

### 3D МОДЕЛИРОВАНИЯ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Мишина И.В., Чечикова А.О., 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 изменяющихся 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 из метастабильной, это 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 наглядно представлены мартенситные превращения в кобальте[1]. Расстояние  $d$  между плоскостями (111) ГЦК решетки можно рассчитывать по формуле (1);

$a$ -параметр ГЦК решетки

$h, k, l$ - коэффициенты Миллера .

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

Для  $d_{111}$  получаем по формуле (2) и это соответствует данным рентгеноструктурного анализа

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)

$$c = 2d_{111} = \frac{2 * 3,57\text{А}}{\sqrt{3}} \approx 4,084^\circ \quad (3)$$

Полученный расчет, сделанный на основе кластерной модели, хорошо совпадает с табличными значениями для ГПУ Со,а также с расчетами, представленными в книге[1]. Аналогичные расчеты можно применит и для мартенситных превращениях в сталях

В процессе ускоренного охлаждения при превращении  $\gamma$ -твердого раствора в  $\alpha$ -твердый раствор углерод остается в твердом растворе, заметно искажая кристаллическую решетку  $\alpha$ -Fe. Поэтому структура закаленной стали – мартенсит – является перенасыщенным твердым раствором внедрения углерода в  $\alpha$ -Fe имеет тетрагональную кристаллическую решетку, где отношение ребер  $c/a > 1$ .

Повышение содержания углерода в аустените увеличивает искажение пространственной решетки мартенсита. Это является важнейшим фактором его твердости. Переход аустенита имеющего ГЦК решетку в мартенсит ОЦТ решетку может быть проиллюстрирован с помощью схемы плоской сетки, приведенной на рисунке 2. Здесь показаны ориентационные соотношения между плотноупакованной плоскостью (111) аустенита и (110) мартенсита, предложенные как соотношение Курдюмова-Закса в книге [2].

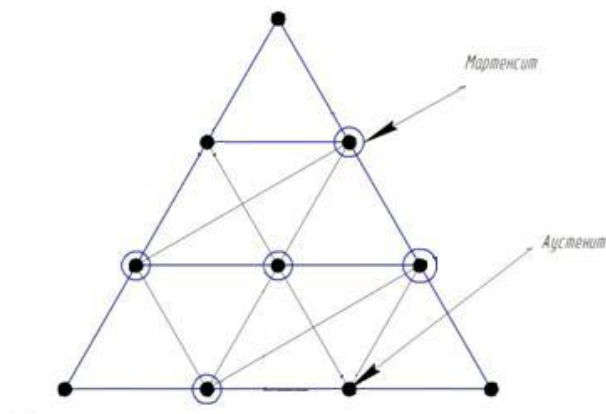


Рис.2 Схема формирования атомной плоскости типа (110) мартенсита из исходной плоскости типа (111) аустенита

Алгоритм ОЦК-решетки представляет собой чередование связанных октаэдров, при этом ребра октаэдров не равны друг другу. Размеры ребер октаэдров равны либо ребру куба, либо половине его пространственной диагонали, как это показано на рис.3 а ОЦК решетка может быть собрана из 6 таких октаэдров [3]

. Алгоритм ГЦК сборки требует чередования равносторонних октаэдров и тетраэдров..При этом каждый тетраэдр окружен октаэдрами и каждый октаэдр окружен тетраэдрами. Все кластеры связаны между собой общими треугольными гранями. Схема, показанная на рис. 4, б, иллюстрирует сочетание равносторонних октаэдров и тетраэдров в ГЦК решетке. [3].

В работе предлагается трехмерное представление ориентационного соотношения ГЦК и ОЦК решеток, показанное на двумерной сетке на рис 2..Заменяя октаэдр в ГЦК-решетке на октаэдр ОЦК-решетки, мы можем получить схему роста мартенситной фазы

из кластеров ОЦК решетки. При этом межатомные расстояния изменяются незначительно, что соответствует данным рентгеноструктурного анализа.

На рис. 4 в , показано как октаэдрический кластер ОЦК решетки совмещается с октаэдрической пустотой ГЦК решетки.

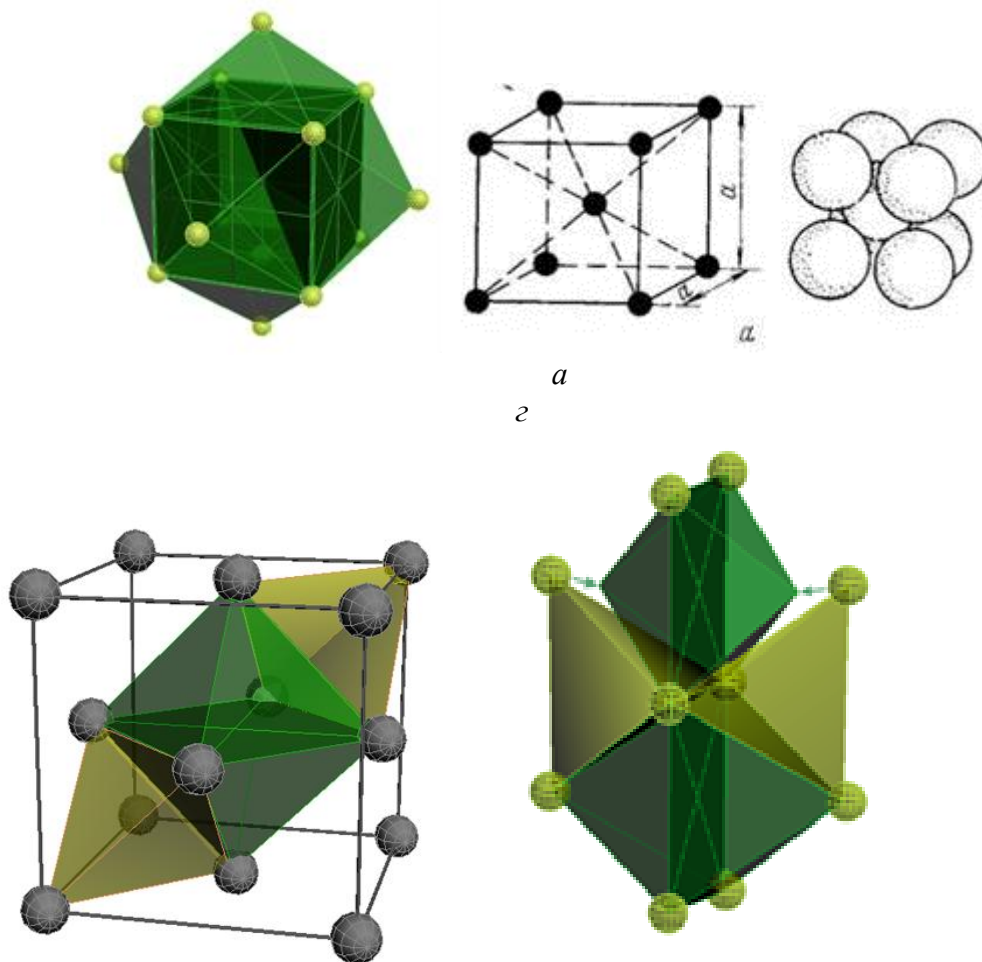


Рис. 3 Компьютерные модели трехмерных кластеров, сделанные в среде 3ds Max

Предложенные трехмерные модели позволяют получать все ориентационные соотношения, которые известны для мартенситных превращений из ГЦК в ГПУ и в ОЦК решетки. Наиболее известные соотношения приведены в книге [3].

#### Литература

1. Ориентированная кристаллизация Л. С. Палатник , И. И. Папилов  
Металлургия, 1964,с 407
2. Л. М. Утевский // Дифракционная электронная микроскопия в металловедении / Л. М. Утевский . – М. : Metallurgia, 1973 . – 583 с.
3. Бульёнков Н.А., Тытик Д.Л.// Модульный дизайн икосаэдрических металлических кластеров // Известия РАН (сер хим.), 2001, №1, С. 1.