

Теоретическая прочность сплавов γ -Ni₃Al и β -NiAl

Искандаров А.М.^{1,2,†}, Букреева К.А.², Umeno Y.¹, Дмитриев С.В.²

[†]a.iskandarov@gmail.com

¹Institute of Industrial Science, the University of Tokyo, 4-6-1 Komaba, Meguro-ku, 153-8505 Tokyo

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа

Ideal shear strength of γ -Ni₃Al and β -NiAl alloys

A.M. Iskandarov^{1,2}, K.A. Bukreeva², Y. Umeno¹, S.V. Dmitriev²

¹Institute of Industrial Science, the University of Tokyo, 4-6-1 Komaba, Meguro-ku, 153-8505 Tokyo

²Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, Khalturin St. 39, 450001 Ufa

Проведено вычисление теоретической прочности на сдвиг для двух сплавов γ -Ni₃Al и β -NiAl при различных температурах на основе методов молекулярной динамики. В процессе действия сдвиговой деформации бездефектные кристаллы сплавов теряют устойчивость посредством возникновения сдвига на полный вектор Бюргерса при сдвиге в направлении полной дислокации и возникновения дефекта упаковки при сдвиге в направлении частичной дислокации. Критические напряжения сдвига, при которых кристаллы теряют устойчивость, для обоих сплавов убывают с ростом температуры по закону, близкому к линейному, тогда как критическая деформация слабо зависит от температуры.

Ключевые слова: теоретическая прочность, температура, деформация сдвига, интерметаллид.

Theoretical strength of two intermetallic alloys, γ -Ni₃Al and β -NiAl, was calculated at different temperatures by means of molecular dynamics simulations. At the instability point the defect-free crystals of both alloys undergo full Burgers vector shear in the case of full dislocation shear direction and undergo stacking fault formation in the case of shear along the partial dislocation Burgers vector. For both alloys the critical stress reached at the instability point decreases linearly as temperature rises. The critical strain shows only modest variation with temperature.

Keywords: theoretical strength, temperature, shear deformation, intermetallic compound.

1. Введение

Теоретическая прочность материалов долгое время была далеко за пределами достижимости в экспериментах, поскольку она является характеристикой бездефектного состояния кристаллов, чего до недавнего времени было трудно достичь. Однако с появлением таких экспериментальных методик, как наноиндентирование [1, 2] и выращивание монокристаллических наностолбиков [3], стало возможным испытывать на прочность чрезвычайно малые объемы вещества, в которых количество дефектов настолько мало, что они могут считаться бездефектными. В результате такие материалы демонстрируют прочность, близкую к теоретической. Достижение столь значительной прочности сопровождается также значительной упругой деформацией материала, которая существенно изменяет многие свойства материалов [4]. Поэтому вопрос теоретической прочности и влияния значительной упругой деформации на свойства материалов в настоящее время имеют принципиальный прикладной характер.

Прочность реальных изделий отличается от теоретической прочности материалов, из которых они изготовлены, не только из-за присутствия дефектов, но и в силу влияния на величину самой теоретической прочности различных факторов, таких как, например, внешнее давление [5, 6] и температура [7-9]. С точки зрения применения различных материалов для изготовления изделий, обладающих высокой прочностью, важно знать влияние этих факторов на теоретическую прочность, которая определяет верхний предел прочности изделий.

В решении этой задачи важную роль играют методы компьютерного моделирования, так как с их помощью возможно проводить расчеты для наноразмерных объектов, подвергать их испытанию на прочность и задавать такие внешние условия, которые трудно достижимы в эксперименте. Применительно к вопросу теоретической прочности и прочности наноразмерных изделий используются такие методы компьютерного моделирования, как расчеты из первых принципов (ab initio расчеты) и молекулярная динамика (МД). Ab initio расчеты основаны на решении квантово-механических уравнений. Они не содержат в себе экспериментальных данных в каче-

стве исходных параметров, а основаны исключительно на химическом строении вещества. Однако это ни в коей мере не ограничивает возможности метода очень точно количественно воспроизводить механические, магнитные, оптические свойства материалов. Существенным ограничением *ab initio* расчетов являются большие требуемые вычислительные затраты, что ограничивает его использование для моделирования систем при конечных температурах, для чего необходимо рассматривать относительно большие временные интервалы времени, чтобы система находилась в термодинамическом равновесии. МД расчеты позволяют избавиться от этих ограничений и, как показывают наши предыдущие работы, при правильном выборе потенциала межатомного взаимодействия позволяют получить хорошую согласованность как с экспериментальными данными, так и с результатами *ab initio* расчетов.

В настоящей работе мы расширяем спектр результатов о влиянии температуры на теоретическую прочность материалов путем изучения методами МД прочности на сдвиг при различных температурах двух интерметаллидных сплавов на основе Al и Ni: γ -Ni₃Al и β -NiAl. Для сплава γ -Ni₃Al сдвиг проводился в направлении частичной дислокации $[1\bar{1}2](111)$, а для сплава β -NiAl в направлении полной дислокации $[001](110)$.

2. Методика моделирования

Исследование теоретической прочности подразумевает испытание на прочность бездефектного кристалла. Поэтому в моделировании рассматривались два бездефектных трехмерных кристалла: γ -Ni₃Al, атомы которого изначально расположены в узлах ГЦК решетки, и β -NiAl, с атомами, изначально расположенными в узлах ОЦК решетки. Ориентация в пространстве каждого кристалла задавалась таким образом, что бы сдвиг в положительном направлении оси x в плоскости xOy соответствовал исследуемому направлению сдвига. Для сплава γ -Ni₃Al прочность на сдвиг была рассчитана в интервале температур от 0 К до 1200 К с шагом 100 К, а для β -NiAl – от 0 К до 1700 К с шагом 200 К. Температура в процессе моделирования поддерживалась постоянной масштабированием скоростей атомов на каждом шаге моделирования. Временной шаг интегрирования составлял 1 фс. Периодические граничные условия использовались во всех трех направлениях. В качестве граничных условий использовался контроль напряжений, таким образом, что в процессе сдвиговой деформации все компоненты тензора напряжения, кроме τ_x были равны нулю. В начале каждого моделирования расчетная ячейка выдерживалась при заданной температуре в течение 10 пс для устранения влияния начальных условий и достижения теплового равновесия в системе. После этого, сдвиговое напряжение равномерно увеличивалось со скоростью 50 КПа/1 фс до момента потери устойчивости кристалла, что сопровождалось образованием максимума на кривой напряжение-деформация. По положению этого максимума фиксировалось значение прочности на сдвиг (критического сдви-

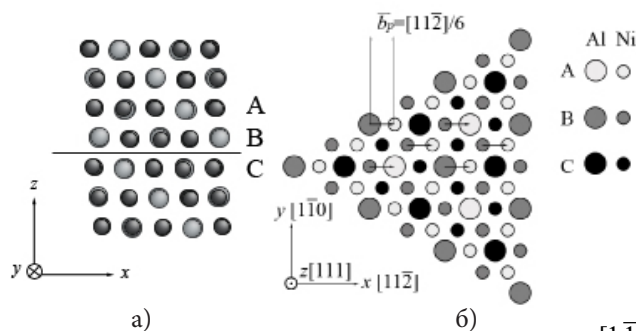


Рис. 1. а) Проекция атомов в сплаве γ -Ni₃Al на плоскость $[1\bar{1}0]$ после образования дефекта упаковки между атомными плоскостями В и С, перпендикулярными направлению $[111]$, при 100 К; б) Схематичная иллюстрация процесса образования дефекта упаковки за счет относительного сдвига смежных плотноупакованных плоскостей (111) В и С в сплаве γ -Ni₃Al на вектор Бюргерса частичной дислокации $b_p = [112]/6$.

гового напряжения) τ_c и критической деформации γ_c при заданной температуре. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал [10] для γ -Ni₃Al и потенциал [11] для β -NiAl, оба потенциала построены методом погруженного атома [12]. Их выбор осуществлялся для решения задач настоящего исследования по методике, описанной в работе [13].

3. Механизмы потери устойчивости

Рассмотрим механизмы потери устойчивости, для этого изучим атомные структуры обоих сплавов через малое время после момента потери устойчивости. На рис. 1а можно увидеть, что в случае γ -Ni₃Al происходит сдвиг на вектор частичной дислокации $b_p = [112]/6$, что соответствует образованию дефекта

упаковки. Более наглядно этот процесс схематично продемонстрирован на рис. 1б, на примере трех смежных плоскостей А, В и С, перпендикулярных направлению $[111]$ и параллельных плоскости xOy , где дефект упаковки возникает за счет относительного сдвига плоскостей В и С.

В случае сплава β -NiAl в момент достижения максимума на кривой напряжение-деформация происходит зарождение сдвига на вектор полной дислокации, что в конечном итоге приводит к относительному сдвигу двух плоскостей (110) А и В на вектор Бюргерса полной дислокации $b = [001]$, в результате восстанавливается на-

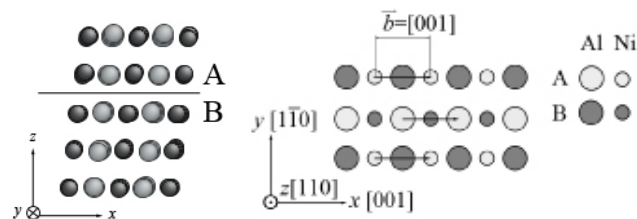


Рис. 2. а) Проекция атомов в сплаве β -NiAl на плоскость $[1\bar{1}0]$ после сдвига на вектор Бюргерса полной дислокации $b = [001]$ между плоскостями А и В, перпендикулярными направлению $[110]$, при 100 К; б) Схематичная иллюстрация относительного сдвига на полный вектор Бюргерса $b = [001]$ двух плоскостей А и В, перпендикулярных направлению $[110]$.

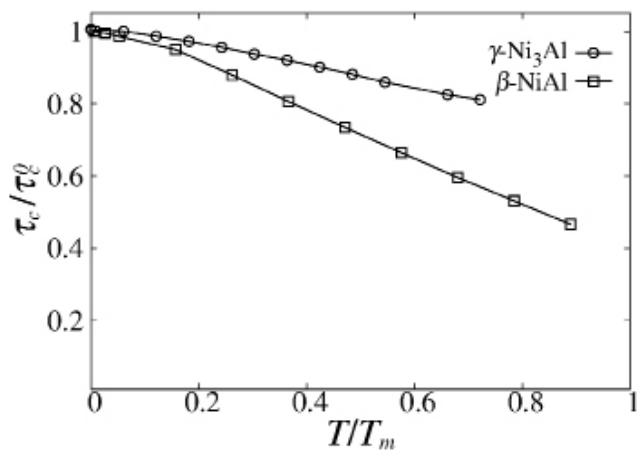


Рис. 3. Зависимость критического напряжения сдвига τ_c от температуры T для γ -Ni₃Al (○) и β -NiAl (□). τ_c^0 - теоретическая прочность на сдвиг при 0 K, T_m - температура плавления.

альная кристаллическая структура (рис.2а). Схематическая иллюстрация такого сдвига приведена на рис. 2б.

4. Температурная зависимость теоретической прочности на сдвиг

Для того чтобы кристаллическая решетка потеряла устойчивость за счет относительного сдвига одной атомной плоскости относительно другой необходимо преодоление определенного потенциального барьера за счет приложения внешней механической энергии. Следует предположить, что чем выше температура эксперимента, тем ниже “высота” этого барьера, так как высокая температура означает высокую среднюю кинетическую энергию тепловых колебаний атомов, а значит, меньшая внешняя дополнительная механическая энергия может понадобиться для образования неустойчивости кристаллической решетки. Действительно, понижение теоретической прочности с ростом температуры было продемонстрировано для многих материалов [8, 9, 14].

Для сплавов γ -Ni₃Al и β -NiAl теоретическая прочность на сдвиг также убывает с ростом температуры. Действительно, на рис. 3 представлена зависимость критического сдвигового напряжения от температуры. Температура нормирована на температуру плавления соответствующего сплава, а τ на соответствующее зна-

чение τ_c^0 при нулевой температуре. Следует отметить, что характер убывания τ_c близок к линейному, что так же было характерно для теоретической прочности на сдвиг алюминия, меди и кремния [8, 14]. Для γ -Ni₃Al скорость убывания τ_c с температурой такова, что при комнатной температуре τ_c на 4% ниже, чем при 0 K, а для β -NiAl - на 5%. Следует отметить, что аналогичное снижение прочности на сдвиг в случае алюминия и меди составляло 25% и 22% соответственно, что можно объяснить их более низкой температурой плавления по сравнению с интерметаллидными сплавами, рассматриваемыми в настоящей работе. Полученные кривые можно аппроксимировать зависимостями вида $\tau_c/\tau_c^0 = 1 - k \times T/T_m$, с коэффициентом k , равным 0.28 и 0.62, для γ -Ni₃Al и β -NiAl соответственно (у чистого ГЦК алюминия $k = 0.71$ [8]). Так как коэффициент k представляет собой относительную скорость убывания с ростом температуры, то можно отметить, что влияние температуры на теоретическую прочность сплава γ -Ni₃Al является наименьшим.

Отличительной чертой влияния температуры на процесс потери устойчивости сплавов γ -Ni₃Al и β -NiAl является очень слабая зависимость критической деформации от температуры (рис. 4). Действительно, для однокомпонентных материалов, критическая деформация нелинейно убывает с ростом температуры. Так, например, для чистого алюминия при комнатной температуре она на 18% ниже, чем при 0 K. Однако, как видно из рис. 4, для рассматриваемых сплавов γ_c слабо меняется с ростом температуры. Для γ -Ni₃Al при температурах от 0 до 1200 K значение γ_c находится в интервале шириной менее 1%: от 12.4% до 13.3%, для β -NiAl при температурах от 0 до 1700 K – в интервале шириной менее 2%: от 13.5% до 15.5%.

5. Заключение

Проведенное молекулярно-динамическое моделирование сдвиговой деформации при различных температурах позволило установить некоторые характерные особенности влияния температуры на теоретическую прочность двух интерметаллидных сплавов на основе никеля и алюминия: γ -Ni₃Al и β -NiAl. Установлено, что теоретическая прочность на сдвиг τ_c убывает линейно с ростом температуры, причем относительная скорость убывания прочности на сдвиг у β -NiAl в два раза больше, чем у γ -Ni₃Al. Критическая деформация γ_c обоих сплавов слабо изменяется с температурой и при этом для γ_c не наблюдается монотонной зависимости от температуры.

Работа была поддержана грантом РФФИ 12-02-31519 мол_а.

Литература

1. Minor A., Asif S. S., Shan Z. et al. Nat. Mater. **5**, 697 (2006).
2. Bei H., Shim S., George E. et al. Phys. Rev. B. 060103 (2007).
3. Greer J. R., Hosson J. T. D. Progress in Materials Science. **56**, 654 (2011).
4. Zhu T., Li J. Progress in Materials Science. **55**, 710 (2010).

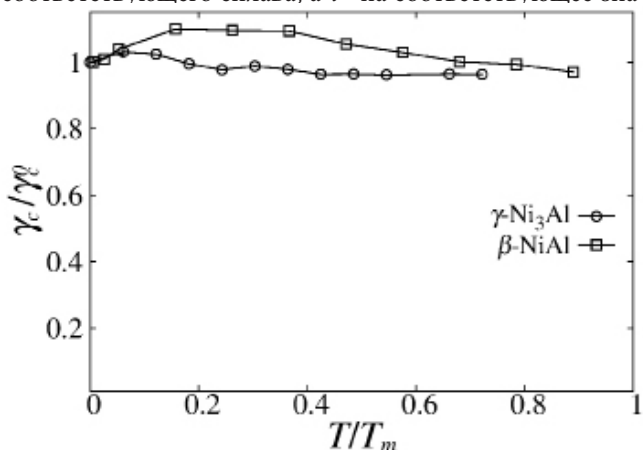


Рис. 4. Зависимость критической деформации сдвига γ_c от температуры T для γ -Ni₃Al (○) и β -NiAl (□). γ_c^0 - теоретическая прочность на сдвиг при 0 K, T_m - температура плавления.

5. Umeno Y., ShiiharaY., Yoshikawa N. J. Phys.: Condens. Matter. **23**, 385401 (2011).
6. Umeno Y., Cerny M. Phys. Rev. B. **77**, 100101 (2008).
7. Zhu T., Li J., Samanta A. et al. Phys. Rev. Lett. **100**, 025502 (2008).
8. Iskandarov A.M., Dmitriev S.V., and Umeno Y. Phys. Rev. B **84**, 224118 (2011).
9. Iskandarov A.M., Umeno. Y., Dmitriev S.V. Letters on materials. **1**, 143 (2011)(in Russian) [Искандаров А.М., Умено Ё., Дмитриев С.В. Письма о материалах. 2011. **1**, 143 (2011)].
10. Y. Mishin. Acta Mat. **52**, 1451 (2004).
11. G.P. Purja Pun, Y. Mishin, Phil. Mag. **89**, 3245 (2009).
12. M.S. Daw, M. Baskes, Phys. Rev. B. **29**, 6443 (1984).
13. Iskandarov A. M., Dmitriev S. V., Umeno Y. Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering. **6**, 29 (2012).
14. Iskandarov A.M., Umeno Y. Fundamental problems of modern materials science. **9**, 89 (2012) (in Russian) [Искандаров А.М., Умено Ё. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **9**, 89 (2012)].