

16. Nov. 1990

Diss. ETH Nr. 9227

**NAHORDNUNG UND VERSETZUNGEN
IN EINER NI-MO-LEGIERUNG**

ABHANDLUNG

zur Erlangung des Titels
DOKTOR DER NATURWISSENSCHAFTEN
der
**EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE
ZÜRICH**

vorgelegt von
PETER SCHWANDER
Dipl. Phys. ETH
geboren am 11. Juni 1956
von Luzern (LU)

angenommen auf Antrag von:
Prof. Dr. G. Kostorz, Referent
Dr. A. Korner, Korreferent
Dr. B. Schönfeld, Korreferent


Prof. Dr. G. Kostorz

1990

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde die Nahordnung der α -Phase einer binären Ni-Mo-Legierung bestimmt und mit den nach plastischer Verformung vorliegenden Versetzungsanordnungen korreliert.

Die diffuse Röntgenstreuung wurde an einem nach geeigneter Wärmebehandlung naheordneten Einkristall von Ni-11,2 at.% Mo ausgemessen. Der Beitrag der Nahordnung wurde nach der Georgopoulos-Cohen-Methode separiert; das Maximum der Nahordnungsstreuung liegt am speziellen Punkt $1\frac{1}{2}0$. Aus der Nahordnungsintensität in Laue-Einheiten ergeben sich die Warren-Cowley-Nahordnungsparameter durch eine Fouriertransformation. Es zeigte sich, dass — im Vergleich zur unkorrelierten Anordnung der Atome — Atome des jeweiligen Legierungspartners bevorzugt in der nächsten Nachbarschaftsschale anzutreffen sind. Zur Visualisierung der Nahordnung im Ortsraum wurden Modellkristalle unter Vorgabe der experimentellen Nahordnungsparameter generiert. Es wurden keine Hinweise auf Mikrodomänen einer ferneordneten Ni-Mo-Phase gefunden.

Da die gemessenen Nahordnungskoeffizienten einem thermodynamischen Gleichgewichtszustand (die Auslagerungstemperatur war 500°C) entsprechen, konnten mit Methoden der statistischen Mechanik und einem Ising-Modell für die Konfigurationsenergie die effektiven Paarpotentiale bestimmt werden. Diese effektiven Paarpotentiale wurden aus den Nahordnungsparametern mit der näherungsfreien inversen Monte-Carlo-Methode berechnet. Eine Zurückrechnung der Nahordnungsparameter mit einer Monte-Carlo-Simulation ergab eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Die effektiven Paarpotentiale lassen die intermetallischen Gleichgewichtsphasen Ni_8Mo , Ni_4Mo sowie die beiden metastabilen Phasen Ni_3Mo und Ni_2Mo als Tieftemperaturphasen plausibel erscheinen.

Die Versetzungsstruktur plastisch verformter Einkristalle wurde im Transmissionselektronenmikroskop bei 300 kV untersucht. Die beobachteten Versetzungsgruppen und Multipolkonfigurationen deuten auf ausgeprägte planare Gleitung hin. Eine Untersuchung mit der Weak-Beam-Methode zeigte eine Aufspaltung der Versetzungen in Shockley-Partialversetzungen mit Abständen kleiner als 5 nm; diese Abstände variieren mit dem Versetzungscharakter. Daraus wurde unter Berücksichtigung der elastischen Anisotropie eine Stapelfehlerenergie von $(55 \pm 5) \text{ mJ/m}^2$ ermittelt.

Basierend auf dem Ising-Modell konnte die Änderung der Konfigurationsen-

ergie eines nahgeordneten Mischkristalls für die Abgleitung auf {111}-Ebenen berechnet werden. Mit den gefundenen Nahordnungsparametern und effektiven Paarpotentialen ergab sich ein Wert von ungefähr 25 mJ/m^2 . Dabei kommt dem Abgleitschritt der ersten Versetzung etwa 90% des gesamten Energieaufwandes zu, so dass nachfolgende Versetzungen auf derselben Gleitebene begünstigt werden. Mit diesem Mechanismus kann die planare Gleitung verstanden werden.

Falls die effektiven Paarpotentiale nicht oder nur schwach von der Konzentration und der Temperatur abhängen, erlaubt es die Monte-Carlo-Methode, im Phasendiagramm benachbarte Gleichgewichtszustände zu charakterisieren. Unter dieser Annahme wurde die Temperatur- und Konzentrationsabhängigkeit der durch Gleitung bedingten Änderung der Konfigurationsenergie bestimmt. Es zeigt sich eine nur geringfügige Temperaturabhängigkeit innerhalb desjenigen Bereichs, in dem sich durch eine Wärmebehandlung ein thermisches Gleichgewicht einstellen und einschrecken lässt. Hingegen nimmt die Änderung der Konfigurationsenergie mit abnehmender Mo-Konzentration deutlich ab.

Summary

In the present work, the short-range order in the α -phase of a binary Ni-Mo alloy was determined and correlated with the dislocation arrangements after plastic deformation.

The diffuse X-ray scattering was measured from a Ni-11.2 at.% Mo single crystal after heat treatment to introduce short-range order. The short-range order contribution of the elastic diffuse intensity was then separated by the Georgopoulos-Cohen method; the short-range order scattering shows a maximum located at the special point $1\frac{1}{2}0$. From the short-range order intensity measured in Laue units, Warren-Cowley short-range order parameters can be obtained by a Fourier transformation. Compared with a random distribution of atoms on the lattice sites, unequal atoms are preferred as nearest neighbours. To visualize the microstructure, model crystals consistent with the experimental short-range order parameters were generated. There were no indications of any microdomains from any long-range ordered phase.

Since the short-range order parameters correspond to a thermodynamical state of equilibrium (the annealing temperature was 500°C), it was possible to obtain effective pair potentials based on an Ising model and methods of statistical mechanics. The inverse Monte-Carlo method was used to obtain effective pair potentials. A subsequent recalculation of the short-range order coefficients using the Monte-Carlo method was in excellent agreement with the experimental values. The effective pair potentials suggest the stable intermetallic phases Ni₉Mo and Ni₄Mo as well as the metastable phases Ni₃Mo and Ni₂Mo to be present at low temperatures.

The dislocation structure of plastically deformed single crystals was analyzed in a transmission electron microscope at 300 kV. The observed 'pile-ups' and multipole configurations strongly indicate planar glide. A study of the dislocations using the weak-beam technique revealed dislocation splitting of less than 5 nm between Shockley partials; the distance varied with the dislocation character. A stacking fault energy of (55 ± 5) mJ/m² was determined taking into account the elastic anisotropy.

The configurational energy change by dislocation slip on {111} planes was calculated for a short-range ordered solid solution based on the Ising model. Using the experimental short-range order parameters and effective pair potentials, an energy of about 25 mJ/m² was determined. About 90% of this energy has to be

overcome by the first dislocation, facilitating gliding of all the following dislocations on the same plane. Thus, planar glide can be rationalized by this mechanism.

If the effective pair potentials depend weakly or not at all on concentration and temperature, equilibrium states close to the measured state are accessible. Under this assumption, the concentration and temperature dependence of the slip-related configurational energy change was determined. A weak temperature dependence of this change is found in a range where thermal equilibrium can be reached and be frozen in by quenching to room temperature. However, the configurational energy change decreases noticeable for smaller Mo concentrations.