

УДК 669.3:539.89: 537.322.11 : 536.424.1

ДИСКРЕТНІ МОДЕЛІ МАРТЕНСИТНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ ТА ДВІЙНИКУВАННЯ В МЕТАЛАХ

Л. Ю. КОЗАК

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу

З допомогою двовимірної дискретної моделі виявлено, що залежно від температури кристалічна ґратка може перебувати у стані стійкої або нестійкої рівноваги. Під час кристалізації утворюється стійка кристалічна ґратка. З пониженням температури переходить у стан нестійкої рівноваги. Зроблено висновок, що пластична деформація за низьких температур, як і під час поліморфних перетворень, є наслідком втрати стійкості. Але, не зважаючи на те, що в основі двійникування і мартенситного перетворення лежить один і той самий процес – зміщення атомів у кристалі, причини дестабілізації кристалічної ґратки тут різні.

Ключові слова: кристалічна ґратка, поліморфне та мартенситне перетворення, двійникування, пластична деформація.

До фазових перетворень першого роду відносяться політропні, які можуть протікати за двома механізмами – нормальним (дифузійним) і мартенситним (зсувним). Мартенситний характерний для металів з низькою температурою перетворення. Внаслідок великої пружності металу і малої рухливості атомів за низьких температур мартенситне перетворення (МП) відбувається шляхом кооперативного координаційного зміщення атомів на віддаль, що менша за міжатомну [1, 2]. Цей процес подібний до двійникування, яке фіксують під час пластичної деформації (ПД) і яке також реалізується шляхом кооперативного переміщення всіх атомів у певному напрямі [3]. Як і для МП, тип ґратки тут не змінюється і деформація протікає без розриву міжатомних зв'язків. Ця істотна особливість двійникування характерна для ПД і МП [1].

Двійникування та ковзання – механізми атермічної пластичності, оскільки можуть відбуватися і за температур, близьких до абсолютного нуля [4]. МП супроводжується виділенням тепла, якщо перехід здійснюється під час охолодження, і його поглинанням – за нагрівання [2]. Експериментальні результати підтверджують інтенсивне виділення теплоти під час двійникування за деформації металічних монокристалів навіть за низьких температур [3].

Подібність МП і двійникування наштовхує на думку про спільну їх причину. Одним із основних чинників МП є втрата стійкості кристалічної ґратки, що обумовлено структурними змінами в електронній конфігурації твердих тіл з перепадом температури [5]. Стійкість ґратки забезпечує незмінність потенціалу міжатомної взаємодії за сталої міжатомної відстані (МВ) r_0 у деякому інтервалі температур, поза яким може суттєво мінятися електронна структура у твердих тілах, що пов'язана зі встановленням чи втратою зв'язку між електронними оболонками іонних кістяків, тобто виникненням чи руйнуванням тих чи інших гібридних конфігурацій, зниженням чи підвищенням ступеня локалізації валентних електронів [4]. Врешті-решт ці перетворення призводять до зміни рівноважної відстані r_0 між атомами, що вплине на розташування точок з мінімальною потенціальною енергією (ТМПЕ) в просторі. Зі зміною потенціалу міжатомної взаємодії ТМПЕ змішуються

в просторі, утворюючи нову конфігурацію, тому положення атомів стає нестійким і вони змінюють розташування, внаслідок чого мінімізується енергія кристалічної ґратки і міняється її форма.

Через теплове розширення ґратки змінюються також положення атомів твердих тіл. У результаті ангармонізму коливань вузли кристалічної ґратки (розташування ТМПЕ), що є центрами коливання атомів, зміщуються (рис. 1). Нові центри коливання за різної їх кінетичної енергії знаходяться на кривій ab . Загалом рівноважна відстань r_0 між атомами з підвищенням температури збільшується [5]. Отже, через зміну положення ТМПЕ від теплового розширення, імовірно, змінюється стійкість кристалічної ґратки. Вивчимо це питання ґрунтовніше.

Методичні аспекти. Використали дискретну модель твердого тіла [6]. Розглядали двовимірну кристалічну ґратку з квадратною коміркою (рис. 2). Сили міжатомної взаємодії описували сферично-симетричним потенціалом. Сили взаємодії поширюються на перших та других сусідів атома і обмежуються відстанню $r = 2r_0$. Енергію зв'язку між двома атомами визначали з рівняння [7]

$$U = \frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \quad (1)$$

де $A = 1$; $B = \frac{m}{n} \cdot \frac{r_0^{n+1}}{r_0^{m+1}}$ – константи; m і n – показники степеня для енергії сил притягання і відштовхування.

Оскільки розраховували, щоб встановити якісні характеристики моделі, то дані у рівнянні (1) вибрали довільно, але близькими за значеннями до величин, характерних для реальних кристалів. Вважали константу A і показник степеня m рівними одиниці, а $n = 8$ і $r_0 = 2,5$ Å. Потенціальну енергію кристала одержали сумуванням енергій його атомів:

$$E_k = 1/2 \sum_{i,j=1}^N U(\bar{r}_i - \bar{r}_j), \quad (2)$$

де $U(\bar{r}_i - \bar{r}_j)$ – енергія взаємодії пари атомів з координатами r_i і r_j .

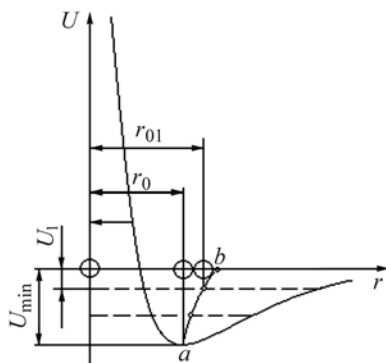


Рис. 1. Fig. 1.

Рис. 1. Залежність енергії міжатомної взаємодії U від відстані r між атомами [6].

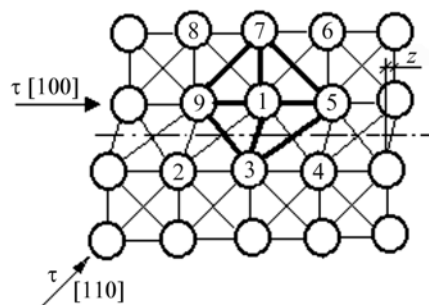


Рис. 2. Fig. 2.

Рис. 2. Зсув атомної площини у двовимірній моделі кристала.

Fig. 2. Shear of atomic plane in the two-dimension model of crystal.

Міжатомну відстань визначали з умови мінімальної потенціальної енергії кристала. Розрахунки для кристалів, які утворені різною кількістю атомів, свідчать про її зменшення зі збільшенням їх розміру [8]. Граничною, до якої вкорочується міжатомна відстань, є відстань для кристала безмежних розмірів $r_1 = 2,34 \text{ \AA}$, тоді як рівноважна міжатомна відстань парної взаємодії атомів $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$. Це характерне і для тривимірної ґратки.

Моделювання зсуву атомних площин. Використовуючи модель двовимірного кристала (рис. 2), досліджували зсув атомних площин. При цьому розраховували зміну потенціальної енергії атома 1. Вважали, що він рухається у напрямі [100] одночасно з його сусідами 5; 6; 7; 8; 9. Тоді зміна його енергії залежить тільки від взаємодії з трьома сусідніми атомами 2; 3; 4. Зміну його енергії зсуву за малих деформацій розраховували в напрямках [100] і [110] (рис. 3).

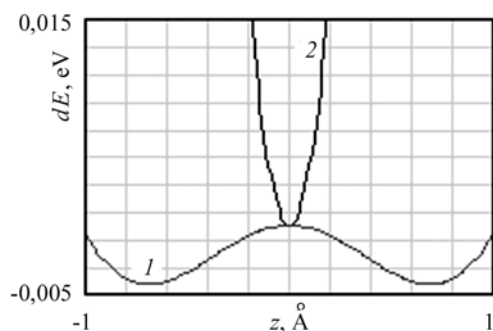


Рис. 3. Fig. 3.

Рис. 3. Залежність зміни потенціальної енергії атома 1 від зсуву z атомних площин у напрямках [100] (крива 1) і [110] (крива 2).

Fig. 3. Dependence of the change of atom potential energy 1 on the shear z of atomic planes in direction [100] (curve 1) and [110] (curve 2).

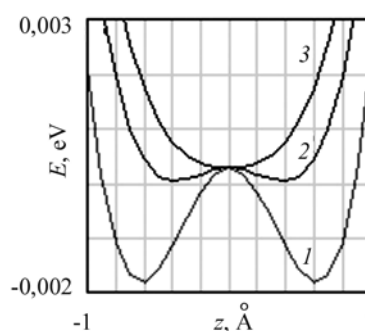


Рис. 4. Fig. 4.

Рис. 4. Зміна потенціальної енергії E за зсуву z атома 1 у напрямі [100] за різних температур: 1 – T_1 ; 2 – T_2 ; 3 – T_3 ; $T_3 > T_2 > T_1$.

Fig. 4. Variation of potential energy, E , under shear z of atom 1 in direction [100] for different temperatures: 1 – T_1 ; 2 – T_2 ; 3 – T_3 ; $T_3 > T_2 > T_1$.

Виявили, що енергія для зміщення атома 1 разом з атомами площини у кристалографічному напрямі [100] (крива 1) знижується, а в напрямі [110] (крива 2) підвищується. У першому випадку кристалічна ґратка безмежних розмірів під дією зовнішніх сил втрачає стійкість до зсувних деформацій, а отже, знаходиться в стані нестійкої рівноваги.

Моделювання зсуву атомних площин з урахуванням теплової енергії. Використовуючи двовимірну кристалічну ґратку (див. рис. 2) досліджували вплив температури на опір зсуву атомних площин за малих деформацій [9]. Для цього визначали форму рельєфу потенціальної енергії атома за зсуву атомної площини у напрямі [100] при трьох різних температурах (рис. 4). Зміну температури моделювали як зміну міжатомної відстані у кристалічній ґратці. Зі збільшенням кінетичної енергії атомів створюється внутрішній тиск, що обумовлює теплове розширення твердих тіл внаслідок збільшення міжатомної відстані.

Крива 1 (рис. 4), що описує зміну потенціальної енергії атома під час зсуву атомної площини, відповідає мінімальній температурі (0 К). Криві 2 і 3 ілюструють ситуацію, коли за підвищення температури міжатомна відстань збільшилась з $r_{01} = 2,335 \text{ \AA}$ за температури T_1 до $r_{02} = 2,45 \text{ \AA}$ при T_2 і до міжатомної $r_{03} = 2,6 \text{ \AA}$ при T_3 . Встановили, що зі збільшенням мінімальної відстані між атомами з рос-

том температури кристалічна ґратка стабілізується. Це проявляється у зменшенні “горба” на дні потенціальної ями кривої 2, яка описує зміну потенціальної енергії атома в кристалічній ґратці. Зі збільшенням відстані до $r_{03} = 2,6 \text{ \AA}$ (крива 3) “горб” зникає. Це означає, що для зміщення атома тут необхідна енергія, і свідчить про те, що ґратка за температури T_3 є стійкою. Отримані результати констатують температурну залежність стійкості двовимірної ґратки з квадратною коміркою, між атомну взаємодію в якій описує сферично-симетричний потенціал. Для нашої моделі зниження температури є дестабілізуючим фактором, через що квадратна ґратка стає нестійкою і незначні зовнішні зусилля викликають зсуви атомних площин. В результаті вона перетворюється з квадратної у трикутну, стійку за низьких температур. Таке перетворення можна розглядати як ПД. Підвищення температури викликає зворотний процес – відновлення ґратки з квадратною коміркою.

Обговорення результатів. Виявлено, що ПД за низьких температур, як і під час поліморфних перетворень, є наслідком втрати стійкості двовимірної кристалічної ґратки зі сферично-симетричним потенціалом МВ. Це притаманно лише тим ґраткам, що мають сферично-симетричний, або близький до нього потенціал МВ. Їх нестійкість пов’язана також із врахуванням взаємодії з дальніми атомами [10, 11], вплив яких може бути дестабілізуючим.

Одержані результати дають змогу пояснити розбіжності теорії Зегера з експериментальними залежностями границі текучості від температури. Зегер створив теорію температурної залежності границі текучості, використавши рівняння швидкості ПД під час термоактивованого руху дислокацій [12]. Згідно з нею, границя текучості повинна підвищуватися зі зниженням температури. Але дуже часто в області низьких температур вона для більшості металів і їх сплавів, навпаки, знижується. Ці розбіжності можна пояснити посиленням нестійкості ґратки з падінням температури. Це пов’язано з виникненням “горба” на дні потенціальної ями (див. рис. 4, крива 2). Таким чином, за низьких температур нестійкість ґратки визначає характер протікання ПД.

Внаслідок дестабілізації кристалічної ґратки зі зниженням температури течіння міді і сплавів на її основі зафіксовано навіть при 4 К [4]. У багатьох з них границя текучості тут нижча, ніж при 20 К. Домінуючим механізмом ПД є двійникування, під час якого зміщення атомів подібне до зміщення за МП [11]. В обох випадках атомні площини одночасно зсуваються на відстань, меншу за між атомну.

Отже, можна припустити, що під час кристалізації утворюються стійкі кристалічні ґратки, які існують у деякому діапазоні температур. Зі зниженням температури ґратка знову втрачає стійкість і перетворюється в нестійку. Внаслідок цього відбувається поліморфне перетворення, яке властиве не всім металам. Якщо воно відсутнє, кристалічна ґратка під час охолодження все одно втрачає стійкість (див. рис. 4). Через це під дією зовнішньої сили метали та їх сплави пластично деформуються двійникуванням. Виділення значної кількості теплової енергії під час МП і ПД свідчить про переміщення атомів у положення з нижчою потенціальною енергією.

Таким чином, в основі двійникування і МП лежить один і той самий процес – зміщення атомів у кристалі [13], але рушійні сили тут різні. Під час МП змінюється електронна структура твердих тіл [5], внаслідок чого миттєво за певної температури міняються потенціали міжатомної взаємодії і рівноважної відстані. В результаті виникають значні внутрішні сили, які переміщують атоми в нові положення, міняючи форму кристалічної ґратки. За відсутності поліморфних перетворень зі зниженням температури атоми плавно зміщуються, через що кристалічна ґратка переходить у стан нестійкої рівноваги. Внаслідок незначного теплового зміщення атомів дестабілізація ґратки несуттєва, тому внутрішні сили малі і

для переміщення атомів у стійкіші положення необхідні зовнішні сили. В цьому випадку кристалічна ґратка втрачає стійкість і пластично деформується.

ВИСНОВКИ

На основі одержаних результатів з урахуванням відомих фактів можна стверджувати, що подібність мартенситного перетворення і пластичної деформації пов'язана з втратою стійкості кристалічної ґратки зі зниженням температури. У першому випадку це зумовлено зміною характеру міжатомної взаємодії, а в другому – рівноважної відстані. Отже, пластичну деформацію за низьких температур слід розглядати як різновид поліморфного перетворення.

РЕЗЮМЕ. С помощью двухмерной дискретной модели показано, что в зависимости от температуры кристаллическая решетка может находиться в состоянии устойчивого или неустойчивого равновесия. При кристаллизации она устойчивая. С понижением температуры переходит в неустойчивое равновесие. Сделан вывод, что пластическая деформация при низких температурах, как и в процессе полиморфных превращений, является следствием потери устойчивости. Несмотря на то, что в основе двойникования и мартенситного превращения лежит один и тот же процесс – смещение атомов в кристалле, причины дестабилизации кристаллической решетки для них разные.

SUMMARY. Using the two-dimensional model of the crystal it is shown that the crystal lattice can be stable or unstable depending on the temperature. When crystal lattice appears during crystallization it is stable, but when a temperature drops the crystal lattice is unstable. A conclusion is done, that the process of low temperature plastic deformation, similar to polymorphic transformations, is caused by the loss of the crystal lattice stability. Both the twinning and martensitic transformation are the identical processes of atom displacement in a crystal. But the reasons of destabilization of crystal lattice in both cases are different.

1. Лободюк В. А., Эстрин Э. И. Изотермическое мартенситное превращение // Успехи физ. наук. – 2005. – **175**, № 7. – С. 745–766.
2. Коваль Ю. М., Сліпченко В. М., Головка В. П. Мартенситні перетворювання. Особливості кінетики // Вісник Черкаськ. нац. ун-ту. – 2007. – Вип. 114.
3. Физические процессы пластической деформации при низких температурах / В. З. Бенгус, В. А. Куклев, Г. С. Медько и др. – К.: Наук. думка, 1974. – 164 с.
4. Вигли Д. А. Механические свойства материалов при низких температурах. – М.: Мир, 1974. – 372 с.
5. Самсонов Г. В., Прядко И. Ф., Прядко Л. Ф. Конфигурационная модель вещества. – К.: Наук. думка, 1975. – 316 с.
6. Белоус М. В., Браун М. П. Физика металлов. – К.: Вищ. шк., 1986. – 343 с.
7. Полухин П. И., Горелик С. С., Воронцов В. К. Физические основы пластической деформации: Уч. пос. – М.: Металлургия, 1982. – 584 с.
8. Козак Л. Ю. Комп'ютерне моделювання зсуву атомної площини у двовимірній кристалічній ґратці // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 1999. – **35**, № 1. – С. 114–115.
(Kozak L. Yu. Computer simulation of shifts of an atomic plane in a two-dimensional crystal lattice // Materials Science. – 1999. – **35**, № 1. – P. 132–135.)
9. Козак Л. Ю. Комп'ютерне моделювання впливу температури на стійкість двовимірної кристалічної ґратки // Там же. – 1999. – **35**, № 6. – С. 119–120.
(Kozak L. Yu. Computer simulation of the influence of temperature on the stability of a two-dimensional crystal lattice // Ibid. – 1999. – **35**, № 6. – P. 896–898.)
10. Иванова Е. А. Механические свойства кристаллических решеток и нанокристаллов. http://www.ipme.ru/ipme/labs/dms/prive/ivanova/Home_page_Elena_Ivanova/Crystal%20lattices%20RUS.htm
11. Козак Л. Ю. Дослідження стійкості двохмірної кристалічної ґратки // Фізика і хімія твердого тіла. – 2001. – **2**(2). – С. 289–297.
12. Seeger A. Phil. Mag. – 1955. – **46**. – P. 1194–1217.
13. Калинин В. А., Томашевская И. С. О пластичности минералов при фазовых переходах // Докл. АН СССР. – 1983. – **268**. – С. 39–44.

Одержано 12.04.2012