

УДК 621.7.044+669.218

Р. Л. ТОФПЕНЕЦ, А. Г. АНИСОВИЧ

РОЛЬ ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ В ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ ПРИ ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Физико-технический институт НАН Беларуси

(Поступила в редакцию 22.05.2014)

В основе получения современных материалов лежат технологии, использующие внешние высокоэнергетические воздействия. Вопросы структурообразования при этом представляют интерес в плане вскрытия природы процессов, реализующихся при таких воздействиях в реальных металлических материалах.

В основе разного рода энергетических воздействий, которым подвергаются металлы, заложены процессы пластического деформирования и релаксации напряжений. Элементарные механизмы этих процессов в металлах и сплавах разнообразны. Однако результатом их реализации является приведение металла в неравновесное состояние. При рассмотрении вопросов структурообразования в металлах при различного рода силовых воздействиях используются представления о волновой природе пластической деформации, ее локализации в определенных участках кристалла с возникновением в них сдвигоустойчивых возбужденных состояний [1]. В соответствии с представлениями об активированных состояниях эти участки можно отнести к активированным комплексам [2].

В зависимости от энергии внешнего силового воздействия возможны метастабильные активированные состояния разного рода. Их возникновение обусловлено появлением при внешних силовых воздействиях новых пар атом–вакансия. В этой связи любое нарушение структуры кристалла рассматривается как новое разрешенное состояние, связанное с электронно-энергетическим спектром кристалла. В областях кристалла со сдвиговой неустойчивостью отмечается образование дефектов разного вида. При описании сильно возбужденных состояний в кристалле используются представления о том, что функция распределения атомов в пространстве в этом случае существенно отличается от таковой в бездефектном кристалле. При внешнем силовом воздействии возникают атом-вакансионные состояния, которые можно рассматривать как новые структурные состояния (новые фазы).

Ранее в [2] было изложено представление об активированных состояниях в различных системах (в том числе и металлах) в связи с образованием «активированных комплексов», формирующихся из атомов исходного вещества. При этом разрыв межатомных связей не имеет места. Прочность межатомных связей в комплексе слабее, а характер и природа этой связи могут быть иными, чем в исходном металле. Активированный комплекс как целое может совершать поступательное и вращательное движения. Каждому из этих перемещений соответствует определенное число степеней свободы. Энергия активации активированного комплекса в общем случае может быть связана с несколькими степенями свободы. При этом важно, чтобы большой запас энергии был связан с необходимой для определенного процесса степенью свободы; общее возрастание избыточной энергии металла может быть невелико. Активированный комплекс находится в равновесии с исходным веществом и обладает обычными термодинамическими свойствами. С точки зрения термодинамики активированное состояние – это критическое состояние термодинамический неустойчивости атомных комплексов в кристалле, вызванное различными

факторами. В зависимости от этого изменяется значение термодинамических параметров процесса активации. Свободная энергия активации процесса аморфизации [2] в данной металлической фазе ΔG_S при температуре $T \leq T_S$ (T_S – температура плавления):

$$|\Delta G_S| = q - T \Delta S_a \quad (1)$$

где

$$q = -T_S \left[\frac{H_{T_S} - H_{298}}{T_S - 298} (6,7 - \ln T_S) - S_{298} \right], \quad (2)$$

$$\Delta S_a = -\frac{H_{T_S} - H_{298}}{T_S - 298} (6,7 - \ln T_S) + S_{298}. \quad (3)$$

Здесь q и S_a – энергия и энтропия активации процесса аморфизации вещества в данном комплексе. Между величиной q и энергией межатомной связи Φ существует определенное соотношение: большим значениям q соответствуют большие значения Φ (таблица). Величина q рассматривается так же, как энергия сдвигообразования в кристаллической решетке, по достижении которой в кристаллической решетке могут возникать активированные состояния. Значение модуля сдвига для разных металлов коррелирует с q (таблица).

Энергия активации q и энергия межатомной связи Φ некоторых металлов [1] и модули сдвига

Металл	q , эВ	Φ , эВ	G , дин/см ² · 10 ⁻¹¹	γ , эрг/см ²
Алюминий	0,31	0,2703	2,66	150–280
Медь	0,67	0,3429	4,55	72–83
Никель	0,98	–	7,60	90
Железо	1,02	0,4174	8,30	140±40

Термодинамический потенциал системы, подвергающейся силовому воздействию, зависит от величины статических смещений атомов из узлов кристаллической решетки. Значение термодинамического потенциала максимально для случая аморфного состояния металла. По мнению [1], при высокоэнергетическом внешнем воздействии исходным является именно такое состояние. Области неравновесных атом-вакансионных состояний могут релаксировать разными путями, реализация которых зависит от условий деформации, типа кристаллической структуры и ее сдвиговой устойчивости. Как наиболее вероятный путь для металлов отмечается релаксация за счет генерирования дислокаций в области атом-вакансионного состояния и их «выталкивания» в объем кристалла. Взаимодействие дефектов приводит к формированию фрагментированной структуры [3]. С учетом расчетов, приведенных в [1], можно полагать, что атом-вакансионные состояния возникают при энергии активации не менее величины q . Такая картина характерна для случая приложения сильных внешних полей, т. е. высокоэнергетических воздействий. В противном случае (слабые энергетические поля) нарушение равновесия системы происходит за счет возникновения дефектов кристаллической решетки (точечных дефектов, дислокаций, дефектов упаковки (д.у.) и их комплексов).

Традиционная теория пластической деформации металлов как основной фактор, определяющий пластичность, рассматривает сдвиговую устойчивость кристалла и ее влияние на характеристики дислокаций, характер их движения, трансформацию механизмов, ответственных за формирование структуры. При этом важную роль в дислокационной теории пластической деформации играют такие характеристики, как ширина расщепления дислокации, непосредственно связанная с образованием в решетке д.у., и энергия дефекта упаковки (э.д.у.). Связь энергии дефектов упаковки с основными свойствами кристаллов, а также с процессами, происходящими при пластической деформации и релаксации напряжений, общеизвестна [4].

Дефект упаковки связан с нарушением закономерного расположения атомных плоскостей в кристаллической решетке и может возникнуть при сдвиге по такой плоскости, ее внедрении или удалении и другими способами [3]. Появление д.у. не изменяет ни числа ближайших соседей атома, ни расстояния до них. Природа д.у. обусловлена электронной структурой металла. Изме-

нение энергии кристалла, определяющее и величину д.у., объясняется возрастанием или снижением энергии электронов проводимости, которые в силу своей волновой природы реагируют на нарушение атомной структуры, вносимой дефектом. Характеристикой д.у. является его энергия – избыток энергии электронного газа при образовании д. у.

Волновая функция электронов в рамках теории поля свободных электронов представляет собой плоскую волну с модулированной амплитудой. Реакция электронов проводимости на структуру кристалла (в частности, на наличие д.у.) связана с дифракцией электронов на дефекте, так как именно здесь возникает разрыв фазы периодичности решетки. Электронами проводимости являются электроны с энергией, близкой к энергии Ферми, т. е. электроны, волновые векторы которых близки к границам зоны Бриллюэна. Эти электроны имеют наибольший коэффициент отражения при взаимодействии их с д.у. Число их определяет заполненность зоны Бриллюэна, уровень и форму поверхности Ферми, характеризуя свойства кристалла. Такие представления о зонной структуре металла позволили Зегеру установить связь между валентностью металла и уровнем э.д.у. Для одновалентных металлов характерно частичное заполнение зоны, касание поверхности Ферми с границей первой зоны Бриллюэна отсутствует, уровень э.д.у. минимальный.

Для многовалентных металлов характерно перекрытие заполненных уровней в первой и второй зонах; уровень э.д.у. при этом возрастает. Разница в уровне э.д.у. металлов с одинаковой валентностью связана с топологией поверхности Ферми, т. е. разницей в площади касания поверхности Ферми с границей первой зоны Бриллюэна, поскольку эта величина характеризует число электронов вблизи границы данной зоны. Оценку эффективной электронной концентрации, связанной с площадью касания, можно произвести по экспериментальным значениям константы Холла [5]. Значения э.д.у. (γ) для некоторых металлов приведены в таблице.

Величина γ непосредственно связана с шириной растянутой (расщепленной) дислокации, которая играет существенную роль в процессе пластической деформации, определяя характер взаимодействия и скольжения дислокаций, и, следовательно, формирование структуры металла:

$$\omega = \frac{Ga^2}{32\pi\gamma} \frac{2 - \nu - 2\nu \cos \theta}{1 - \nu}, \quad (4)$$

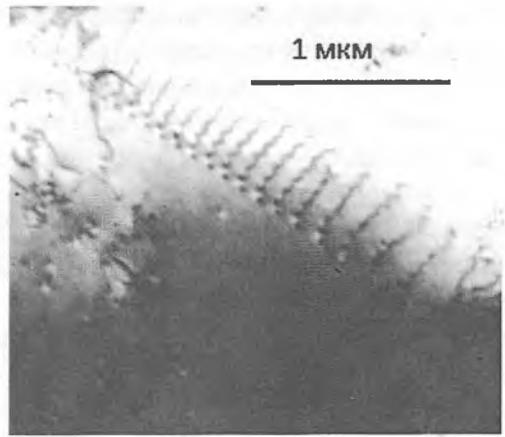
где ω – ширина расщепленной дислокации (ширина д.у.); G – модуль сдвига; a – параметр кристаллической решетки; ν – коэффициент Пуассона; θ – угол между линией частичной дислокации, ограничивающей д.у., и вектором Бюргерса полной дислокации.

Механизм образования растянутой или расщепленной дислокации сводится к следующему [3]. Единичная дислокация для уменьшения ее энергии расщепляется на две частичные дислокации, соединенные дефектом упаковки. Такой комплекс носит название растянутой дислокации, энергия которой равна сумме энергий двух частичных дислокаций, энергии их отталкивания и э.д.у. В ГЦК-решетке и единичная, и растянутая дислокации лежат в плоскости $\{111\}$ и могут осуществлять скольжение в ней в направлении $\langle 011 \rangle$. Скольжение растянутой винтовой дислокации аналогично скольжению растянутой краевой дислокации. Однако винтовая дислокация может скользить только в плоскости д.у.

Переход растянутой дислокации в другую плоскость скольжения возможен путем поперечного скольжения только после стягивания частичных дислокаций в единую дислокацию. Такое перемещение дислокаций связано с формированием ячеистой структуры, формирование которой в алюминии начинается при степени деформации 5% (рис. 1, а), плотность дислокаций $2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$. При увеличении степени деформации до 10% формируются плоские скопления дислокаций (рис. 1, б); скопления дислокаций около высокоугловых границ – при деформации порядка 50% (рис. 1, в). Ячеистая структура в алюминии формируется при пластической деформации прокаткой на 90% (рис. 1, г), когда деформация соответствует 3-й стадии кривой деформационного упрочнения [7]. Трансформация дислокационных конфигураций в процессе пластической деформации сопровождается существенным изменением напряженного состояния и фиксируется по повышению уширения интерференционных линий рентгенограммы.



a



б



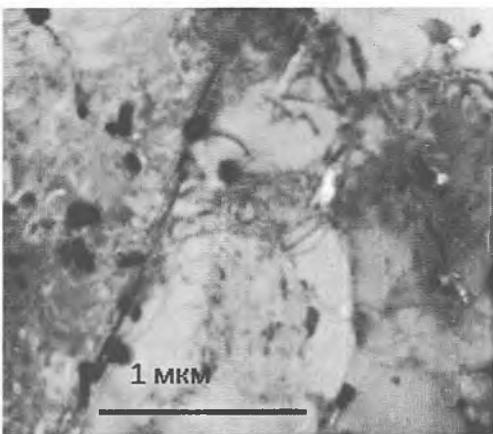
в



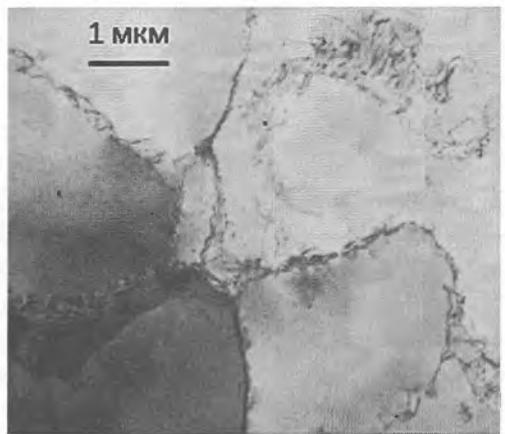
г

Рис. 1. Изменение дислокационной структуры при холодной деформации алюминия [7]:
a, б, в, г – $\epsilon = 5, 10, 50, 90\%$ соответственно

Проследить за картиной формирования субструктуры металлов с учетом характера активированных комплексов при внешних энергетических воздействиях можно на примере использования энергетических воздействий в импульсном режиме. В этом случае благодаря периодической «накачке» энергии в металл возможен анализ трансформации структуры по мере увеличения количества импульсов (циклов).



a



б

Рис. 2. Начало формирования ячеистой структуры в сплаве Д16 (*a*) и формирование ячеек в алюминии (*б*) при лазерном воздействии

Ранее при описании специфики структурообразования при импульсных воздействиях отмечалось, что за формирование структуры ответственны деформационная и тепловая компоненты воздействия [8]. Результатом реализации деформационной компоненты импульсного (циклического) воздействия является неоднородное распределение напряжений. В областях максимальных напряжений возникают сдвигоустойчивые состояния, характер которых зависит от уровня напряжений, задаваемых энергетическими условиями воздействия.

При однократном (единовременном) высокоэнергетическом воздействии определяющим фактором формирования структуры является уровень напряжений в зонах их локализации, задаваемый энергией импульса. При уровне энергии, примерно равном или большем, чем энергия активации активированного комплекса g , в приграничных областях металла возникают атом-вакансионные состояния. Релаксация напряжений в комплексах осуществляется за счет генерирования дислокаций, ответственных за формирование фрагментированной структуры. В формировании структуры участвуют трансляционная, изгибная и ротационная моды пластической деформации с участием дислокаций, дисклинаций и др.

При подаче энергии в импульсном режиме возможно возникновение в областях локализации напряжений активированных сдвигоустойчивых состояний в результате скопления и взаимодействия вакансий и дислокаций с образованием дуг. Релаксация напряжений в этом случае происходит за счет поперечного скольжения дислокаций, инициированного и деформационным, и тепловым факторами как во время силового воздействия, так и при его прекращении. Результатом является формирование ячеистой или полигональной структуры. Последняя формируется в случае, если тепловой эффект воздействия обеспечивает переползание дислокаций. При дальнейшем увеличении количества циклов и накоплении энергии, достаточной для активации границ зерен и возникновения атом-вакансионных состояний, начинается формирование фрагментированной структуры. Границы дуг с ГПУ-структурой являются дополнительными участками активации атом-вакансионных состояний. При этом границы ранее сформированных ячеек или полигональных блоков «рассыпаются», а освободившиеся дислокации участвуют в формировании фрагментов.

Такая картина формирования субструктуры характерна для металлов с высокой энергией дуг и подтверждается на примере структурообразования в металлах и сплавах на основе алюминия после их термической обработки в режиме циклирования [8, 9]. Формирование такой субструктуры наблюдается, в частности, при воздействии лазерного нагрева. На рис. 2, *а* показано начало формирования ячеистой структуры около высокоугловой границы и формирование плоских границ ячеек (рис. 2, *б*) в сплаве Д16 при нагреве расфокусированным лазерным лучом.

При термоциклировании металлов с ГЦК-решеткой и низкой э.д. [9] альтернативой поперечному скольжению с образованием ячеистой структуры является процесс двойникования (рис. 3). При этом характерно образование зубчатых границ (рис. 3, *а*) с участками двойниковой

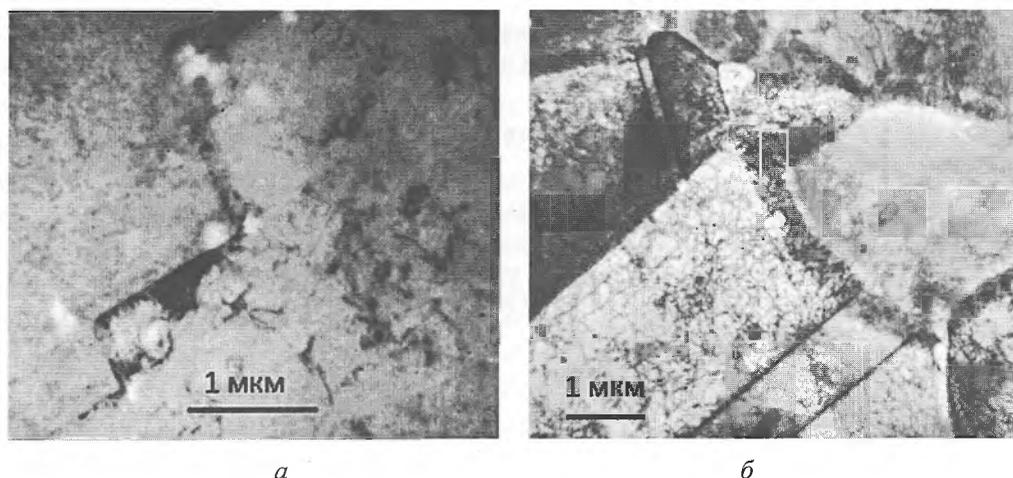


Рис. 3. Зубчатые границы в меди (*а*) и формирование дислокационной структуры внутри двойников в никеле (*б*); лазерное воздействие

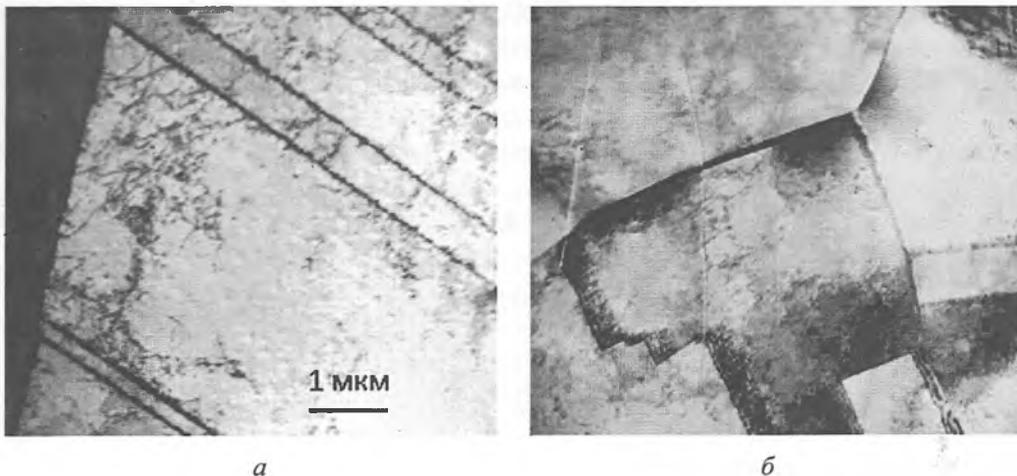


Рис. 4. Формирование двойников (а) и фрагментов (б) в меди при магнитно-импульсном воздействии [9]

ориентации разного порядка. Развитие субструктуры наблюдается внутри двойников (рис. 3, б). При воздействии импульсного магнитного поля (рис. 4) наблюдаются те же закономерности. Процесс двойникования интенсифицируется [10]. Формируются фрагменты с прямолинейными границами двойникового происхождения.

Литература

1. Панин В. Е. и др. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск, 1985.
2. Осипов К. А. Некоторые активируемые процессы в твердых металлах и сплавах. М., 1962.
3. Новиков И. И., Розин К. М. Кристаллография и дефекты упаковки кристаллической решетки. М., 1990.
4. Вешняков Я. Д. Современные методы исследования структуры деформированных сплавов. М., 1975.
5. Тофпенец Р. Л. Разупрочняющие процессы в стареющих сплавах. Мн., 1979.
6. Дефект упаковки [Электронный ресурс]. 2014. Режим доступа: <http://www.manual-steel.ru/term47464.html>. Дата доступа 25.04.2014.
7. Васильева Л. А., Малашенко Л. М., Тофпенец Р. Л. Электронная микроскопия в металловедении цветных металлов: Справочник. Мн., 1989.
8. Тофпенец Р. Л., Шиманский И. И., Анисович А. Г., Грешилов А. Д. Физические основы термоциклической обработки стареющих сплавов. Мн., 1992.
9. Анисович А. Г. Закономерности процессов структурообразования и термодинамический аспект организации структуры металлов при нестационарных энергетических воздействиях: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Мн., 2005.
10. Anisovich A., Rumyantseva I., Zhizhchenko A. // Intern. Journ. of Innovative and Information Manufacturing Technologies. 2014. N 1. P. 12–16.

R. L. TOPPENEZ, A. G. ANISOVICH

THE ROLE OF STACKING-FAULT ENERGY AT STRUCTURE FORMATION UNDER PULSE ACTIONS

Summary

The problems of structure formation in metals and alloys under their exposure to pulses of various nature are discussed on the basis of crystal shear stability. The structure formation of aluminum and copper alloys is considered during their thermal cyclic treatment using furnace and laser heating as well as under exposure to pulse magnetic field. It is shown that the structure formation in metals with high stacking-fault energy occurs due to glide and climb dislocation processes. Twinning is an alternative to dislocation glide for metals with low stacking-fault energy.