

КЛАСТЕРНАЯ МОДЕЛЬ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В СТАЛИ

Епанчинцева А.В., Мишина И.В., Чечикова А. О.,

Недобитко Е.А., Джес А.В.

Научный руководитель д-р физ.-мат. наук, профессор Квеглис Л.И.

Сибирский федеральный университет

Известно, что мартенситные превращения в металлах и сплавах идут по определенным ориентационным схемам. Эти схемы, как правило, представляют плоские двумерные сетки. Однако, трехмерная модель может более полно описать особенности мартенситных превращений.

Целью данной работы является рассмотреть мартенситные превращения в стали как кластерные сдвиги и повороты.

Кластером называют группу атомов, объединение которых может рассматриваться как самостоятельная структурная единица, обладающая определёнными свойствами существенно изменяющимися при удалении или добавлении хотя бы одного атома.

Задачи работы:

1. Сделать анализ возможных схем мартенситных превращений.
2. Показать, что кластерные трехмерные модели являются более общими для описания механизмов мартенситных превращений.

Мартенситное превращение это полиморфное превращение, при котором изменение взаимного расположения составляющих кристалл атомов происходит путём их упорядоченного перемещения, причем относительные смещения соседних атомов соизмеримы с межуатомным расстоянием. Перестройка кристаллической решётки в микрообластях обычно сводится к деформации её элементарной ячейки.

Необходимое условие мартенситного превращения, которое развивается путем образования и роста областей более стабильной фазы в метастабильной, — сохранение упорядоченного контакта между фазами.

Упорядоченное строение межфазных границ снижает избыточную энергию, необходимую для зарождения кристаллов новой фазы (мартенситных кристаллов). Поэтому зарождение мартенситных кристаллов происходит с большой скоростью и может не требовать тепловых флуктуаций. Возможно образование мартенсита закалки и мартенсита деформации.

Наиболее полно изучены мартенситные превращения в сплавах железа, кобальта и никеля, в частности в связи с закалкой стали.

Известно, что сплавы на основе кобальта претерпевают мартенситный переход из ГЦК в ГПУ решетку при быстром охлаждении. Алгоритм ГПУ сборки требует попарного чередование октаэдров и тетраэдров. См рис 1. Если ГЦК ячейка состоит из октаэдра, окруженного восемью тетраэдрами: четырьмя в верхней и четырьмя в нижней, то элементарная ячейка ГПУ Co содержит пары тетраэдров или пары октаэдров, вдоль направления оси z. Поворачивая и сдвигая кластеры ГЦК, мы можем по заданному алгоритму получить кластеры ГПУ. При этом межатомные расстояния сохраняются, следовательно размеры ГПУ кристалла получаются автоматически, как результат кластерных перестановок. Если параметр решетки ГЦК-Co $a=3.57\%$ параметр решетки ГПУ-Co с можно рассчитать.

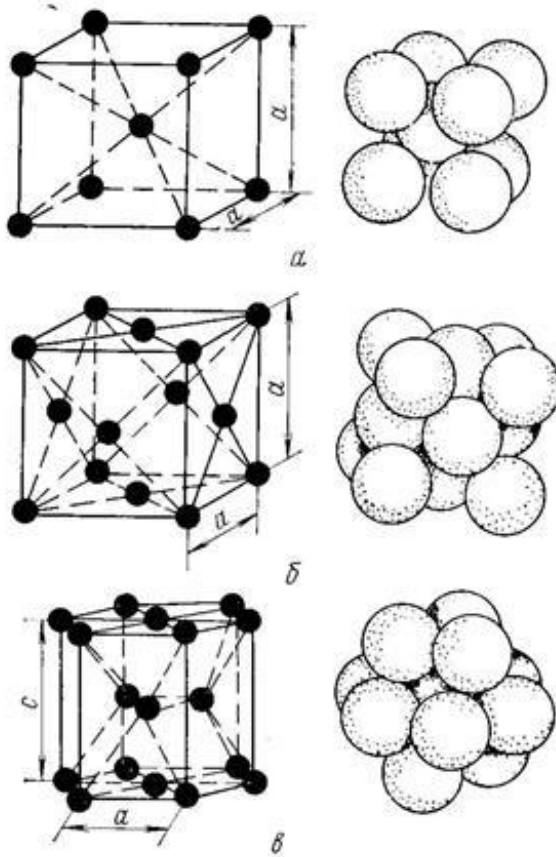


Рис.1 Схемы элементарных ячеек и кластеров: а)для ОЦК решетки, б)для ГЦК решетки,в)для ГПУ решетки

Расстояние d между плоскостями (111) ГЦК решетки можно рассчитывать по формуле (1);

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1)$$

a -параметр ГЦК решетки

h, k, l коэффициенты Миллера .

Для d_{111} получаем по формуле (2)

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} = 2,04A^\circ \quad (2)$$

В ГЦК решетки этот период повторяется трижды вдоль направления [111], для ГПУ решетки такое расстояния повторяется дважды вдоль оси z . Параметр ГПУ решетки вдоль оси z обозначают через C , которое можно посчитать по формуле (3)

$$C = 2d_{111} = \frac{2 * 3,57A}{\sqrt{3}} \approx 4,08A^\circ \quad (3)$$

Полученный расчет, сделанный на основе кластерной модели, хорошо совпадает с табличными значениями для ГПУ Со. Аналогичные расчеты можно применит и для мартенситных превращениях в сталях

В процессе ускоренного охлаждения при превращении \square -твердого раствора в α -твердый раствор углерод остается в твердом растворе, заметно искажая

кристаллическую решетку α -Fe. Поэтому структура закаленной стали – мартенсит – является перенасыщенным твердым раствором внедрения углерода в α -Fe имеет тетрагональную кристаллическую решетку, где отношение ребер $c/a > 1$ (рис.2).

Повышение содержания углерода в аустените увеличивает искажение пространственной решетки мартенсита. Это является важнейшим фактором его твердости. Структура мартенсита и аустенита (ГЦК) показаны на рисунках 1 и 2.

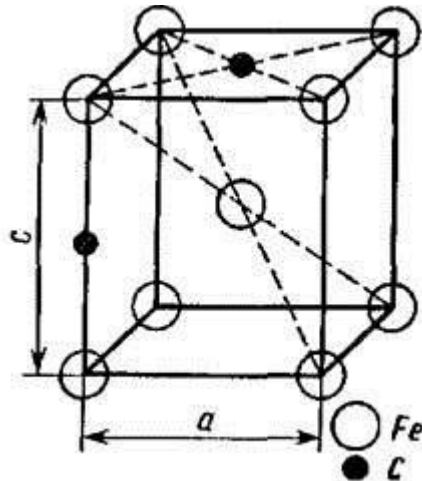


Рис.2. Элементарная кристаллическая ячейка мартенсита a и аустенита

Переход аустенита имеющего ГЦК решетку в мартенсит ОЦТ решетку может быть проиллюстрирован с помощью схемы приведенной на рисунке 3, где показаны ориентационные соотношения между плотноупакованной плоскостью (111) аустенита и (110) мартенсита.

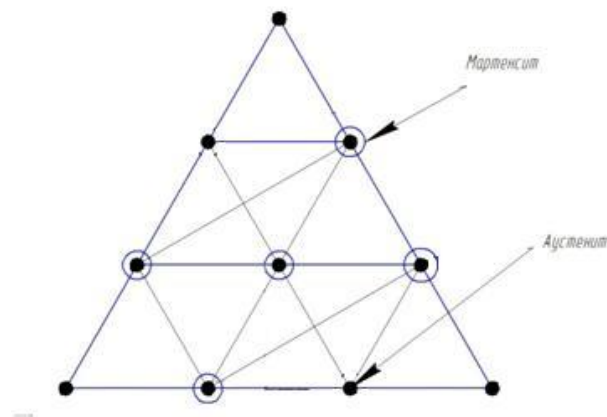


Рис.3 Схема формирования атомной плоскости типа (110) мартенсита из исходной плоскости типа (111) аустенита

Алгоритм ГЦК сборки требует чередования кластеров (октаэдров и тетраэдров). Поворачивая и сдвигая кластеры, формирующие ГЦК решетку, мы можем по заданному алгоритму получить кластеры ОЦК решетки. При этом межатомные расстояния изменяются незначительно.

В работе предлагается трехмерное представление ориентационного соотношения ГЦК и ОЦК решеток. Схема, показанная на рис. 4, а, иллюстрирует сочетание октаэдров и тетраэдров в ГЦК решетке. На рис. 4, б показано сечение ГЦК-решетки

плоскостью (110). Видно, что в сечении получаются один ромб от октаэдра и два неправильных треугольника от 2х тетраэдров..

На рис. 4 в, показан кластер ОЦК решетки, который может быть встроен в ГЦК-решетку без разрыва сплошности. На рис. 4 г, показано как кластер ОЦК решетки совмещается с октаэдрической пустотой ГЦК решетки.

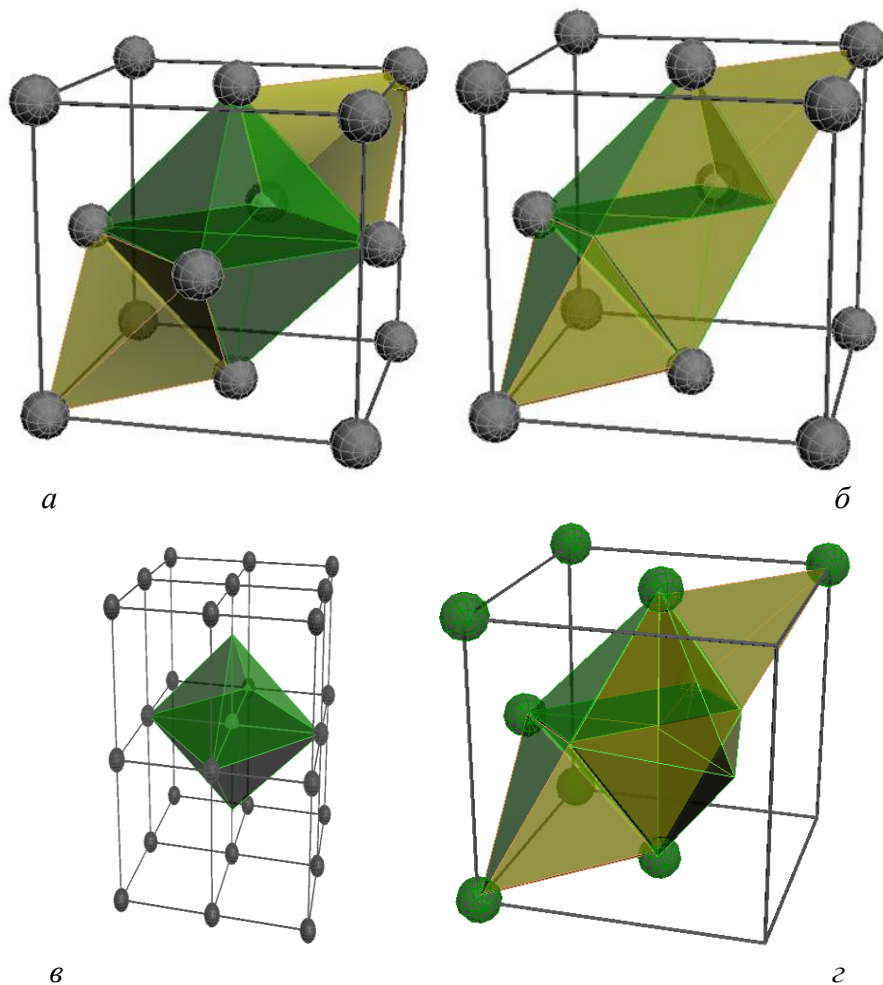


Рис. 4 Компьютерные модели трехмерных кластеров, сделанные в среде 3ds Max

Вывод. Предложенные трехмерные модели позволяют получать все ориентационные соотношения, которые известны для мартенситных превращений из ГЦК в ГПУ и в ОЦК решетки.