

К.т.н, доцент Волкогон В.П., магістрант Мехед О.А.

**Національний технічний університету України
«Київський політехнічний інститут»**

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ АУСТЕНИТ-МАРТЕНСИТНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ У СПЛАВАХ

Вступ

Однією з центральних проблем металофізики є вивчення атомної структури металів та сплавів і еволюція цієї структури при зовнішніх впливах, зокрема перетворення аустеніту у мартенсит. Важливість цієї проблеми полягає в тому, що саме від атомної структури залежать такі характеристики сплавів як твердість, міцність, втомлюваність та ін. [1]. Мартенсити на сьогоднішній день досить широко використовуються в промисловості (нафтовій, космічній, військовій, медицині), тому необхідно мати моделі, які б могли описувати аустеніт-мартенситні перетворення.

Для вивчення таких перетворень використовують їх кристалографічні описання – моделі, що дають опис структури кристалічної решітки та опис перетворення цієї структури. Для опису самої кристалічної ґратки використовують так звану решітку Браве [1][2][3]. Решітка Браве – це безкінечна система точок, що утворюється паралельним переносом однієї точки вздовж основних трансляційних векторів.

Для опису того, як змінюється кристалічна решітка сплаву у просторі при мартенситних перетвореннях у роботах [2], [3] використовуються матричні обчислення. Метод запропонований у [3] більш гнучкий і дозволяє обчислити більше варіантів змін структур кристалічної решітки, ніж метод описаний у [2]. В той же час, метод [2] потребує менше обчислень.

Проте існуючі методи взагалі не враховують той факт, що при збільшенні концентрації вуглецю у загартованих сплавах збільшується тетрагональність мартенситу. Як наслідок, розрахунки проведені за цими методами, не відповідають експериментальним даним.

Постановка задачі

Мета даної роботи – модифікувати описану у [3] математичну модель кристалографічного опису аустеніт-мартенситного перетворення так, щоб

вона враховувала існуючу у α -мартенситі аномально високу тетрагональність і добре погоджувалася з експериментальними даними.

Матрична модель аустеніт-мартенситного перетворення

Трансформація ґратки при аустеніт-мартенситному перетворенні відбувається з дотриманням певних орієнтаційних співвідношень (ОС), тобто між решітками аустеніту і мартенситу існує певна залежність. Ці співвідношення задаються кристалографічними площинами та напрямками. Кристалографічна площина – це площина, що проходить через вузли кристалічної решітки. Для її запису використовуються індекси Міллера – набір з 3-ьох чисел, взятий у круглі дужки (зазвичай позначається як (hkl)). Якщо вздовж трьох координатних осей, заданих трансляційними векторами a, b, c , відкласти відрізки довжиною $|a|/h, |b|/k, |c|/l$, то отримаємо три точки, що однозначно задають площину. Кристалографічний напрямок – це пряма, що проходить через певні вузли решітки. Для її запису також використовуються індекси Міллера аналогічним чином, але вони записуються у квадратних дужках.

В металофізиці існують добре вивчені ОС. Одним з таких співвідношень є ОС Нішіями (ОС Н):

$$(011)_{\alpha_m} \parallel (111)_{\gamma}, [011]_{\alpha_m} \parallel [211]_{\gamma}$$

Цей запис означає, що кристалографічна площина $[111]_{\alpha_m}$ α -мартенситу паралельна площині $[101]_{\gamma}$ аустеніту, а кристалографічний напрямок $(011)_{\alpha_m}$ мартенситу паралельний напрямку $(111)_{\gamma}$ аустеніту.

Це перетворення можна записати за допомогою наступного матричного співвідношення [3][4]:

$$[hkl]_{\alpha} = (\gamma / \alpha) \cdot [hkl]_{\gamma},$$

де: $[hkl]_{\gamma}$ – індекси кристалографічного напрямку в аустенітних кристалах;

(γ / α) – задана матриця перетворення координат при аустеніт-мартенситному перетворенні;

$[hkl]_{\alpha}$ – індекси напрямку в мартенситних кристалах, що відповідають обраній матриці (γ / α) .

Матриця, що описує перетворення для ОС Нішіями має вигляд [2]:

$$(\gamma / \alpha) = \begin{pmatrix} 0,697 & -0,707 & 0,120 \\ 0,697 & 0,707 & 0,120 \\ -0,169 & 0 & 0,986 \end{pmatrix}$$

Також добре вивчені співвідношення Курдюмова-Закса (ОС КЗ) та Гренігера-Трояно (ОС ГТ). Для цих ОС відомо, що від ОС Н вони відрізняються на відповідні кути повороту ($\omega = 2^{\circ}38'$ та $\omega = 5^{\circ}16'$)

відповідно) відносно напрямку $[011]_{\alpha_M} \parallel [111]_{\gamma}$. [1]. Тому для отримання матриць переходу для ОС ГТ і ОС КЗ потрібно вирахувати матрицю повороту на потрібний кут відносно напрямку $[111]_{\gamma}$ і помножити її на матрицю переходу ОС Н.

Врахування аномальної тетрагональності у аустеніт-мартенситних перетвореннях

Ці розрахунки були проведені для випадку, коли утворюється мартенсит з кубічною об'ємноцентрованою граткою. Проте у деяких випадках може утворюватись мартенсит з тетрагональною об'ємноцентрованою граткою. Величина тетрагональності мартенситу задається параметром c/a (c , a – довжини сторін кристалічної решітки, при цьому $a=b$, $c>a$), що може бути визначений експериментально і на основі отриманих даних може бути встановлена його залежність від параметрів, що цікавлять (наприклад, у [5] була виявлена залежність від концентрації вуглецю у сталі). В деяких випадках величина параметру c/a може бути аномально високою (досягаючи значення $c/a=1,12$ [5]).

Для врахування існуючої в мартенситі тетрагональності можна використати масштабуючу матрицю, яка б враховувала параметр тетрагональності c/a :

$$T_{c/a} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & c/a \end{pmatrix}$$

Тоді матричне перетворення, що переводить гратки аустеніту у гратки мартенситу буде мати вигляд:

$$[hkl]_{\alpha} = T_{c/a} \cdot (\gamma / \alpha) \cdot [hkl]_{\gamma} \quad (1)$$

Адекватність використаних рішень

Для полюса аустеніта $[111]_{\gamma}$ за допомогою формули (1) були отримані наступні координати полюсів мартенситу при відповідних значеннях параметру c/a :

$$v_1 = \begin{pmatrix} 0.11 \\ 1.524 \\ 0.915 \end{pmatrix}, \quad \text{при } c/a=1.12$$

$$v_2 = \begin{pmatrix} 0.11 \\ 1.524 \\ 0.915 \end{pmatrix}, \quad \text{при } c/a=1.2$$

Якщо розрахувати відстані проєкцій на одиничну сферу полюса аустеніту і отриманих полюсів мартенситу, то отримаємо наступні значення: $D_{v1}=0.589$, $D_{v2}=0.581$. Тобто при збільшенні параметру тетрагональності відповідний полюс мартенситу при проєкції на одиничну сферу наблизився до полюса аустеніту $[111]_{\gamma}$. При проведенні розрахунків для інших полюсів отримуємо таку ж саму поведінку.

Це повністю збігається з даними експериментів проведених у [5], у яких при збільшенні концентрації вуглецю (і, як наслідок, збільшенні тетрагональності мартенситу) спостерігалась наближення полюсів мартенситу до полюсів аустеніту.

Висновки

Розглянутий метод враховує виникаючу в мартенситі аномальну тетрагональність і тому більш точно збігається з експериментальними даними. Дані отримані за цим метод можуть бути використані, наприклад, для побудови значно більш точних стереографічних проєкцій, що використовуються при вивченні кристалів мартенситу [1][4][5].

Оскільки аустеніт-мартенситні перетворення складаються з декількох етапів [1][2], а розглянутий метод описує лише початковий та кінцевий стани, то в подальшому метод може бути вдосконалений за рахунок введення опису проміжних станів. Це дало б змогу врахувати більше параметрів за рахунок врахування впливів, що вносяться на проміжних етапах аустеніт-мартенситного перетворення, і таким чином отримати ще більш точні результати.

Література

1. *Лысак Л.И., Николин Б.И.* Физические основы термической обработки стали. – Киев: Техніка, 1975. – 304 с.
2. *Сорокин И.П.* О кристаллографической упорядоченности γ - α превращения в сплаве Fe – 30% Ni, ФММ, 966, 22, 2, 239.
3. *Herman F., Skillman S.* Atomic Structure Calculation. New Jersey: Prentice-Hall, Englewood Cliff, 1963. – P. 500.
4. *В.М. Фарбер, А.А. Архангельская.* Дифракционные методы анализа. Учебное пособие. - Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2004. - 107 с.
5. *Андриющенко В.А., Коваль Ю.Н., Гнатюк И.Е., Т.А. Шаповал.* Ориентации α -мартенсита в высокоуглеродистых сплавах системы Fe-Al-C Металлофиз. новейшие технол., 2001, т.23, №5, С.639-654