

# MECHANICAL BEHAVIOUR AND DISLOCATION STRUCTURE OF HYDROGEN-CHARGED IRON-BASED SINGLE CRYSTALS

**S.M. Teus, V.N. Shivanyuk, Yu.N. Petrov, V.G. Gavriljuk\***

G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, NAS Ukraine,  
Vernadsky Blvd. 36, Kiev 03142, Ukraine

## Introduction

An orientation dependence of mechanical behaviour is found in fcc crystals with low stacking fault energy because the Burgers vectors of Shockley partials  $(a/6)\langle 112 \rangle$  have different crystallographic orientations and the Schmid factors of the leading and trailing dislocations are different [1,2]. It is shown that, as a result, the applied stress reduces the partial separation under tension with orientation of the tensile axis [100], whereas for the case of [111] tensile axis the actual separation is increased. These peculiarities lead to mechanical hardening in [100] and softening in [111] directions.

Hydrogen causes significant change in the structure and mechanical behaviour of engineering materials. In relation to the orientation dependence of the dislocation splitting under applied stress, the hydrogen-caused decrease of stacking fault energy in iron-based alloys (e.g. [3]) seems to be important because the difference between “hard” and “soft” crystallographic orientations has to be more pronounced providing for larger initial static splitting of dislocations. This presentation aims at the clarification of hydrogen effect on the orientation dependence of the yield stress, cold work hardening and dislocation structure in single crystals of stainless austenitic steel under tension.

## Results and discussion

Single crystals of  $\text{Fe}_{72}\text{Cr}_{18}\text{Ni}_{10}$  alloy doped by 0.2 mass% N that stabilises the fcc lattice were chosen for studies. The samples were hydrogen-charged ... Samples for mechanical tests and TEM studies were cut in [100], [111] and [110] directions. Mechanical tests were carried out on the plates of  $50 \times 1.3 \times 1.2 \text{ mm}^3$  in size with the strain rate of  $8 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  using standard mechanical machine with accuracy of loading measurements of 0.5%. TEM studies were carried out using transmission electron microscope JEM 2000FXII.

Results of mechanical tests for [100] and [111] single crystals are shown in Figs 1,2.

The obtained results for hydrogen-free single crystals are consistent with the expected hard [100] and soft [111] directions. According to [1], the dynamic steady-state separation  $\Delta x$  of two partials moving under applied stress is given by

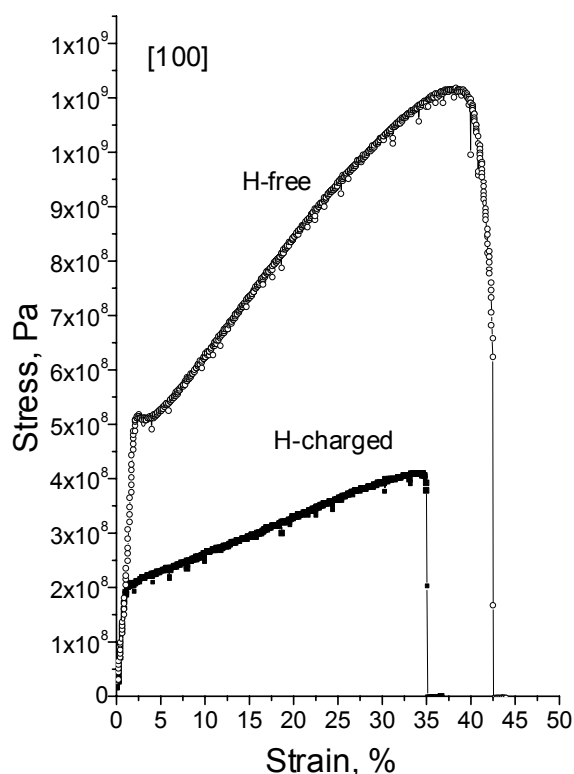
$$\frac{1}{\Delta x} = \frac{1}{C} \left[ \gamma \pm \frac{(m_1 - m_2)}{2} \sigma b \right],$$

where C is a constant that depends on materials and dislocation type;

$\gamma$  is the stacking fault energy;

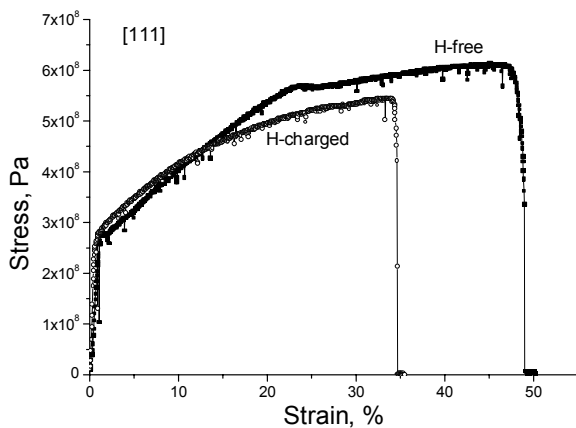
$m_1$  and  $m_2$  are the Schmid factors of the leading and trailing partial dislocations with their Burgers vector  $b$ ;

and  $\sigma$  is the applied uniaxial tensile (+) or compressive (-) stress.



**Fig. 1.** Curves stress-elongation for hydrogen-free and hydrogen-charged single crystal with [100] tensile axis.

\* E-mail: gavr@imp.kiev.ua



**Fig. 2.** . Curves stress-elongation for hydrogen-free and hydrogen-charged single crystal with [111] tensile axis.

In hydrogen-free crystals, the splitting of dislocations is diminished under tensile stress for [100] and enhanced for [111] tensile axes. Narrow dislocations require a larger stress for their movement through the crystal lattice and are inclined to form the cellular substructures [2], which leads to the observed increase in the values of the yield strength and work hardening of the [100] single crystals (Fig. 1), whereas these values are decreased for [111] crystals (Fig. 2).

Hydrogen charging changes this behaviour to the opposite one: [100] direction becomes “soft” while [111] transforms to the “hard” one. This change occurs in spite of the hydrogen-caused decrease in the stacking fault energy. The larger is the static splitting of dislocations, the more the orientation dependence of the splitting under dynamical loading is expected without any change in the sign of the dynamic splitting.

TEM studies were undertaken in order to clarify a reason for such a hydrogen effect. It was confirmed that hydrogen charging decreases stacking fault energy and causes additional splitting of dislocations. Along with this, the

hydrogen-charged samples contain the plates of the  $\epsilon$ -martensite with the habit plane  $(111)_\gamma$ .

The explanation of the obtained results is proposed based on two hydrogen effects: (i) formation of the  $\epsilon$ -martensite and its retarding influence on the movement of dislocations whatever the crystallographic orientation is, and (ii) the hydrogen-increased concentration of thermodynamically equilibrium vacancies [3] that are expected to be collected preferentially in the hydrogen atmospheres round dislocations, i.e. in the slip planes (111) and ease the movement of dislocations on the slip plane.

The effect of superabundant equilibrium vacancies on the mechanical behaviour has to depend on the orientation of the slip plane relating to the tensile axis. The largest softening caused by vacancies concentrated over the slip plane is expected for the [100] tensile axis that provides the maximum shear stress in the (111) planes. If the [111] direction that lies in the (111) plane coincides with the tensile axis, a smaller shear stress on the slip plane is expected at the same applied normal stress. Therefore, the vacancy-caused softening on the slip plane can be less pronounced.

Therefore, the competitive influence of the hydrogen-caused  $\epsilon$ -martensite and superabundant vacancies can be a reason for the striking effect of hydrogen on the orientation dependence of the yield strength and work hardening that is opposite to the case of the mechanical behaviour of the hydrogen-free single crystals.

## References

1. Copley SM and Kear BH, *Acta Metall.*, 1968; 16: 227-231.
2. Kestenbach H-J, *Phil. Mag.*, 1977; 36: 1509-1515.
3. Gavriljuk VG, Bugaev VN, Petrov YuN, Tarasenko AV, Yanchitsky BZ, *Scripta Mater.*, 1996; 34: 903-907.

# МЕХАНИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ И ДИСЛОКАЦИОННАЯ СТРУКТУРА НАВОДОРОЖЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

**С.М. Теус, В.Н. Шиванюк, Ю.Н. Петров, В.Г. Гаврилюк**  
Институт Металлофизики НАН Украины им. Г.В. Курдюмова.  
ул. Вернадского 36, Киев 03142, Украина

## Введение

Ориентационная зависимость механического поведения реализуется в ГЦК кристаллах с низкой энергией дефектов упаковки, потому что вектор Бюргера частичной дислокации Шокли  $(a/6)\langle 112 \rangle$  имеет различные кристаллографические ориентации и факторы Шмида лидирующей и следующей за ней дислокации различны [1,2]. Установлено, что в результате приложенная нагрузка уменьшает расстояние между дислокациями при растяжении если ось растяжения ориентирована вдоль [100], в то время как при растяжении вдоль оси [111] это расстояние увеличивается. Эти особенности приводят к механическому упрочнению вдоль направления [100] и снижению прочности вдоль направления [111].

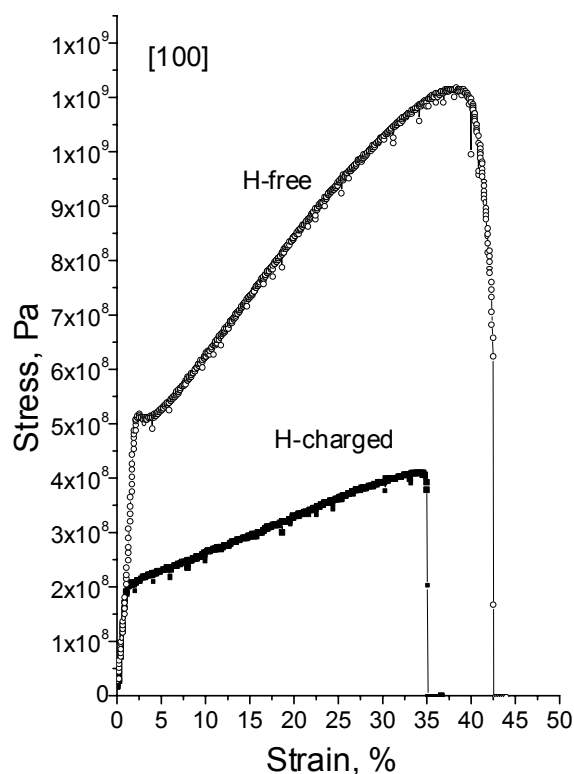
Водород приводит к значительным изменениям в структуре и механических свойствах конструкционных материалов. В отношении к ориентационной зависимости дислокационного расщепления под приложенным напряжением, вызванное водородом уменьшение энергии дефекта упаковки в сплавах на основе железа (см. напр., [3]) представляется важным обстоятельством, так как можно ожидать, что различие между "упрочнением" и "смягчением" вдоль разных кристаллографических ориентаций будет выражено сильнее, обеспечивая большее начальное статическое расщепление дислокаций. Настоящее исследование преследует цель вносит ясность выяснить влияние водорода на ориентационную зависимость предела текучести, деформационное упрочнение и дислокационную структуру монокристаллов аустенитной стали при растяжении.

## Результаты и обсуждение

Для исследований были выбраны монокристаллы  $Fe_{72}Cr_{18}Ni_{10}$  сплава с примесью 0.2 масс. % N, который стабилизирует ГЦК решётку. Образцы были наводорожены в течение 72 часов в 1N растворе  $H_2SO_4$  с добавлением  $NaAsO_2$  при плотности тока 50  $mA/cm^2$ . Образцы для механических испытаний

и ТЭМ были вырезаны вдоль направлений [100], [111] и [110]. Механические испытания проводились на пластинах размером  $50 \times 1.3 \times 1.2$   $mm^3$  при скорости деформации  $8 \cdot 10^{-4}$   $сек^{-1}$ , используя стандартную установку для механических испытаний с чувствительностью измерений нагрузки 0,5%. ТЭМ исследования осуществлялись при помощи трансмиссионного электронного микроскопа JEM 2000FXII.

Результаты механических испытаний для [100] и [111] монокристаллов показаны на Рис. 1, 2.



**Рис.1.** Кривая напряжение–деформация для ненаводороженных и наводороженных монокристаллов с осью растяжения [100].

Полученные результаты для ненаводороженных монокристаллов согласуются с ожидаемыми жёсткими [100] и мягкими [111] ориентациями. Согласно [1], динамическое статистическое расщепление  $\Delta x$  двух частичных дислокаций,двигающихся при приложенной нагрузке определяется как:

$$\frac{1}{\Delta x} = \frac{1}{C} \left[ \gamma \pm \frac{m_1 - m_2}{2} \sigma b \right],$$

где  $C$  – константа, зависящая от материала и типа дислокаций;

$\gamma$  – энергия дефекта упаковки;

$m_1$  и  $m_2$  – факторы Шмида лидирующей и следующей за ней частичной дислокации с вектором Бюргерса  $b$ ;

$\sigma$  – приложенное вдоль выделенной оси растяжения (+) или сжатия (-).

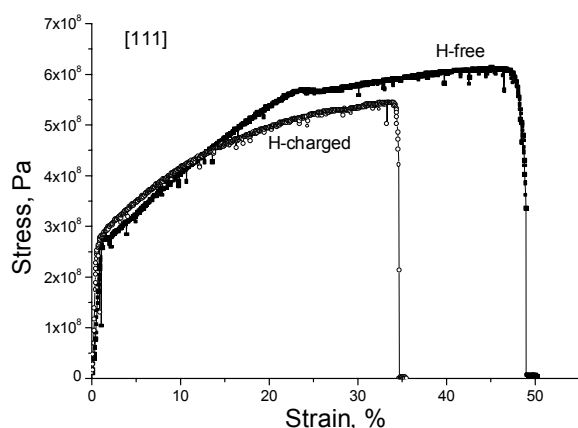


Рис.2. Кривая напряжение – деформация для ненаводороженных и наводороженных монокристаллов с осью растяжения [111].

В ненаводороженных кристаллах расщепление дислокаций уменьшается при растяжении вдоль оси [100] и увеличивается для оси [111]. Узким дислокациям требуется большая нагрузка для их движения через кристаллическую решётку, и они склонны к образованию ячеистой субструктуры [2], которая приводит к увеличению наблюдаемого значения предела текучести и деформационного упрочнения [100] монокристаллов (Рис. 1), в то время как эти значения понижаются для [111] кристаллов (Рис. 2).

Введение водорода изменяет это поведение на противоположное: направление [100] становится “мягким”, а [111] трансформируется в “жесткое”. Это изменение наблюдается несмотря на обусловленное водородом уменьшение энергии дефектов упаковки. Ожидалось, что чем больше статическое расщепление дислокаций, тем сильнее должна быть выражена ориентационная зависимость динамического расщепления без изменения в знаке

динамического расщепления и, соответственно, «смягчения-упрочнения».

ТЭМ исследования предпринимались с целью выяснить причины такого влияния водорода. Было подтверждено, что наводороживание понижает энергию дефекта упаковки и приводит к дополнительному расщеплению дислокаций. Вместе с этим, наводороженные образцы содержат области  $\epsilon$  – мартенсита с плоскостью габитуса (111)  $\gamma$ .

Предлагается объяснение полученных результатов, основываясь на двух эффектах водорода: (1) образование  $\epsilon$ -мартенсита, препятствующее движению дислокаций, для любой кристаллографической ориентации и (2) повышенная водородом концентрация термодинамически равновесных вакансий [3], которые располагаются преимущественно в водородных атмосферах вокруг дислокаций, т.е. в плоскости (111) и облегчают движение дислокаций в плоскости скольжения вследствие уменьшения площади, несущей нагрузку.

Эффект избыточных равновесных вакансий на механическое поведение зависит от ориентации плоскости скольжения относительно оси растяжения. Большее смягчение, вызванное вакансиями, сконцентрированными в плоскости скольжения, предполагается для оси растяжения [100], что обеспечивает максимальное напряжение сдвига в плоскости скольжения (111). Если направление [111], которое лежит в плоскости (111) совпадает с осью растяжения, предполагается меньшее напряжение сдвига в плоскости скольжения при той же приложенной нагрузке. Поэтому вызванное вакансиями смягчение в плоскости скольжения менее выражено.

Следовательно, конкурирующее влияние индуцированного водородом  $\epsilon$ -мартенсита и избыточных вакансий может быть причиной влияния водорода на ориентационную зависимость предела текучести и деформационное упрочнение, противоположного случаю механического поведения ненаводороженных монокристаллов.

## Литература

1. Copley SM and Kear BH, Acta Metall., 1968;16: 227 – 231.
2. Kestenbach H-J, Phil. Mag., 1977; 36: 1509 – 1515.
3. Gavriljuk VG, Bugaev VN, Petrov YuN, Tarasenko AV, Yanchitsky BZ, Scripta Mater., 1996; 34: 903 – 907.