повышенными прочностными характеристиками, имеет сильную ориентационную зависимость и аномальное возрастание с температурой предела текучести, сложную геометрию скольжения, хрупкость при комнатной температуре. Пластическая деформация алюминидов титана во многом определяется характером расщепления и структурой ядра сверхдислокаций, осуществляющих деформацию. Наши исследования посвящены теоретическому (с использованием компьютерного моделирования) и экспериментальному изучению механизмов деформации и разрушения монокристаллического Ti_3Al .

Интерметаллид Ti_3Al с гексагональной структурой DO_{19} имеет аномальное возрастание с температурой предела текучести, сильную ориентационную зависимость геометрии скольжения, деформирующего напряжения, пластичности. Деформация Ti_3Al определяется характером расщепления и структурой ядра сверхдислокаций, осуществляющих деформацию.

Механизмы деформации и разрушения монокристаллического Ti_3Al изучены методами компьютерного моделирования, оптической и электронной микроскопии, теоретического анализа.

В рамках метода молекулярной динамики построены N -частичные потенциалы межатомно-

го взаимодействия для Ti_3Al , изучены γ -поверхности и получены значения энергий нестабильных дефектов упаковки для сдвига $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ в плоскости базиса, сдвигов $\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ в плоскостях базиса и призмы, сдвига $\langle \bar{1}\bar{1}26 \rangle$ в плоскостях пирамиды I и II типа (рис.1).

Проанализирована структура ядра a - и $2c+a$ -сверхдислокаций в плоскостях базиса, призмы. Выявлены дислокационные конфигурации, отвечающие скользящим конфигурациям и дислокационным барьерам (рис.2).

Вычислены энергии декогезии в плоскостях базиса $\{0001\}$, призмы $\{1\bar{1}00\}$ и $\{\bar{1}\bar{1}20\}$, пирамиды $\{10\bar{1}2\}$, $\{\bar{1}\bar{1}23\}$, $\{10\bar{1}1\}$, $\{11\bar{1}1\}$, $\{20\bar{2}1\}$ пирамиды I и II типа (рис.3).

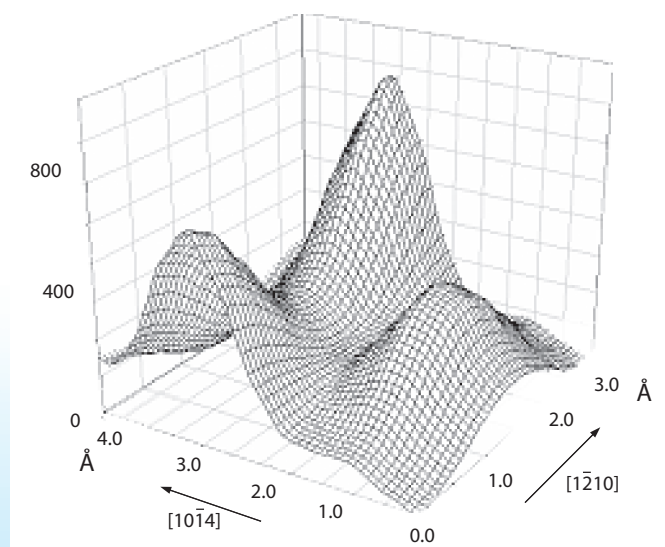


Рис. 1

γ -поверхность в Ti_3Al для плоскости пирамиды I типа $(\bar{2}21)$

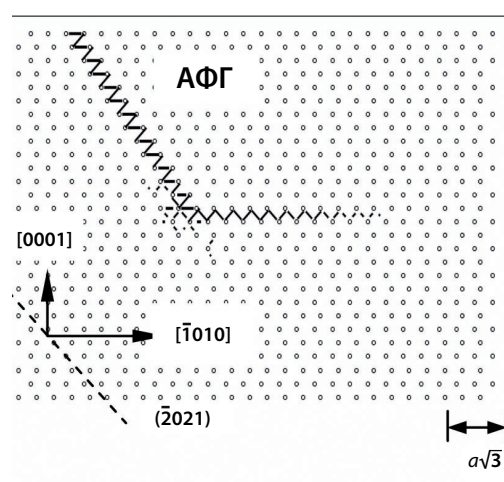


Рис. 2

Дислокационный барьер в плоскости пирамиды I типа $(\bar{2}21)$

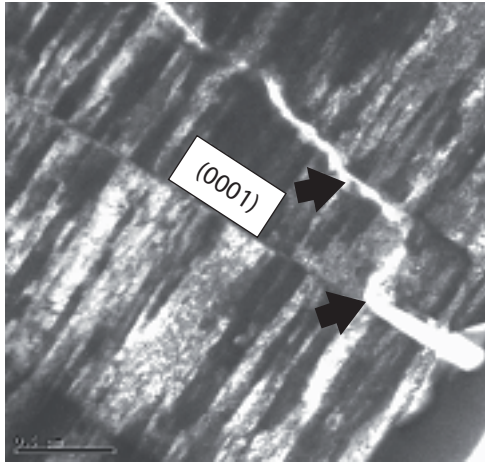


Рис. 3

Микроструктура монокристаллического Ti_3Al после деформации сжатием $\times 70000$

Предложена дислокационная теория деформационного поведения монокристаллического Ti_3Al при пирамидальном, базисном и призматическом скольжении на основе результатов компьютерного моделирования структуры ядра сверхдислокаций. Разработанная теория аномальной температурной зависимости предела текучести базируется на представлении о термически активированном превращении скользящих конфигураций $2s+a$ сверхдислокаций в дислокационные барьеры в плоскостях пирамиды I и II типа. Дано объяснение особенностей деформационного поведения монокристаллического Ti_3Al при базисном и призматическом скольжении.

С использованием оптической и электронной микроскопии изучена геометрия микро- и макротрещин монокристаллов Ti_3Al , подвергнутых индентации или деформации сдвигом под давлением при комнатной температуре. Выявлена возможность зарождения микротрещин сдвигового типа в плоскостях базиса (рис.3) и трещин нормального отрыва

при взаимодействии сверхдислокаций в плоскостях призмы и пирамиды.

Предложен механизм зарождения и распространения микротрещин сдвигового типа в плоскости базиса. В основе модели лежит полученная при компьютерном моделировании непланарная структура ядра частичных дислокаций Шокли, характеризующаяся заметными смещениями в плоскости призмы.

В модели Райса-Томпсона и Келли вычислены значения безразмерного параметра q , характеризующего меру хрупкого поведения материала. Полученные высокие значения q свидетельствуют о внутренней природе хрупкости интерметаллида Ti_3Al . В результате теоретического анализа установлены типы взаимодействий между сверхдислокациями в плоскостях базиса, призмы и пирамиды (I и II типов), которые приводят к образованию дислокационных барьеров – зародышей микротрещин.

Показано, что в интерметаллиде Ti_3Al для плоскостей базиса и призмы, которые являются плоскостями легкого скольжения в этом сплаве, значения энергии нестабильных дефектов упаковки высокие, что препятствует формированию пластической зоны и поэтому способствует хрупкому разрушению.

Проведена классификация типов микротрещин в зависимости от ориентации осей деформирования монокристаллов, и выделены области стереографического треугольника, характеризующиеся преимущественным типом раскрытия трещин. Установлены типы взаимодействий, которые приводят к образованию дислокационных барьеров – зародышей микротрещин.

Более подробно с представленными результатами и выводами можно ознакомиться в публикациях [1-4].

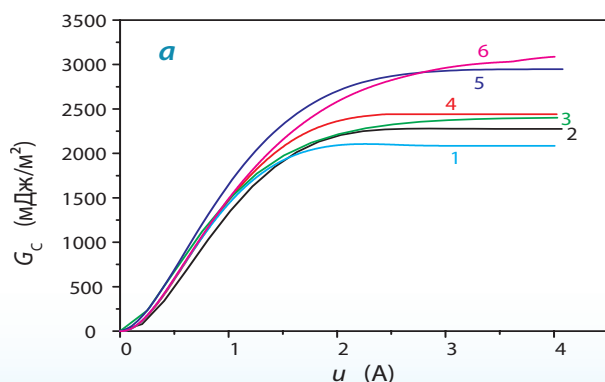
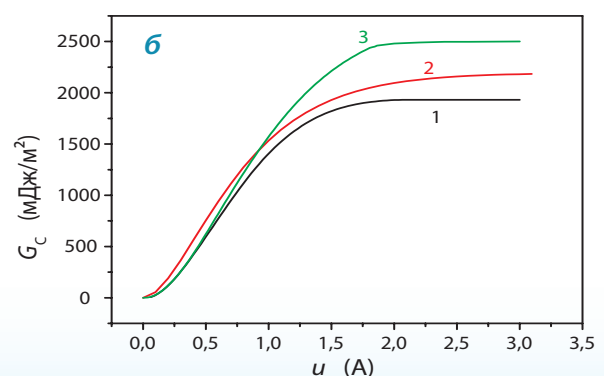


Рис. 4



Зависимость энергии декогезии G_c от расстояния между атомными плоскостями для плоскостей пирамиды (а): 1- $(20\bar{2}1)$ I; 2- $(10\bar{1}1)$; 3- $(10\bar{1}2)$; 4- $(\bar{1}\bar{1}21)$; 5- $(11\bar{2}3)$; 6- $(20\bar{2}1)$ II, базиса и призмы (б): 1 – (0001) ; 2 – $(01\bar{1}0)$; 3 – $(\bar{2}110)$

¹ Yakovenkova L., Malinov S., Novoselova T., Karkina L. *Intermetallic* 12 (2004) 599.

² Yakovenkova L., Malinov S., Karkina L., Novoselova T. *Scripta Materialia* 52 (2005) 1033.

³ Карькина Л.Е., Яковенкова Л.И., Рабовская М.Я. *ЖТФ* 76 (2006) 50

⁴ Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е. *ФММ* 103 (2007) вып.5