

18. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Кулагина В.В. и др. // Деформация и разрушение материалов. 2011. № 11. С. 40 – 43.
19. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Гюнтер В.Э., Кулагина В.В. – В кн.: Влияние структурных дефектов на устойчивость сплавов на основе никелида титана / Под ред. В.Э. Гюнтера. – Томск: Изд-во НПП «МИЦ», 2010. С. 296 – 302.
20. Хохлов В.А. // Вестник ТГУ. 2004. № 32. С. 101 – 108.
21. Хохлов В.А. – В кн.: Современные проблемы машиностроения. Тр. II междунар. науч.-техн. конф. – Томск: изд-во ТПУ, 2004. С. 107 – 110.

© 2012 г. А.И. Потекаев, В.А. Хохлов,
С.В. Галсанов
Поступила 31 января 2012 г.

УДК 669.018:538.931

**Г.М. Полетаев, А.Н. Мартынов,
Д.В. Дмитриенко, М.Д. Старостенков**

Алтайский государственный технический университет

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН КРУЧЕНИЯ В НИКЕЛЕ В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Диффузионные свойства деформированных металлов и сплавов зависят от величины деформации и скорости деформирования. Механизм влияния деформации на диффузию по различным кристаллографически определенным границам зерен изучен слабо, тем более на атомном уровне. Кроме того, безусловный интерес представляет атомный механизм пластической деформации с участием границ зерен.

Малоугловые границы кручения, как известно, имеют упорядоченную структуру, представляющую собой сетку винтовых дислокаций [1, 2]. В работе [3] проведена идентификация винтовых дислокаций в границах кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах на примере никеля, меди, алюминия. Показано, что границы (100) содержат квадратную сетку винтовых дислокаций $1/2\langle 110 \rangle$; границы (110) – прямоугольную сетку винтовых дислокаций двух типов: $1/2\langle 110 \rangle$ и $1\langle 100 \rangle$; границы (111) – гексагональную сетку винтовых дислокаций $1/4\langle 112 \rangle$. С увеличением угла разориентации размеры ячеек дислокационной сетки уменьшаются. В центре ячеек сетки структура соответствует практически идеальному кристаллу.

В работах [4, 5] описаны результаты исследования методом молекулярной динамики самодиффузии по границам кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах (никеле, меди, алюминии). Самодиффузия по малоугловым границам кручения осуществляется посредством образования цепочек смещенных атомов вдоль ядер зернограницных винтовых дислокаций, причем местами инициации цепочек атомных смещений выступают узлы дислокационной сетки. Цепочки атомных смещений зачастую имеют замкнутую форму. Это связано с тем, что в таком случае рекомбинирует пара избыточных точечных дефектов (вакансия и междоузельный атом), образующихся в соседних узлах дислокационной сетки при возникновении цепочки смещенных атомов

вдоль ядра дислокации от одного узла к другому. Значения энергии активации диффузии по границам (100), (110), (111), полученные в работе [5], сильно отличаются друг от друга. Наибольшей диффузионной проницаемостью (минимальной энергией активации) обладают границы (100), наименьшей – границы (111). С ростом угла разориентации энергия активации падает.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики самодиффузии и структурных превращений вблизи границ зерен кручения (100), (110), (111) в никеле в условиях одноосной деформации.

Границу кручения создавали в середине расчетного блока путем поворота двух ГЦК кристаллов (двух половин блока) на угол разориентации θ вокруг оси, перпендикулярной границе. Рассматривали три варианта плоскости границы: (100), (110), (111). Получающийся расчетный блок обрезают таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот. Затем проводили динамическую релаксацию структуры, в ходе которой бикристалл переходил в равновесное состояние. В завершении релаксации выполняли процедуру охлаждения до 0 К.

Граничные условия по всем осям задавали жесткие, т.е. крайним атомам расчетного блока не позволялось двигаться. Такой тип условий позволяет сохранить положение границы зерен с заданными изначально геометрическими параметрами. Количество атомов в расчетном блоке составляло около 30 000. Шаг интегрирования движения частиц по времени в соответствии с методом молекулярной динамики варьировали от 1 до 10 фс.

Межатомные взаимодействия описывали многочастичным потенциалом Клери-Розато [6]. Параметры потенциала для никеля взяты из работы [6].

При определении коэффициентов самодиффузии проводили компьютерные эксперименты продолжи-

тельностью 0,2 нс, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной. В завершении, для исключения тепловых смещений атомов, проводили охлаждение блока до 0 К. Коэффициент диффузии D_x вдоль оси X рассчитывали по формуле

$$D_x = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (x_{0i} - x_i)^2}{2t},$$

где x_{0i} – координата начального положения i -го атома; x_i – координата i -го атома в момент времени t ; N – число атомов в расчетном блоке.

Коэффициенты диффузии D_y и D_z вдоль осей Y и Z рассчитывали аналогично. Средний коэффициент самодиффузии находили как среднее арифметическое значений D_x , D_y и D_z . При определении коэффициента диффузии по границе зерен полагали, что граница имеет толщину 5 Å. Такая толщина была выбрана не случайно: как известно, в кристаллах, содержащих границы зерен, основные диффузионные процессы протекают вблизи межзеренной границы в малом слое толщиной порядка 5 Å [7, 8]. В некоторых справочниках, например [7, 8], коэффициенты диффузии и энергии активации приводятся именно для такой толщины.

Одноосную деформацию задавали в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одного направления. Рассматривали деформацию вдоль осей X (перпендикулярно границе зерен) и Y (вдоль границы).

Поскольку наличие свободной поверхности в модели в значительной степени влияет на вероятность образования пластических сдвигов в расчетном блоке, в работе рассматривали два типа граничных условий: жесткие (когда крайним атомам расчетного блока не позволяет двигаться) и комбинированные свободно-жесткие (с наличием у бикристалла свободной поверхности).

Для анализа влияния деформации на интенсивность диффузии по границам кручения (100) и (110) при использовании жестких условий определяли зависимости коэффициента диффузии от величины стартовой деформации. При этом проводили компьютерные эксперименты продолжительностью 200 пс при температуре 1500 К.

В большинстве случаев коэффициент самодиффузии увеличивается с ростом величины деформации, что является следствием увеличения свободного объема при растяжении. Исключением является зависимость коэффициента диффузии от деформации бикристалла с границами (100) вдоль оси X (перпендикулярно границе зерен). Коэффициент диффузии в этом случае (рис. 1, *a*) почти не зависит от деформации, оставаясь постоянным в пределах погрешности измерений. Вместе с тем, при деформации вдоль оси Y (рис. 1, *б*) (вдоль плоскости границы) наблюдается явная зависимость интенсивности диффузии от деформации.

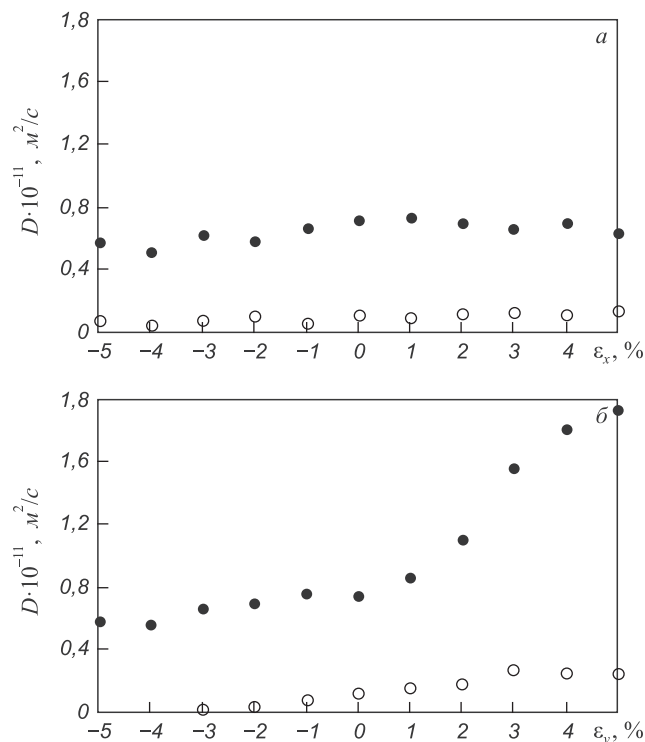


Рис. 1. Зависимости коэффициента самодиффузии по границам кручения (100) с углами разориентации 15° (○) и 24° (●) от величины одноосной деформации ϵ вдоль осей X (*a*) и Y (*б*) в никеле

Наблюдаемое отличие влияния деформации вдоль осей X и Y на интенсивность диффузии по границам (100) можно объяснить тем, что при зернограницной диффузии по данным границам смещения атомов происходят преимущественно вдоль двух соседних плоскостей, параллельных границе. Смещения атомов в основном имеют компоненты вдоль осей Y и Z , и значительно реже вдоль оси X . Следовательно, можно предположить, что на вероятность реализации подобных атомных смещений больше влияет избыточное свободное пространство в плоскости YZ , возникающее при деформации.

Пластическая деформация в расчетных блоках с жесткими граничными условиями в основном заключается в смещении ядер зернограницных дислокаций и связанными с этим смещениями атомов вдоль ядер (рис. 2, *a*), а также расщеплении зернограницных дислокаций и возникновении пластических сдвигов в зернах (рис. 2, *б*).

Наличие свободной поверхности в модели в значительной степени влияет на вероятность образования пластических сдвигов в расчетном блоке. Поэтому в настоящей работе проведено исследование поведения бикристаллов никеля с границами кручения в условиях деформации не только с жесткими граничными условиями, но и при наличии у бикристаллов свободной поверхности.

На начальном этапе структурной релаксации деформированного вдоль оси X расчетного блока с комбинированными граничными условиями

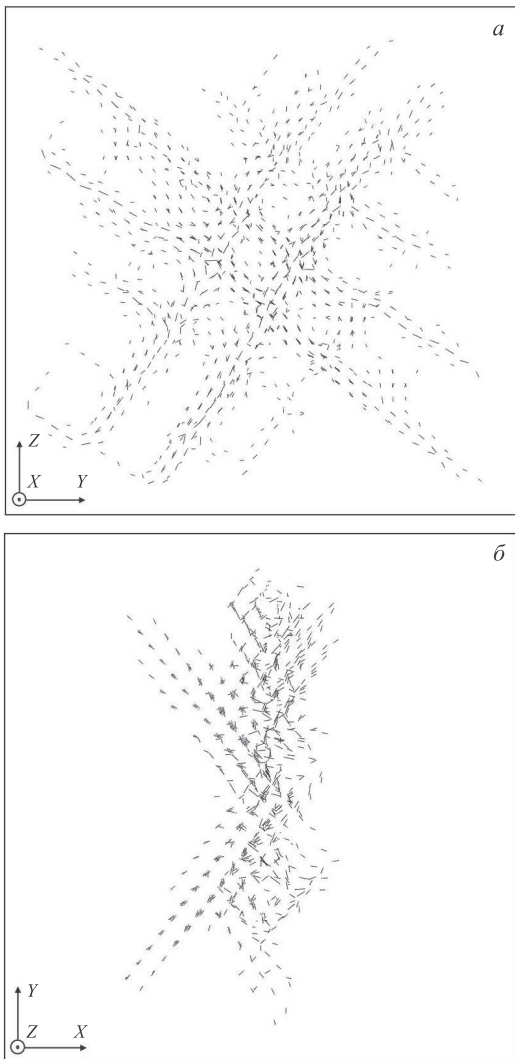


Рис. 2. Примеры атомных смещений, возникающих при пластической деформации в бикристаллах с жесткими граничными условиями:
a – смещения в плоскости границы (100), угол разориентации 15°, деформация 13 % вдоль оси *X* (показаны атомные смещения больше 0,4 Å); *б* – проекция смещений на плоскость *XY*, перпендикулярную плоскости границы, граница (110), угол разориентации 15°, деформация 7 % вдоль оси *X* (показаны атомные смещения больше 0,6 Å)

рованными свободно-жесткими условиями возникают смещения атомов, начинающиеся от свободных поверхностей и направленные при растяжении к центру расчетного блока, при сжатии, наоборот, направленные от центра (рис. 3, *a*). В процессе компьютерного эксперимента эти смещения периодически усиливаются и ослабевают. При значениях стартовой деформации менее 5 – 6 % первоначальные смещения не приводят к образованию дополнительных дислокаций, однако провоцируют миграцию атомов вдоль зернограничных дислокаций (рис. 3, *б*). Заполнение избыточного свободного объема при растяжении происходит, таким образом, посредством образования цепочек смещенных атомов с поверхности в объем вдоль зернограничных дислокаций. При сжатии также образуются смещения вдоль

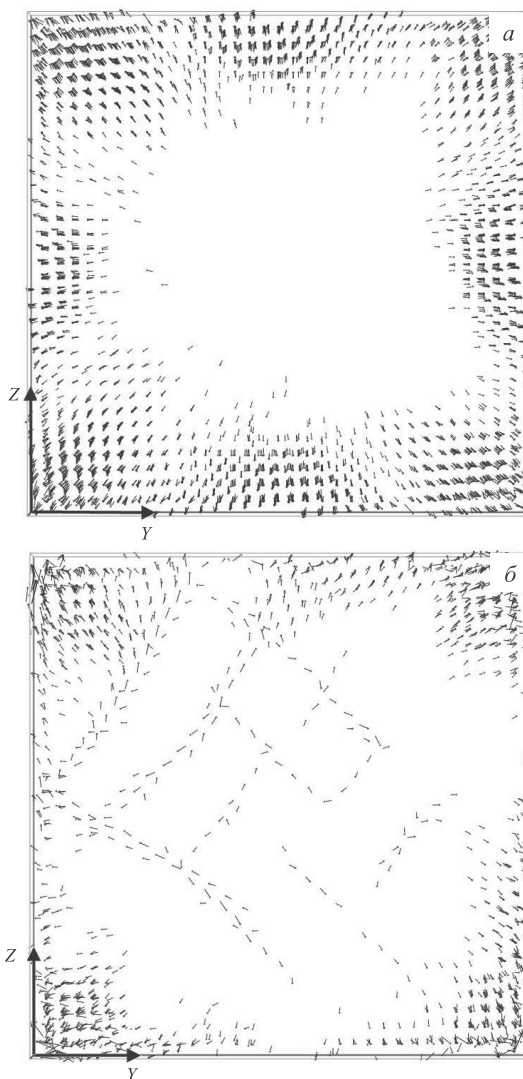


Рис. 3. Примеры атомных смещений (показаны смещения больше 0,6 Å) в начале структурной релаксации (*a*) и спровоцированные первоначальными смещениями атомов вдоль ядер зернограничных дислокаций (*б*) в расчетном блоке с границей кручения (100) с углами разориентации 24° при стартовом растяжении 4 % вдоль оси *X*

дислокаций, но противоположного направления относительно смещений, возникающих при растяжении.

Механизм атомных смещений, возникающих при структурной релаксации бикристаллов, деформированных вдоль оси *Y*, аналогичен механизму при деформации вдоль оси *X*. Главное отличие заключается в том, что смещения атомов вдоль ядер зернограничных дислокаций не провоцируются смещениями от свободных поверхностей, а во всех случаях возникают сразу наряду со смещениями атомов от поверхностей. Аналогичное поведение наблюдается при деформации вдоль оси *Y* при жестких граничных условиях: диффузия интенсифицируется при деформации дислокационной сетки. При деформации вдоль оси *X* (перпендикулярно плоскости границы) сетка винтовых дислокаций в границах (100) и (111) деформируется слабо (в границах (110) сетка деформируется сильнее) и диффузия протекает почти также, как

и в отсутствие деформации при жестких условиях или провоцируется атомными смещениями от свободных поверхностей при свободно-жестких условиях.

Дислокации с поверхностями при свободно-жестких граничных условиях образуются только при значениях стартовой деформации выше 5 – 6 %. Как правило, пластический сдвиг инициируется на поверхности, а сама дислокация в большинстве случаев захватывается зернограничной дислокационной сеткой.

Выводы. В результате исследования методом молекулярной динамики структурных превращений вблизи границ кручения выяснено, что растяжение бикристалла вдоль плоскости границы кручения приводит к интенсификации зернограничной диффузии, обусловленной трансформацией дислокационной сетки. При этом деформация в направлении, перпендикулярном границе, влияет на диффузию слабее. Пластическая деформация бикристалла на начальном этапе, как правило, сопровождается образованием атомных смещений вдоль ядер зернограничных винтовых дислокаций, приводящих к трансформации дислокационной сетки.

УДК 669.14.08.29:621.785

**Ю.Ф. Иванов¹, Е.А. Будовских², В.Е. Громов²,
Л.П. Бащенко², Н.А. Соскова², С.В. Райков²**

¹ Институт сильноточной электроники СО РАН (г. Томск)

² Сибирский государственный индустриальный университет

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СЛОЕВ НА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНА ВТ1-0 ПРИ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОМ НАУГЛЕРОЖИВАНИИ И ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКЕ*

Обработка поверхности титана импульсными плазменными струями, формируемыми при электрическом взрыве углеграфитовых волокон, приводит к оплавлению и легированию поверхностных слоев. Эти слои содержат структурно-свободный углерод в виде частиц разрушившихся волокон [1]. Такая структура обуславливает возможность ее дальнейшей модификации путем растворения частиц графита и увеличения содержания карбида титана [2]. При этом повышаются микротвердость и износостойкость науглероженных поверхностных слоев титановых сплавов, однако происходит огрубление структуры основы. В связи с этим представляет интерес применение для растворения частиц графита импульсно-периодической обработки

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
2. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. 1. Дефекты решетки. – М.: Металлургия, 1982. – 280 с.
3. Полетаев Г.М., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2010. Т. 7. № 4. С. 27 – 34.
4. Мартынов А.Н., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. // Письма о материалах. 2011. Т. 1. № 1. С. 43 – 46.
5. Полетаев Г.М., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д., Громов В.Е. // Вестник ТГУ. Серия: Естественные и технические науки. 2011. Т. 16. Вып. 3. С. 829 – 833.
6. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V. 48. № 1. P. 22 – 33.
7. Ларииков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. – Киев: Наукова думка, 1987. – 511 с.
8. Смитлз К.Дж. Металлы. Справочник. – М.: Металлургия, 1980. – 447 с.

© 2012 г. Г.М. Полетаев, А.Н. Мартынов,
Д.В. Дмитриенко, М.Д. Старостенков
Поступила 20 декабря 2011 г.

поверхности сильноточными электронными пучками, которая позволяет нагревать облучаемую поверхность выше температуры плавления, но не приводит к изменению структуры сплава в глубине. Ранее эффективность комбинированной обработки, сочетающей электровзрывное бороалитирование поверхности технически чистого титана ВТ1-0 и последующую электронно-пучковую обработку, была опробована в работе [3].

Целью настоящей работы является анализ градиента структуры и фазового состава зоны электровзрывного науглероживания титана ВТ1-0 после ее электронно-пучковой обработки.

В качестве материала основы использован технически чистый титан марки ВТ1-0. Образцы имели форму шайб толщиной 5 и диам. 20 мм. Электровзрывное науглероживание осуществляли на установке ЭВУ 60/10 [1] при поглощаемой плотности мощности 6,5 ГВт/м² и времени импульса 100 мкс. Инструментом воздействия на поверхность служила импульсная плазменная струя, сформированная из продуктов электрического взрыва

* Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 гг. (гос. контракт № 14.740.11.0813) и грантами РФФИ (проекты № 11-02-91150-ГФЕН-а, № 11-02-12091-офи-м-2011 и № 11-08-98020-р_сибирь_а).