

ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ СВЕРХСТРУКТУР

Баранов М.А., Дубов Е.А. *e-mail*: fap@agtu.secna.ru

Алтайский государственный технический университет, 656038, г. Барнаул, Россия,

Аннотация. Устойчивое состояние низкосимметричной кристаллической решетки упорядоченного сплава достигается в результате незначительных искажений его элементарных ячеек, обусловленных смещениями атомов относительно узлов геометрически правильной решетки. Равномерное распределение статических смещений атомов по объёму кристалла и их независимость от предыстории образца (его термомеханической обработки, условий эксплуатации соответствующих деталей) являются причиной того, что статические смещения атомов оказываются важным фактором упрочнения низкосимметричных кристаллов. Количественное описание статических искажений элементарных ячеек выполнено для сплавов $AlTi_3$ со сверхструктурой $D0_{19}$ и $TiNi_3$ со сверхструктурой $D0_{24}$ на основе гексагональной решетки узлов. На примере моделирования равновесных конфигураций вакансий в сплавах со сверхструктурами $D0_{19}$ и $D0_{24}$ показано, что игнорирование сверхструктурных статических искажений решетки при изучении низкосимметричных кристаллов может привести к ошибочным результатам и даже к артефактам.

Введение

К настоящему времени общепризнано [1-3], что более высокие прочностные свойства упорядоченных сплавов объясняются присутствием в них дефектов специфического типа – антифазных границ, сверхчастичных дислокаций, дефектов замещения и др. Вблизи этих дефектов возникают дополнительные по сравнению с металлами и неупорядоченными сплавами искажения решетки, которые вызывают торможение дислокаций и упрочнение кристалла. Сказанное в полной мере относится к сплавам высокосимметричных сверхструктур – $B2$, $L1_2$, $L1_0$ и др. т.е. таких, в которых каждый атом совершенного кристалла имеет симметричное окружение другими атомами. В кристаллах низкосимметричных сверхструктур – $D0_3$, $L2_1$, $D0_{19}$ и многих других вследствие асимметричного расположения атомов по узлам элементарной ячейки стабильное состояние кристаллической решетки достигается в результате её искажений. Эти искажения справедливо назвать сверхструктурными, поскольку они характерны для кристалла рассматриваемой сверхструктуры независимо от её предыстории. Смещения атомов, обусловленные сверхструктурными искажениями незначительны по сравнению с межатомными расстояниями. Однако, будучи равномерно распределенными по всему объёму кристалла, они становятся важным фактором его упрочнения. Величина статических смещений атомов, обусловленных сверхструктурными искажениями может быть измерена экспериментально с помощью, например, дифрактометрических методов [4]. Однако, вследствие малости этих смещений, точность измерений должна быть достаточно высокой. Альтернативным методом исследования сверхструктурных искажений является компьютерное моделирование. Рассмотрим применение данного метода на примере сверхструктур $D0_{19}$ и $D0_{24}$.

Устойчивость кристаллических решеток сплавов со сверхструктурами $D0_{19}$ и $D0_{24}$.

Стехиометрическая формула сверхструктур $D0_{19}$ и $D0_{24}$ – AB_3 [5]. Их строение можно представить в виде уложенных в стопку одинаковых слоев гексагональной конфигурации. Каждый из слоев заполнен атомами сортов А и В в стехиометрическом соотношении. При этом атомы сорта А также образуют гексагональную сетку с размером ячейки вдвое превышающем расстояние между ближайшими атомами в слое. Последовательность укладки слоев в сверхструктуре $D0_{19}$...*abababab*... и соответствует укладке слоев решетки ГПУ металла, а в сверхструктуре $D0_{24}$ - ...*abacabacabac*... и соответствует укладке слоев в решетке α -лантана. Таким образом, вследствие близости кристаллогеометрического строения указанных сверхструктур имеет смысл применение единого подхода к их рассмотрению.

Элементарная ячейка той и другой сверхструктуры может быть выбрана в виде 120-градусной призмы, расположенной в четырех близлежащих слоях. В качестве размеров элементарных ячеек данных сверхструктур обычно принимается a_0 – расстояние между бли-

жайшими атомами сорта А в базисном слое и c_0 – толщина кристалла, приходящаяся на четыре базисных слоя. Обычно вместо c_0 используется осевое соотношение $\eta=c_0/a_0$. То есть, в сверхструктурах $D0_{19}$ и $D0_{24}$ имеется выделенное направление – нормаль к базисной плоскости (0001), что свидетельствует об анизотропии таких кристаллических решеток.

Устойчивое состояние гексагональных кристаллов при экспериментально наблюдаемых размерах элементарных ячеек, вообще говоря, невозможно описать в рамках модели сферически симметричных центральных парных потенциалов. Очевидно что нецентральность межатомных взаимодействий является причиной анизотропии данных кристаллов и, в свою очередь, обусловлена несферичностью электронных оболочек атомов.

В [6-7] для описания межатомных взаимодействий в ГПУ металлах предложена потенциальная функция, зависящая не только от длины r вектора \mathbf{r} межатомной связи, но и от его направления

$$\varphi(\vec{r}) = (1 + \xi \cdot \cos^2 \theta) \cdot \varphi_M(r) \quad (1)$$

где θ – угол между вектором межатомной связи и главной осью кристалла,

$$\varphi_M(r) = D\beta e^{-\alpha r} (\beta e^{-\alpha r} - 2) \quad (2)$$

- потенциальная функция Морза, традиционно применяемая для моделирования дефектов кубических кристаллов; ξ, α, β, D – параметры. В [7] потенциальная функция (1) была применена к определению модулей упругости сплавов со сверхструктурами $D0_{19}$ и $D0_{24}$. Потенциалы, связывающие атомы одинакового сорта полагались теми же самыми, что и в чистых металлах. Параметры потенциалов, связывающих атомы различного сорта, определялись из условий устойчивости кристаллической решетки сплава при экспериментально наблюдаемых размерах элементарных ячеек. Эти условия могут быть записаны в виде

$$\left. \begin{aligned} U_{\text{all}}(a_0, \eta) &= -(n_A E_A + n_B E_B + H_{\text{all}}) = -E_{\text{cell}} \\ \frac{dU_{\text{all}}(a_0, \eta)}{da_0} &= 0 \\ \frac{dU_{\text{all}}(a_0, \eta)}{d\eta} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где $E_{\text{яч}}$ – энергия связи сплава в расчете на ячейку; E_A и E_B – энергии связи металлов А и В; n_A и n_B – числа атомов сорта А и В элементарной ячейки; $H_{\text{спл}}$ – теплота сплавления, которая для различных сплавов по порядку величины составляет 3–5% от суммарной энергии связи компонент. $U_{\text{спл}}(a_0, \eta)$ – внутренняя энергия сплава в расчете на элементарную ячейку, представленная в виде суммы энергий парных межатомных взаимодействий вида (1)

$$U_{\text{спл}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \varphi_{(p_i), (q_j)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (4)$$

где i – номер узла элементарной ячейки единицы, а j – номер узла решетки из окружения i -го; p_i и q_j – сорта атомов, находящихся в i -ом и j -ом узлах. То есть, пара индексов p_i и q_j определяет сорт межатомного потенциала А-А, А-В или В-В. При этом в (4) учитывались взаимодействия атомов вплоть до шестой координационной сферы, что в гексагональных кристаллах составляет 38 межатомных связей каждого атома с кристаллом. Для сравнения: трехсферные потенциалы в ГЦК и ОЦК решетках, обычно используемые при моделировании дефектов учитывают взаимодействия с 42 и 26 соседями соответственно.

Для того чтобы обеспечить устойчивость решетки сплава с заданной сверхструктурой относительно перехода в неупорядоченное состояние или в состояние с другим упорядоченным расположением атомов использовался критерий приемлемости величины энергии обра-

зования АФГ в базисной плоскости. Для этой цели имеющиеся экспериментальные данные [8] для некоторых сплавов сравнивались с полученными данными.

В соответствии с данной схемой определены параметры межатомных потенциалов, связывающих атомы всевозможных сортов в некоторых сплавах со сверхструктурами DO_{19} и DO_{24} . Значения этих параметров, как и экспериментальные данные о размерах элементарных ячеек сплавов приводятся в таблице 1. Вид межатомных потенциалов для сплава $TiNi_3$ приводится на рис 1.

Наиболее наглядное представление о поведении межатомных потенциалов, связывающих атомы всевозможных сортов можно получить из рассмотрения их линий постоянных значений. Для сплава $TiNi_3$ они приводятся на рис.2. Как видно из рис.2(а) для сферически симметричного потенциала Ni-Ni линии постоянных значений являются окружностями. Минимумы потенциалов Ti-Ti и Ni-Ni достигаются в направлениях, параллельных базисной плоскости, что характерно и для металлов, имеющих осевое соотношение $\eta < 1,633$. В металлах и сплавах с $c_0/a_0 > 1,633$ соответствующие минимумы достигаются в направлениях, параллельных оси Z.

Таблица 1. Исходные экспериментальные значения и параметры межатомных потенциалов (3) для сплавов со сверхструктурами DO_{19} и DO_{24}

Сплав, Сверхструктура	Исходные данные, источник		Сорт связи	Параметры потенциала			
	$a_0, \text{Å}$	$\eta_{\text{эксп.}}$		ξ	$\alpha, \text{Å}^{-1}$	β	D, эВ
$WC_{03},$ DO_{19}	5.13 [5]	1.61014 [5]	Co-Co	-0.25480	1.41228	45.8561	0.53795
			Co-W	-0.30481	1.77388	115.6713	0.93372
			W-W	0.0	1.40873	62.6848	1.13016
$MoCo_{03},$ DO_{19}	5.13 [9]	1.60624 [9]	Co-Co	-0.25480	1.41228	45.8561	0.53795
			Co-Mo	-0.36151	1.84795	137.4457	0.84389
			Mo-Mo	0.0	1.45763	69.7440	0.90043
$AlTi_{03},$ DO_{19}	5.793 [10]	1.60711 [10]	Ti-Ti	-0.46777	1.04914	30.1143	0.58133
			Ti-Al	-0.09798	1.82980	212.2137	0.58968
			Al-Al	0.0	1.02635	27.4642	0.31789
$TiNi_{03},$ DO_{24}	5.101 [5]	1.62845 [5]	Ni-Ni	0.0	1.36720	41.2911	0.47119
			Ni-Ti	-0.28935	1.02725	21.3633	0.53333
			Ti-Ti	-0.46777	1.04914	30.1143	0.58133
$HfPd_{03},$ DO_{24}	5.595 [9]	1.64290 [9]	Pd-Pd	0.0	1.54072	86.0102	0.48587
			Pd-Hf	-0.13945	1.28686	48.5459	0.71841
			Hf-Hf	-0.48839	0.97173	30.3060	0.76712
$TiPd_{03},$ DO_{24}	5.489 [9]	1.63308 [9]	Pd-Pd	0.0	1.54072	86.0102	0.48587
			Pd-Ti	-0.41789	1.25706	40.8011	0.61751
			Ti-Ti	-0.46777	1.04914	30.1143	0.58133
$ZrPd_{03},$ DO_{24}	5.612 [9]	1.64558 [9]	Pd-Pd	0.0	1.54072	86.0102	0.48587
			Pd-Zr	0.00859	1.31860	54.2784	0.62937
			Zr-Zr	-0.44977	0.83723	21.4452	0.68484
$HfPt_{03},$ DO_{24}	5.636 [9]	1.63378 [9]	Pt-Pt	0.0	1.57871	97.7855	0.73741
			Pt-Hf	-0.25095	1.26331	47.0464	0.89364
			Hf-Hf	-0.48839	0.97173	30.3060	0.76711
$ZrPt_{03},$ DO_{24}	5.644 [9]	1.63448 [9]	Pt-Pt	0.0	1.57871	97.7855	0.73741
			Pt-Zr	-0.11256	1.45287	77.2155	0.83368
			Zr-Zr	-0.44977	0.83723	21.4452	0.68484

Построенные межатомные потенциалы были подвергнуты последующей проверке. С этой целью находился минимум внутренней энергии (4) по параметрам a_0 и η при постоянных ξ , α , β , D. Это минимальное значение сравнивалось с энергией связи ячейки $E_{\text{яч}}$, а зна-

чения $a_{0\min}$ и η_{\min} , при которых достигался минимум внутренней энергии – с соответствующими экспериментальными значениями a_0 и $\eta_{\text{эксп}}$. Для всех сплавов из таблицы 1 отклонения указанных величин от заложенных в систему (3) при построении потенциалов наблюдались не менее чем в шестой значащей цифре.

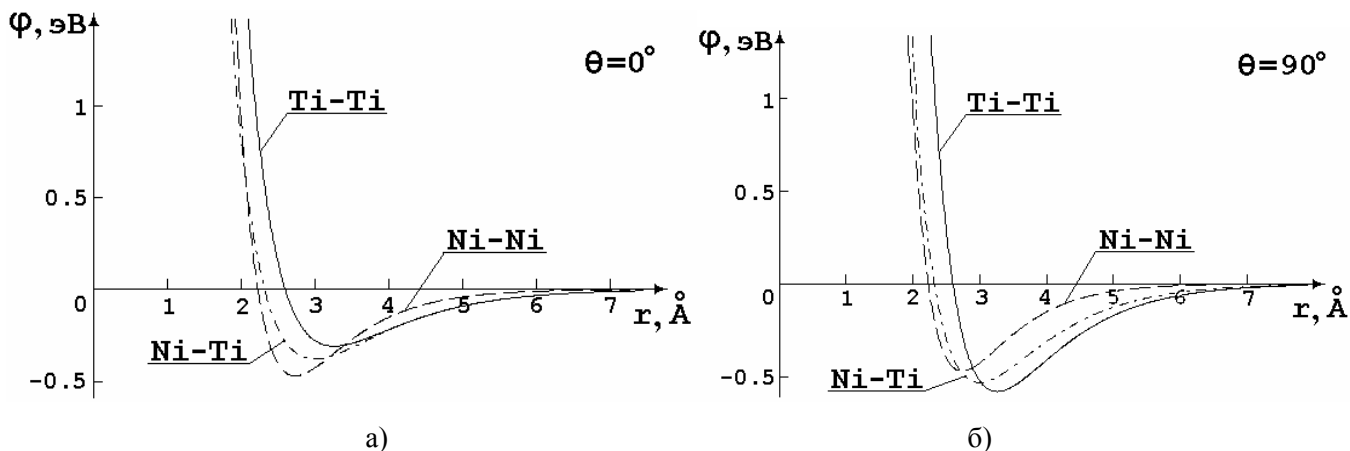


Рис.1. Вид межатомных потенциалов в сплаве TiNi_3 . а) $\theta=0^\circ$; б) $\theta=90^\circ$.

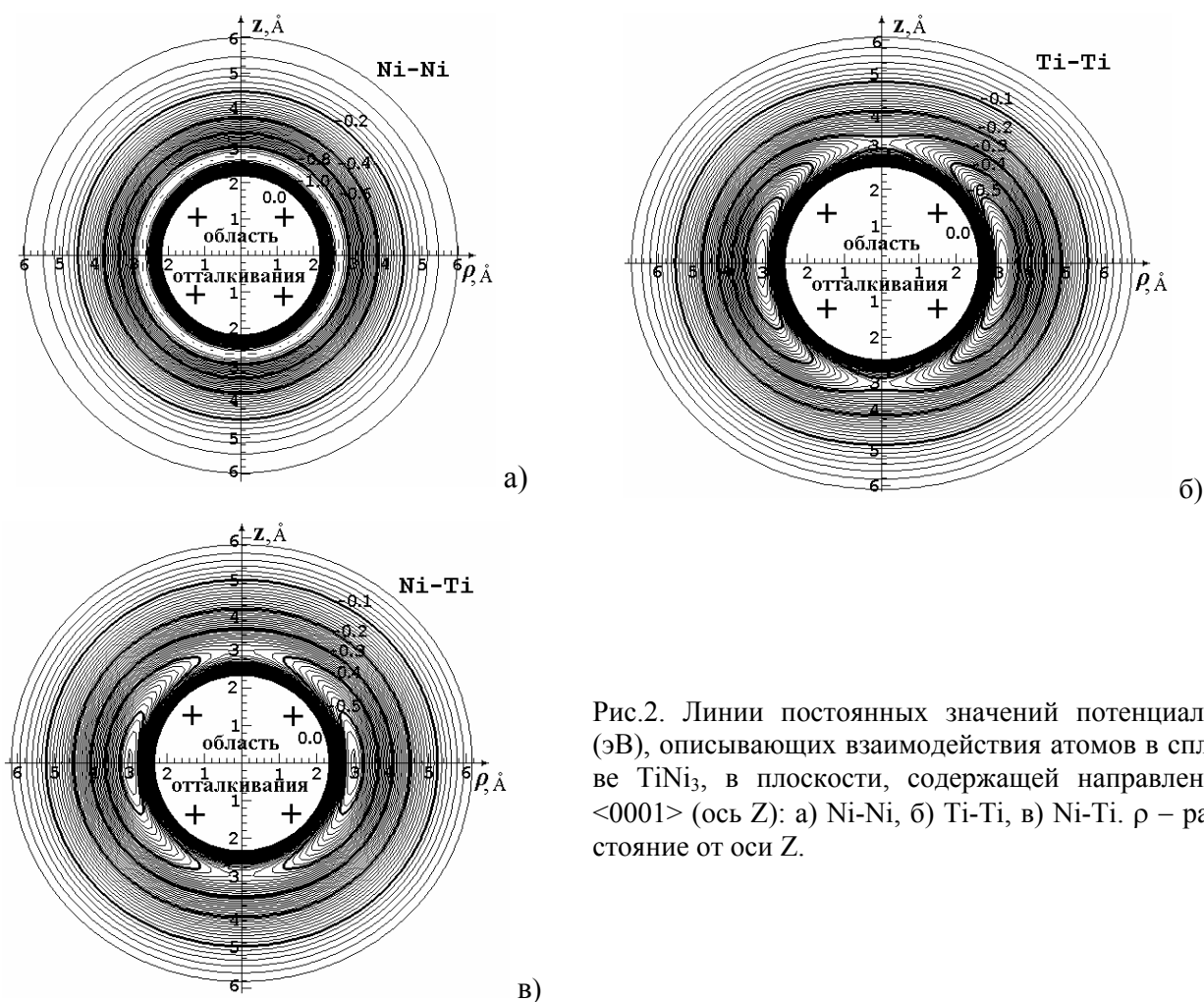


Рис.2. Линии постоянных значений потенциалов (эВ), описывающих взаимодействия атомов в сплаве TiNi_3 , в плоскости, содержащей направление $\langle 0001 \rangle$ (ось Z): а) Ni-Ni, б) Ti-Ti, в) Ni-Ti. ρ – расстояние от оси Z .

Сверхструктурные искажения решетки

Таким образом, в рамках предложенной модели удастся объяснить устойчивое состояние заданной сверхструктуры при условии того, что ядра атомов, образующих кристалл находятся в узлах идеальной решетки. Однако, как указывалось выше, более стабильное состояние кристаллов низкосимметричных сверхструктур, какими являются $D0_{19}$ и $D0_{24}$ достигается в результате незначительных искажений элементарных ячеек. Компьютерная модель искаженного кристалла была получена с помощью т.н. метода сверхструктурной релаксации (ССР). Метод базируется на предположении о том, что в упорядоченном кристалле, не содержащем дефектов, окружение каждого атомов одной подрешетки одинаково, а «средние» значения размеров элементарных ячеек остаются теми же, что и до сверхструктурной релаксации. Каждой подрешетке как единому целому предоставлялась возможность смещаться в направлении действующих на неё сил со стороны других подрешеток вплоть до достижения стабильнейшего состояния. Сверхструктура $D0_{19}$ представлялась состоящей из восьми подрешеток, а $D0_{24}$ – из шестнадцати. Величины E_{sr} понижения внутренней энергии сплавов, полученные в результате сверхструктурной релаксацией в расчете на структурную единицу AB_3 (4 атома) приведены в таблице 2.

Таблица 2. Энергия сверхструктурной релаксации E_{sr} и теплоты сплавления некоторых сплавов со сверхструктурами $D0_{19}$ и $D0_{24}$, эв./стр.ед.

Сплав, сверхстр-ра	WCo ₃ D0 ₁₉	MoCo ₃ D0 ₁₉	AlTi ₃ D0 ₁₉	TiNi ₃ D0 ₂₄	TiPd ₃ D0 ₂₄	HfPd ₃ D0 ₂₄	ZrPd ₃ D0 ₂₄	HfPd ₃ D0 ₂₄	ZrPt ₃ D0 ₂₄
E_{sr}	0.0241	0.0123	0.0276	0.0025	0.0015	0.0158	0.0464	0.0101	0.0071
$H_{спл}$	-	-	1.042	1.450	-	-	-	-	-

Из рассмотрения таблицы 2 видно, что по порядку величины энергия сверхструктурной релаксации незначительна и составляет 0,3 – 3% от величины теплоты сплавления. Фактически энергия сверхструктурной релаксации представляет собой часть теплоты сплавления, выделившейся при искажении решетки. Поскольку искажения решетки оказывают непосредственное влияние на упрочнение кристалла, то величину E_{sr} можно трактовать как энергию упрочнения. Однако, если при деформационном или термическом упрочнении происходит повышение внутренней энергии кристалла, то в результате сверхструктурных искажений – понижение таковой. Поэтому решетка низкосимметричного кристалла, вообще говоря, не может быть совершенной, и, следовательно, не может быть переведена в состояние совершенной путем термомеханической обработки или в процессе эксплуатации деталей, имеющих в своем составе соответствующие фазы.

Картины искажений решеток сплавов AlTi₃ и TiNi₃, обусловленные сверхструктурной релаксацией приводятся на рис. 3-4 в виде проекций кристаллической решетки на плоскость заданной ориентации. Положения атомов различного сорта изображались кружками различной окраски. Здесь же приводятся проекции векторов атомных смещений, которые, ввиду их малости, изображались увеличенными в целое число раз (масштаб атомных смещений).

Из сопоставления данных таблицы 2 и полученных картин искажений можно сделать вывод о существовании корреляции между величиной атомных смещений и величиной энергии сверхструктурной релаксации – при возрастании E_{sr} увеличивается и амплитуда смещений. Векторы атомных смещений расположены преимущественно в базисной плоскости под углом 60° друг к другу.

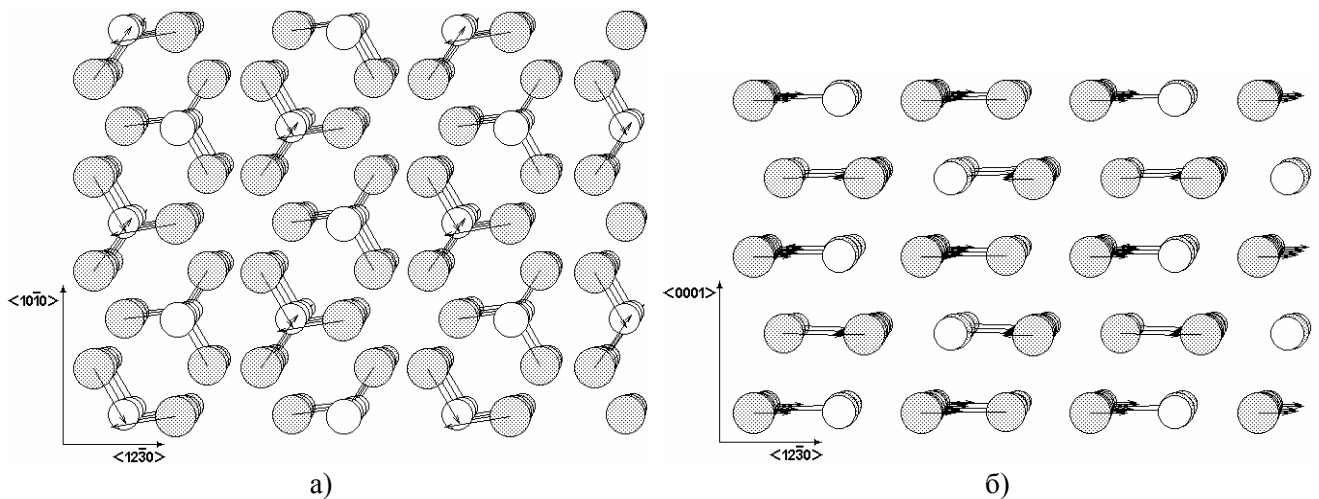


Рис. 3. Проекция кристаллической решетки сплава AlTi_3 со сверхструктурой $D0_{19}$ на плоскость (0001) – а) и плоскость $(2\bar{1}\bar{1}0)$ – б). \bullet – атом Ti, \circ – атом Al. Масштаб атомных смещений 60:1.

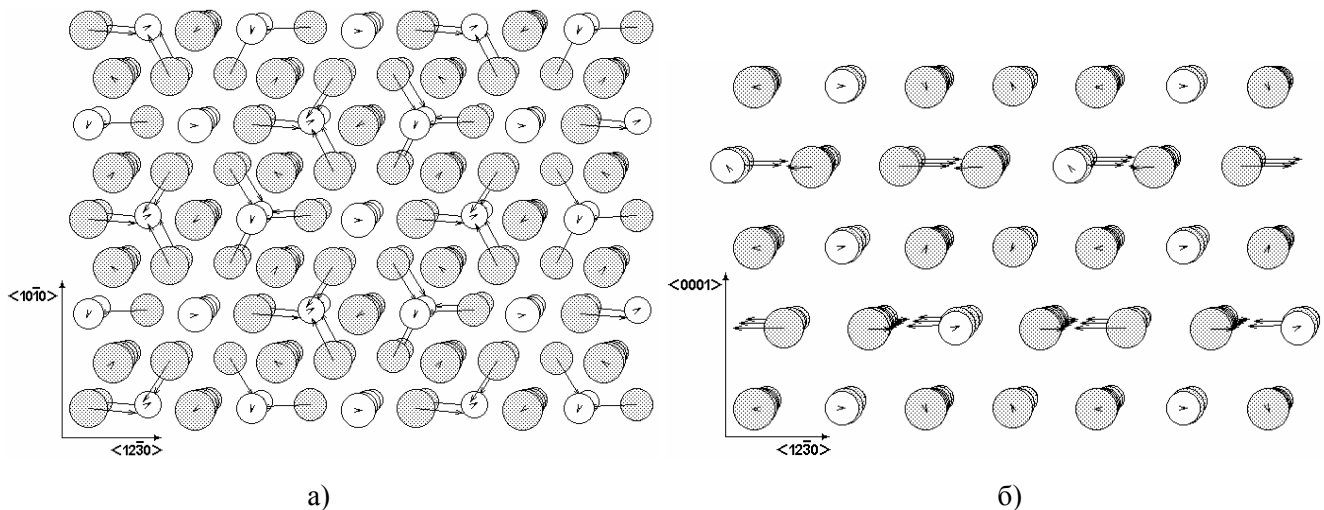


Рис. 4. Проекция кристаллической решетки сплава TiNi_3 со сверхструктурой $D0_{24}$ на плоскость (0001) – а) и плоскость $(2\bar{1}\bar{1}0)$ – б). \bullet – атом Ni, \circ – атом Ti. Масштаб атомных смещений 60:1.

Моделирование вакансий

Влияние сверхструктурных искажений низкосимметричных кристаллов необходимо учитывать при изучении большинства их физико-механических свойств. В частности, при построении равновесных конфигураций дефектов необходимо предварительно выполнять поиск стабильнейшего состояния кристаллической решетки с помощью, например, сверхструктурной релаксации. Если этого не сделать, то можно прийти к ошибочным выводам и, более того – к артефактам. Действительно, при выполнении поиска равновесной конфигурации дефекта происходит понижение внутренней энергии расчетного блока вследствие релаксации, обусловленной не только присутствием дефекта, но и в результате сверхструктурных искажений. Поясним сказанное на примере вакансий.

Моделирование одиночных вакансий, как в металлах, так и в сплавах, выполнялось в соответствии с одной и той же процедурой. Для этого в памяти компьютера формировался образ шарообразного блока кристалла металла или сплава с заданной сверхструктурой. Блок, в свою очередь, представлялся состоящим из двух концентрических областей. Радиус внутренней области полагался слегка превышающим утроенное значение r_A – радиуса действия потенциала. Внешний радиус выбирался равным $5 r_A$. Внешняя область располагалась в пространстве между сферами. Стартовая конфигурация вакансии формировалась путем удаления атома из центра блока и перенесения его на поверхность кристалла. При этом восстанав-

ливалась ровно половина оборванных связей. В результате стартовое значение энергии образования вакансии E_{vs}^f оказывалось равным энергии сублимации атома данного сорта и находящегося на той же подрешетке. Рассматривались вакансии, как в упомянутых выше сплавах так и в чистых металлах – компонентах сплавов. При этом в металлах все узлы решетки эквивалентны для расположения вакансии, а в упорядоченных сплавах имеется несколько существенно различающихся положений узлов. В частности, для сверхструктуры $D0_{19}$ эти положения определяются только сортом удаляемого атома, а для $D0_{24}$ как сортом атома, так и сортом слоя (а или b), в котором располагается вакансия. Слои b и c эквивалентны для расположения вакансии. Моделирование вакансий проводилось как с предварительным выполнением сверхструктурной релаксации, так и без такового. Полученные значения энергий образования вакансий для металлов и сплавов приводятся в таблице 3. Здесь же приводятся известные для некоторых металлов экспериментальные значения энергий образования вакансий. Разность между стартовыми значениями E_{vs}^f , полученными как с предварительным выполнением ССР так и без таковой незначительна. Поэтому эти данные объединены в третью колонку таблицы 3.

Из данных таблицы следует, что в решетках, подвергнутых ССР, понижение энергии образования вакансии (столбец 4) на второй стадии релаксации относительно стартового значения мало ($\sim 1-5\% E_{vs}^f$). Поэтому рассчитанные значения энергий образования вакансий оказываются в 2 – 4 раза выше экспериментально наблюдаемых в металлах, которые, в свою очередь, близки к 1эВ. Основной причиной такого различия, по-видимому, является то, что в работе исследовались одиночные вакансии. В реальных же образцах, на которых проводятся экспериментальные исследования, доля таких вакансий ничтожна. Большая часть вакансий адсорбируется в местах с пониженной энергией - на протяженных дефектах решетки – дислокациях, границах зерен, и др. Без учета сверхструктурных искажений релаксационное понижение энергии велико и составляет 20 – 70 % от стартового значения энергии (столбец 5). Однако оно обусловлено не вакансией как таковой, а размерами расчетного блока и происходящей в нем сверхструктурной релаксацией.

На рис. 5 и 6 приводятся картины атомных смещений, возникающих вблизи вакансии в сплавах $AlTi_3$ и $TiNi_3$ полученные с предварительным переводом кристалла в стабильнейшее состояние, а на рис. 7 и 8 – аналогичные картины для тех же сплавов, полученные без проведения ССР.

Как видно из рисунков, вблизи одиночной вакансии, расположенной в решетке сплава, подвергнутого предварительной стабилизации с помощью ССР смещения атомов примерно вдвое меньше, чем вблизи аналогичной вакансии, расположенной в нестабилизированной решетке. Это видно из сравнения масштаба атомных смещений. Величина атомных смещений в стабилизированной решетке убывает по мере удаления атома от вакансии. В нестабилизированной решетке этого не происходит. В целом же результаты моделирования вакансий на базе совершенной решетки следует считать недействительными.

Таким образом, сверхструктурные искажения являются одним из важных факторов, обеспечивающих высокие прочностные свойства упорядоченных сплавов с низкосимметричными сверхструктурами.

Таблица 3. Значения энергий образования в сплавах со сверхструктурами DO₁₉ и DO₂₄ и в металлах – компонентах исследуемых сплавов.

Металл, сплав, тип решетки.	Положение вакансии (сорт ато-ма, слой)	Энергия образования вакансии, эВ			
		Стартовая	Равновесная, с уче-том ССИ	Равновесная, без учета ССИ	Эксперимент
1	2	3	4	5	6
Al, A1	—	3.340	—	3.126	0.70
Ni, A1	—	4.434	—	4.210	1.80
Pd, A1	—	3.936	—	3.828	—
Pt, A1	—	5.852	—	5.706	1.51
Mo, A2	—	6.331	—	5.916	3.00
W, A2	—	8.660	—	7.564	3.60
Co, A3	—	5.598	—	4.262	1.91
Hf, A3	—	6.176	—	6.112	—
Ti, A3	—	4.856	—	4.678	—
Zr, A3	—	6.316	—	6.052	—
AlTi ₃ , DO ₁₉	Al	4.362	4.349	1.314	—
	Ti	4.822	4.810	1.464	—
MoCo ₃ , DO ₁₉	Mo	6.682	6.625	4.200	—
	Co	4.765	4.736	2.534	—
WCo ₃ , DO ₁₉	W	7.986	7.921	4.178	—
	Co	4.982	4.960	1.500	—
HfPd ₃ , DO ₂₄	Hf, a	6.795	6.692	3.470	—
	Hf, b	6.850	6.709	3.869	—
	Pd, a	4.357	4.269	1.228	—
	Pd, b	4.500	4.406	1.459	—
HfPt ₃ , DO ₂₄	Hf, a	7.741	7.571	4.431	—
	Hf, b	7.863	7.645	4.608	—
	Pt, a	6.024	5.855	2.798	—
	Pt, b	6.195	6.014	3.056	—
1	2	3	4	5	6
TiNi ₃ , DO ₂₄	Ti, a	5.411	5.049	1.345	—
	Ti, b	5.668	5.237	1.689	—
	Ni, a	4.400	4.053	0.399	—
	Ni, b	4.628	4.267	0.804	—
TiPd ₃ , DO ₂₄	Ti, a	5.204	5.056	3.895	—
	Ti, b	5.288	5.111	3.943	—
	Pd, a	4.096	3.917	2.730	—
	Pd, b	4.203	4.014	2.903	—
ZrPd ₃ , DO ₂₄	Zr, a	6.308	6.256	3.348	—
	Zr, b	6.304	6.255	3.780	—
	Pd, a	4.182	4.159	1.412	—
	Pd, b	4.315	4.293	1.592	—
ZrPt ₃ , DO ₂₄	Zr, a	7.290	7.201	5.055	—
	Zr, b	7.272	7.157	5.134	—
	Pt, a	5.868	5.794	3.765	—
	Pt, b	5.996	5.922	3.950	—

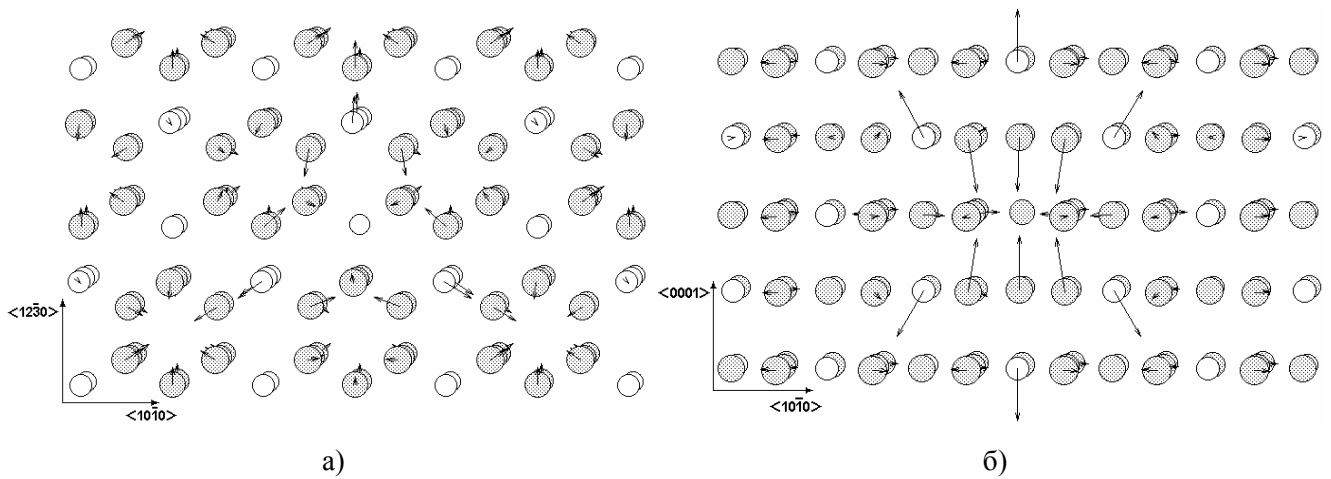


Рис. 5. Равновесные атомные конфигурации вблизи вакансии в сплаве AlTi_3 со сверхструктурой D0_{19} . Вакантный атом – Al. Плоскость рисунка (0001) – а) и $(01\bar{1}0)$ – б). Масштаб атомных смещений 50:1. ● – атом Ti, ○ – атом Al.

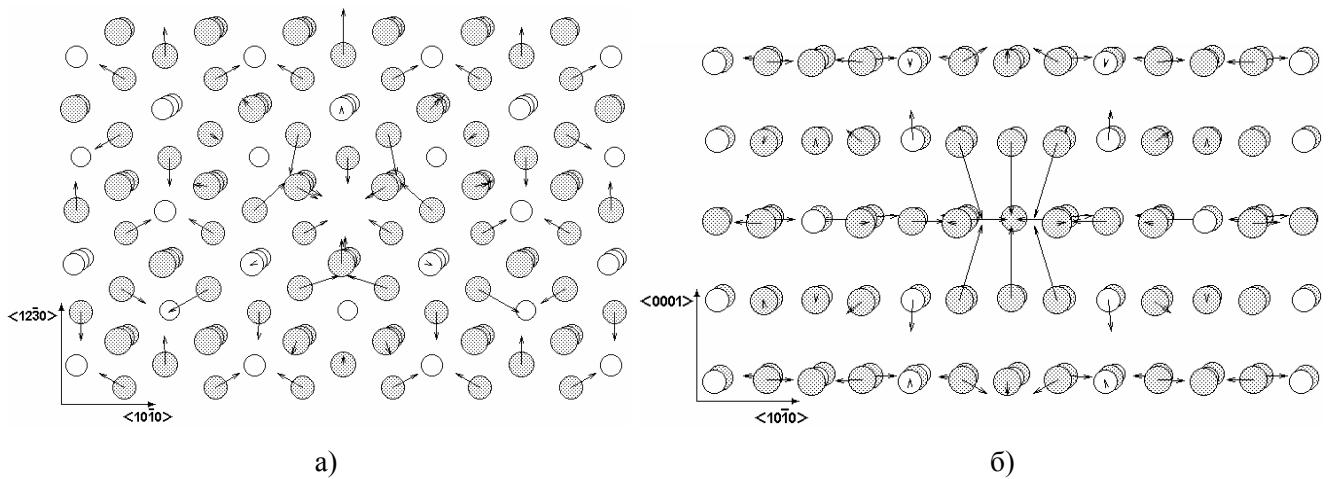


Рис. 6. Равновесные атомные конфигурации вблизи вакансии в сплаве TiNi_3 со сверхструктурой D0_{24} . Вакантный атом – Ti (слой b). Плоскость рисунка (0001) – а) и $(01\bar{1}0)$ – б). Масштаб атомных смещений 50:1. ● – атом Ni, ○ – атом Ti.

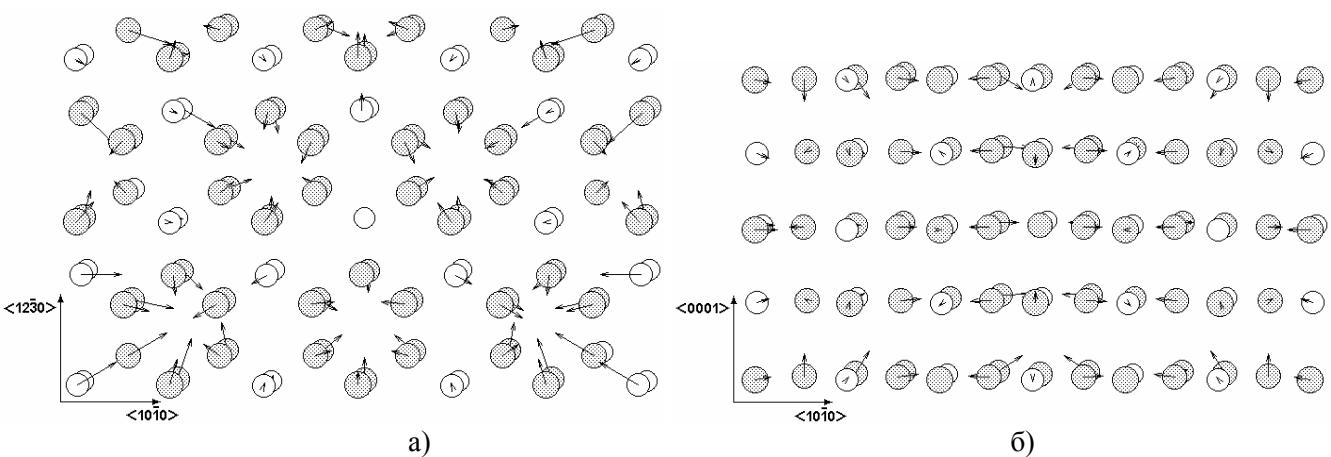


Рис. 7. Равновесные атомные конфигурации кристаллической решетки сплава AlTi_3 вблизи вакансии в положении атома Al, полученные без предварительного перевода решетки в стабильнейшее состояние – а) базисная плоскость; б) призматическая плоскость. Масштаб атомных смещений 20:1.

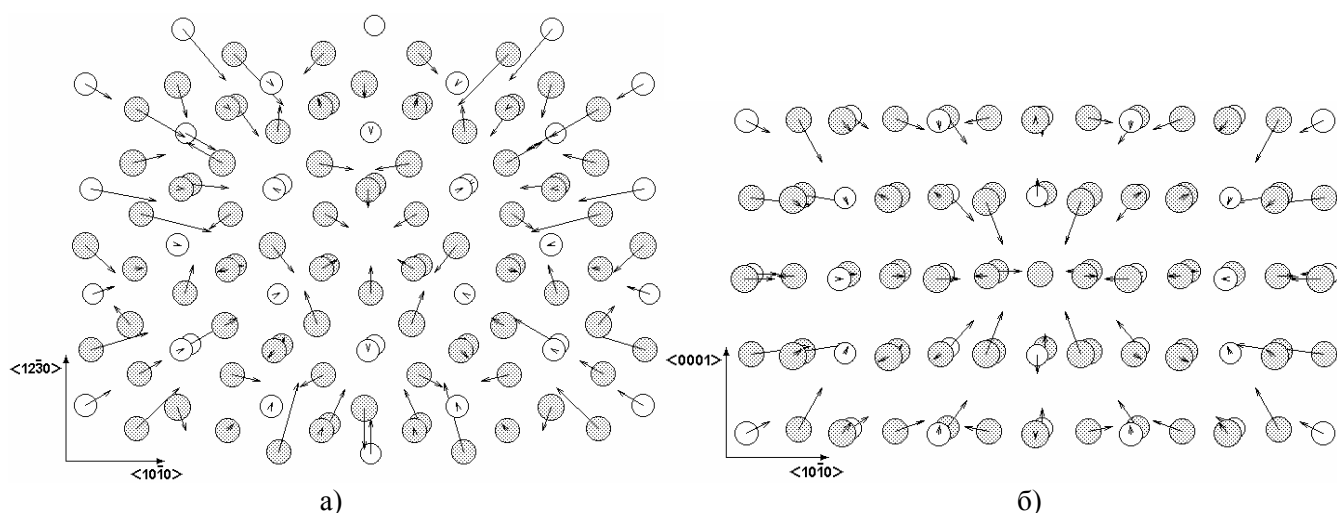


Рис. 8. Равновесные атомные конфигурации кристаллической решетки сплава TiNi_3 вблизи вакансии в положении атома Ti в слое b, полученные без предварительной стабилизации кристалла – а) базисная плоскость; б) призматическая плоскость. Масштаб атомных смещений **20:1**.

Литература

1. Кир Б.Х. Перспективные материалы // В мире науки, 1986, №12, с. 99-108.
2. Штремель М.А. Прочность сплавов. Дефекты решетки. М.: Металлургия. 1982. 280 с.
3. Васильев Л.И., Орлов А.Н. О механизмах упрочнения упорядочивающихся сплавах // ФММ.-1963.-т.15, вып. 3.-с. 481-485.
4. Избранные методы исследования в металловедении / под ред. Г. Хунгера. М.: Металлургия. 1985. с. 381-406.
5. Хансен М., Андроко К. Структуры двойных сплавов: Справочник: в 2 т.: Пер. с англ. П.К. Новика и др.: / Под ред. И.И. Новикова и И.Л. Рогельберга.-2-е изд. перераб.-М.: Металлургия.- 1962.
6. Баранов М.А., Старостенков М.Д., Романенко В.В., Дубов Е.А., Черных Е.В., Крымских А.И. Состояние кристаллической решетки вблизи дефектов упаковки в ГПУ металлах и сплавах.// Известия ВУЗов. Физика. 2000. том 43. № 11. (приложение). с. 38-43.
7. Баранов М.А., Дубов Е.А., Черных Е.В., Сенцова И.В. Упругость фаз со сверхструктурами D0_{19} и D0_{24} , выделяющихся при старении сплава.// Алт. гос. тех. ун-т.- Барнаул, 2003.- 20с.:ил.-Библиогр.: 17 назв. –Рус. – Деп. В ВИНИТИ.10.10.2003№1789-В2003.
8. Носкова Н.И. Дефекты и деформация монокристаллов. Екатеринбург: УрО РАН. 1995. 184 с.
9. Эллиот Р.П. Структуры двойных сплавов: Пер. с англ. – М.: Металлургия. 1970. – т. 1-2.
10. Шанк Ф.А. Структуры двойных сплавов: Пер. с англ. – М.: Металлургия. 1973. – 760 с.

Получено Редакцией 10.10.05.