

М. И. ЗАХАРОВА, Х. Э. ФУЭНТЕС

ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАПРАВЛЕНИЙ ЛЕГКОГО СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В О.Ц.К.-РЕШЕТКЕ СПЛАВА ТИТАНА С 40% НИОБИЯ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 12 VI 1975)

При дифракции рентгеновских лучей и электронов на кристаллах чистых элементов Fe, Al, Si, а также на кристаллах сплавов на основе Ti и Zr и на KNbO_3 на рентгенограммах и электронограммах кроме максимумов от трехмерной решетки наблюдаются линии диффузной интенсивности. Их появление обусловлено смещением атомов вдоль плотно упакованных направлений $\langle 111 \rangle$, о.ц.к.-решетки. Это приводит к образованию линейных дефектов, коррелированных в малых объемах, что и вызывает появление диффузных линий ^(1, 2).

Если смещаются атомы одного элемента, как это имеет место в чистых металлах, то интенсивность вдоль диффузной линии остается постоянной. Если смещаются атомы разных элементов, как это происходит в сплавах на стадии предвыделения, то наблюдается модуляция интенсивности вдоль диффузных линий. Расположение диффузных линий зависит от ориентировки кристалла.

Определение кристаллографических направлений наименьшей стабильности атомов представляет несомненный интерес для изучения начальной стадии пластической деформации и стадии предвыделения при распаде пересыщенных твердых растворов.

Де Фонтейн ⁽³⁾ разработал метод нахождения в о.ц.к.-решетке областей возможных механических нестабильностей, применяя выражение для свободной энергии ⁽⁴⁾ без учета флуктуации концентрации компонент:

$$F = \frac{N}{2} \sum_{i,j}^s \sum_h \Phi_{ij}(h) U_i^*(h) U_j(h), \quad (1)$$

где N — число атомов в рассматриваемом объеме, $U_i(h)$ — Фурье-образ векторов смещения атомов; суммирование проводится по всем точкам $(h = (h_1, h_2, h_3))$ обратного пространства, принадлежащим первой зоне Бриллюэна. Для стабильных структур динамическая матрица $\Phi_{ij}(h)$ должна иметь положительные собственные значения $\lambda_i(h)$ во всех точках обратного пространства ⁽⁴⁾.

В данной работе проводился расчет собственных значений динамической матрицы для сплава Ti—40 ат. % Nb в гармоническом приближении с использованием упругих модулей, измеренных для этого сплава в работе ⁽⁵⁾. Распределение минимальных собственных значений динамической матрицы сопоставлялось с картиной дифракции электронов для того же сплава.

После закалки с высоких температур в сплаве Ti—40% Nb была обнаружена только β -фаза с о.ц.к.-структурой ⁽⁵⁾.

Расчет проводился в приближении, учитывающем две первые координационные сферы. В этом приближении матричные элементы динамической матрицы для о.ц.к.-решетки даются выражениями (2)

$$\begin{aligned} \Phi_{ii} &= 8\alpha_1(1 - \cos \pi h_i \cos \pi h_j \cos \pi h_k) + 2\alpha_2(1 - \cos 2\pi h_j) + \\ &\quad + 2\beta_2(2 - \cos 2\pi h_j - \cos 2\pi h_k), \\ \Phi_{ij} &= 8\gamma_1 \sin \pi h_i \sin \pi h_j \cos \pi h_k. \end{aligned} \quad (2)$$

Расчеты проводили для плоскости (110) обратной решетки. В этой плоскости, вследствие ее симметрии, один из поляризационных векторов нормален к ней.

Значения атомных силовых постоянных α_1 , α_2 , β_2 и γ_1 получаются из экспериментальных значений модулей упругости c_{11} , c_{44} и c' с помощью соотношения длинных волн:

$$2\alpha_1 + 2\alpha_2 = ac_{11}; \quad (3a)$$

$$2\alpha_1 + 2\beta_2 = ac_{44}; \quad (3б)$$

$$2(\alpha_1 - \gamma_1) + \alpha_2 + \beta_2 = ac'. \quad (3в)$$

Параметр решетки a при расчете принимался равным $a = 3,285$ Å. Расчеты проводили на ЭВМ БЭСМ-4.

Постоянная α_2 менялась от значения $\alpha_2 = \alpha_1$ до $\alpha_2 = -1$. Из уравнения (3a) получаем значение α_1 , а из уравнений (3б) и (3в) определяются β_2 и γ_1 . Для сплава Ti-40% Nb при значениях $\alpha_1 = 3,52$; $\alpha_2 = -1$; $\beta_2 = 3,2$; $\gamma_1 = 1,1$ получают участки отрицательных собственных значений, однако при этом контуры одинаковых собственных значений не дают распределение, согласующееся с экспериментально наблюдаемой картиной дифракции электронов⁽⁶⁾. Согласие с экспериментом дал вариант, при котором принималось $\alpha_1 = 2,565$; $\alpha_2 = 0$; $\beta_2 = -1,915$; $\gamma_1 = -1,238$.

Сечение плоскости (110) дано на рис. 1. Жирной линией указана первая зона Бриллюэна, области минимальных собственных значений заштрихованы. Из рис. 1 видно, что они образуют сложные фигуры, напоминающие ромбы. Эти фигуры центрированы в сверхструктурных узлах 111, 001 и т. д. и их стороны почти параллельны направлениям $\langle 112 \rangle$. Необходимо отметить, что расчет выявил также области минимальных собственных значений вокруг узлов матрицы; эти области по форме подобны экспериментально наблюдаемому диффузному рассеянию около узлов матрицы⁽⁶⁾; на рис. 1 они заштрихованы жирными линиями. Поляризационный вектор в области минимальных собственных значений направлен вдоль $\langle 111 \rangle$.

Таким образом, для сплава Ti-40 ат. % Nb получено распределение минимальных собственных значений динамической матрицы в плоскости (110) обратной решетки, согласующееся с экспериментально наблюдаемой картиной диффузного рассеяния электронов. Следовательно, путем расчетов в о.ц.к.-структурах титановых сплавов можно определить направления и области неустойчивости кристаллической решетки.

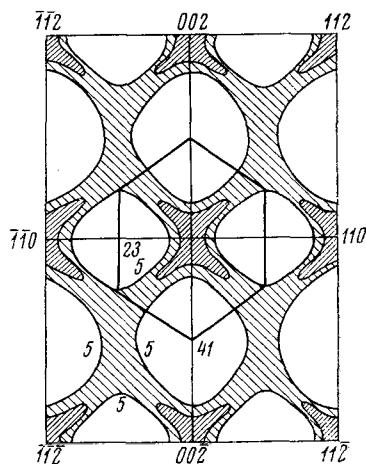


Рис. 1

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
20 V 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ G. Honjo, S. Kadera, N. Kitamura, J. Phys. Soc. Japan, v. 19, 351 (1964).
- ² Ф. Денуайе, М. Ламбер и др., Кристаллография, т. 16, № 6 (1971). ³ D. de Fontain, Acta metallurgica, v. 18, 275 (1970). ⁴ H. E. Cook, D. de Fontain, Acta Metallurg., v. 17, 765 (1969). ⁵ C. N. Reid, I. L. Routbort, R. A. Maynard, J. Appl. Phys., v. 44, 1398 (1973). ⁶ Ю. Д. Тяпкин, Е. И. Налиенко, ФММ, т. 36, 1260 (1973).