

ВЛИЯНИЕ ПЛАНАРНЫХ ДЕФЕКТОВ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПРОЦЕССЫ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ В СПЛАВЕ Ni_3Al

Яшин А. В.

Руководитель – доц., к.ф.-м.н., Дудник Е. А.

Рубцовский Индустриальный Институт, г. Рубцовск

Для моделирования процессов разупорядочения использован метод Монте-Карло, который представляет собой стохастическую модель.

Вероятность перехода атома в вакантный узел рассчитывается формулой: $P_i = e^{\frac{\max \Delta F_j - \Delta F_i}{kT}}$, где k – постоянная Больцмана; T (К) – температура; $\max \Delta F_j$ (эВ) – максимальное значение разности свободной энергии; ΔF_i (эВ) – разность свободной энергии для рассматриваемого атома.

Формула расчета свободной энергии для атома имеет вид: $F = E - TS$, где E – потенциальная энергия кристалла; T (К) – температура; S – энтропия.

Для компьютерного эксперимента выбран модельный сплав Ni_3Al . Расчетный блок составляет 864 атома. В кристалл вносится планарный дефект в виде межфазной границы в направлении $\langle 111 \rangle$, состоящей из атомов Ni и Al, шириной в одно межатомное расстояние. После внесения соответствующих дефектов запускается процесс диффузии по вакансионному механизму. В результате диффузии нарушается порядок расположения атомов, и образуются дефекты замещения.

Была рассмотрена зависимость структурных параметров от температуры и времени счета. Параметр ближнего порядка на 1-ой координационной сфере для идеального кристалла составляет -0.33 (дальнего 1), процесс разупорядочения в кристалле приводит к росту параметра ближнего порядка (и уменьшению параметра дальнего порядка). То есть, параметры порядка помогали оценить степень разупорядочения в сплаве.

Разупорядочение производилось при различных температурах: 300, 600, 900 и 1200 К. С ростом температуры степень разупорядочения для одного и того же дефекта менялась, отражая рост беспорядка.

Выяснилось, что наибольшая степень разупорядочения (при рассмотренных температурах) при ориентации границы в направлении $\langle 111 \rangle$ наблюдается для границы состоящей из атомов Al, воздействие границы Ni, даже по сравнению со случаем идеального кристалла, оказалось не значительным. Это подтверждает и тот факт, что энергия дефекта границы Al $0.239 \text{ эВ}/\text{\AA}^2$, больше, чем у границы Ni $0.045 \text{ эВ}/\text{\AA}^2$.

Таким образом, для границы с ориентацией $\langle 111 \rangle$ наибольшая степень разупорядочения наблюдается в кристалле с межфазной границей, состоящей из атомов Al.

© Яшин А. В. (yashinalik@mail.ru)