На правах рукописи

ЕВТУШЕНКО Оксана Владимировна

ЗАКОНОМЕРНОСТИ И МЕХАНИЗМЫ МЕХАНИЧЕСКОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ B2 ФАЗЫ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Томск – 2008

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Томский государственный университет», в Сибирском физико-техническом институте и

Учреждении Российской академии наук Институте физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН.

Научные руководители:	доктор физико-математических наук, профессор Тюменцев Александр Николаевич
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Мейснер Людмила Леонидовна
	доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Иванов Юрий Федорович
Ведущая организация:	ГОУ ВПО «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

Защита состоится «20» ноября 2008 г. в 16:30 часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.07 при ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Томского государственного университета.

Автореферат разослан «____» ******** 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
Д. ф.-м. н., профессор И.В. Ивонин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Сплавы на основе никелида титана являются в настоящее время наиболее перспективными в прикладном отношении материалами, способными к проявлению эффектов памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичности (СЭ). Это обусловлено тем, что, помимо указанных эффектов, они обладают редким комплексом физико-механических свойств: не характерным для интерметаллидов соотношением высокой прочности и пластичности, высокими демпфирующими свойствами, хорошей циклической и коррозионной стойкостью, биосовместимостью и т.д.

Одной из важных физических задач на пути разработки целенаправленных способов управления особыми функциональными свойствами, является выяснение закономерностей механического двойникования как одного из важных механизмов пластической деформации TiNi сплавов и его роли в формировании указанных выше свойств. С этим явлением связывается высокая пластичность указанных сплавов в широкой (от 77 до 1000 К) области температур. В температурном интервале неупругой деформации этот механизм может определять напряжение перехода материала к пластической деформации.

В рамках указанной выше задачи, наиболее важными являются следующие проблемы. 1 - физическая природа развития механического двойникования в B2 фазе никелида титана и невозможность описания этого явления в упорядоченных сплавах традиционными механизмами двойникования. 2 - специфическая особенность механического двойникования в B2 фазе TiNi сплавов – образование двойников деформации в плоскостях со сложными ({113}, {114}, {117}, {227}, {332} и др.) индексами. Разработанные в связи с этим новые механизмы двойникования являются чисто геометрическими, не способными объяснить причины этой особенности. Кроме того, до сих пор при анализе указанных выше вопросов не учитывается такая, на наш взгляд, важная особенность механического двойникования никелида титана, как тесная связь этого явления с мартенситными превращениями (МП), протекающими под нагрузкой.

Исходя из изложенного выше, ***целью диссертационной работы*** является исследование особенностей механического двойникования в монокристаллах TiNi сплавов; обоснование нового механизма этого явления – механизма локального обратимого структурного превращения мартенситного типа с осуществлением обратного превращения по альтернативной системе; анализ роли этого механизма при формировании механических свойств этих сплавов.

Для достижения этой цели в работе решались следующие ***задачи:***

1. Исследование особенностей образования двойников деформации в монокристаллах TiNi сплавов, их взаимосвязи с МП, особенностей дефектной субструктуры и упруго напряженного состояния в зонах двойникования.

2. Экспериментальное обоснование нового механизма механического двойникования - механизма прямого плюс обратного (по альтернативной системе) структурного превращения мартенситного типа.

3. Расчеты и теоретический анализ на основе этого механизма тензоров дисторсий при образовании {112} и {113} двойников деформации. Обоснование новых носителей пластической деформации и переориентации кристалла – микро-

объемов неравновесных фазово-структурных состояний, обеспечивающих высокие значения однородной деформации превращения Бейновского типа.

4. Выявление взаимосвязей двойникования с особенностями механического поведения монокристаллов TiNi сплава – величиной предела текучести и явлением асимметрии этой величины при растяжении и сжатии монокристаллов TiNi сплава в направлении типа <001>.

5. Теоретический анализ напряжения механического двойникования как локального обратимого структурного превращения мартенситного типа, основанный на учете диагональных компонент тензора приложенных напряжений. Обоснование определяющей роли однородной деформации прямого плюс обратного МП в явлении асимметрии предела текучести при растяжении и сжатии <001> монокристаллов TiNi сплава.

Научная новизна.

1. Показано, что в температурном интервале индуцированного напряжением обратимого мартенситного превращения важным механизмом пластической деформации при прокатке и сжатии <001> монокристаллов TiNi сплавов является механическое двойникование B2 фазы, развивающееся путем прямого плюс обратного (B2→B19(B19′)→B2) мартенситного превращения с изменением системы обратного превращения и приводящее к формированию {113} и {114} двойников деформации.

2. На основе теоретического анализа дисторсий кристаллической решетки в процессе (B2→B19(B19′)→B2) превращений, приводящих к образованию {113} и {112} двойников деформации, развиты представления о новых носителях деформации и переориентации кристалла – микрообъемах неравновесных фазово-структурных состояний с высокой составляющей однородной деформации превращения Бейновского типа, как важной моды дисторсии, определяющей напряжение механического двойникования и плоскость габитуса {113} двойников деформации.

3. Введено понятие фактора нормальных напряжений, приведенных к главным осям тензора однородной деформации превращения. Показана возможность использования этого фактора для количественного анализа асимметрии предела текучести при растяжении и сжатии монокристаллов TiNi сплавов в направлениях типа <001>.

Научная и практическая значимость.

1. Предложенный в работе новый механизм и новые носители деформации и переориентации кристаллической решетки представляют значительный интерес при анализе ЭПФ и СЭ в сплавах с термоупругими мартенситными превращениями; физической природы и механизмов кооперативных явлений пластического течения в условиях фазовой нестабильности кристалла в полях напряжений; поведения материалов в условиях интенсивных внешних воздействий и активизации мезоуровня деформации в зонах концентраторов напряжений.

2. Фактор нормальных напряжений, приведенных к главным осям тензора однородной деформации превращения, может быть использован при исследовании закономерностей ориентационной зависимости механического поведения материалов с термоупругими и деформационными мартенситными превращениями.

3. Практическая значимость полученных в работе результатов заключается в возможности их использования при разработке методов целенаправленного контроля параметров микроструктуры, определяющих функциональные и прочностные свойства материалов с ЭПФ и СЭ.

Достоверность полученных результатов обеспечивается физической корректностью постановки и решения задач диссертации, использованием современных экспериментальных методов исследования и теоретических представлений физики твердого тела, соответствием экспериментальных результатов данным других авторов.

Вклад автора состоит в проведении экспериментов, обработке полученных результатов, совместных с научным руководителем постановке задач диссертации, обсуждении результатов, формулировке выводов и положений, выносимых на защиту, написании статей по теме диссертации.

Положения, выносимые на защиту:

1. Механическое двойникование B2 фазы как важный механизм пластической деформации при прокатке и сжатии <001> монокристаллов TiNi сплавов, развивающийся в полях высоких локальных напряжений в температурном интервале индуцированного напряжением обратимого мартенситного превращения в процессе пластической деформации мартенсита B19′ с участием B19′→B2 превращения.

2. Закономерности образования {113} и {114} двойников деформации B2 фазы, свидетельствующие о реализации нового механизма деформации и переориентации кристаллической решетки - механизма прямых плюс обратных (по альтернативным системам) B2→B19(B19′)→B2 мартенситных превращений с участием несдвойникованной и предварительно сдвойникованной мартенситной фазы.

3. Результаты теоретического анализа дисторсий кристаллической решетки в процессе (B2→B19(B19′)→B2) превращений, приводящих к образованию {112} и {113} двойников деформации. Представления о новых носителях деформации и переориентации кристалла – микрообъемах неравновесных фазово-структурных состояний с высокой составляющей однородной деформации превращения Бейновского типа. Необходимость учета диагональных компонент тензора напряжений при анализе закономерностей пластической деформации в зонах указанных выше превращений.

4. Однородная деформация превращения Бейновского типа как важная мода дисторсии, определяющая напряжение механического двойникования и асимметрию предела текучести при растяжении и сжатии монокристаллов TiNi сплавов в направлениях типа <001>. Фактор нормальных напряжений, приведенных к главным осям тензора однородной деформации превращения, и возможность его использования для количественного анализа указанной выше асимметрии.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на: International Conference CADAMT' 2003 Computer- Aided Design of Advanced Materials and Technologies (Tomsk, 2003), Петербургских чтениях по проблемам прочности, посвященных 90-летию со дня рождения А.Н. Орлова (г. Санкт-Петебург, 2007), Всероссийской конференции молодых ученых "Физическая ме-

зомеханика материалов" (г. Томск, 2001), Региональной научной конференции студентов, аспирантов, молодых ученых (г. Новосибирск, 2001), Российской научной студенческой конференции (г. Томск, 2002, 2004), Всероссийских конференциях молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (г. Томск, 2005, 2006, 2007), Международной школе-конференции молодых ученых “Физика и химия наноматериалов” (г. Томск, 2005), Российской школе-семинаре молодых ученых «Актуальные проблемы физики, технологий и инновационного развития» (г. Томск, 2004, 2006).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 25 работах. Перечень важнейших из них приведен в конце автореферата.

Структура и объём диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, четырёх разделов, заключения; всего 133 страницы, в том числе 43 рисунка, 5 таблиц и список цитируемой литературы из 156 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, дана краткая характеристика современного состояния проблемы, сформулированы цель работы, положения, выносимые на защиту, научная новизна полученных результатов и их практическая значимость; представлена структура диссертации.

В первом разделе **"Особенности механического двойникования в B2 фазе никелида титана и атомные механизмы мартенситных превращений"** изложены результаты экспериментального исследования этого явления. Показано, что в некоторых ориентациях монокристаллов указанных сплавов это основной механизм пластической деформации; и его необычной особенностью является механическое двойникование в плоскостях со сложными индексами: {113}, {114}, {115}, {117} и др. Значительное количество экспериментальных работ указывает на тесную связь двойникования с мартенситными превращениями.

Представлены литературные данные по разработке механизмов образования указанных выше двойников деформации. Показано, что недостатками этих механизмов является то, что они не вскрывают физическую природу активизации механического двойникования в B2 фазе никелида титана.

В заключительном разделе обзора в связи с необходимостью привлечения мартенситных превращений для анализа закономерностей двойникования рассмотрены атомные модели этих превращений в сплавах никелида титана.

Второй раздел посвящен постановке задач диссертационной работы, обоснованию выбора материалов исследования, способов их обработки и описанию методики экспериментальных исследований.

В работе использовали монокристаллы сплавов Ti–50.8ат.% Ni (сплав I) и Ti–51.3ат.% Ni (сплав II), легированных Fe и Mo в количестве до 0.3 ат.%, с температурами начала и конца прямого и обратного МП $M_н = 266$ К, $M_к = 249$ К, $A_н = 271$ К и $A_к = 299$ К для сплава I и $M_н$=208 К, $M_к$=168 К, $A_н$=220 К, $A_к$=268 К для сплава II. Исследование асимметрии предела текучести проведено с использованием монокристаллов Ti–47ат.%Ni–3ат.%Fe с характеристическими температурами $M_н = 146$ К, $M_к = 118$ К, $A_н = 187$ К, $A_к = 210$ К. Точки МП определяли по температурной зависимости электросопротивления. Монокристаллы выращивали методом Бриджмена без затравок в атмосфере гелия. Заготовки для выращивания монокристаллов были выплавлены с использованием губчатого титана и никеля марки HI.

После выращивания кристаллы гомогенизировали при T= 1233 К в течение 20 ч с последующей закалкой в ледяную воду.

Образцы для механических испытаний сжатием размерами 4×4×9 мм^3 получали методом электроискровой резки последующей шлифовки для удаления наклепанного слоя и электролитической полировки в растворе 90% CH_3COOH+10% $HClO_4$ при напряжении 25 В. Механические испытания проводили на универсальной испытательной машине “Instron-1185” при комнатной температуре со скоростью деформации 10^{-4} с$^{-1}$. Прокатку осуществляли при комнатной температуре на прокатном стане со степенью обжатия за один проход 0,5 %. Температура деформации для сплава I находилась в интервале ($M_н \div A_к$) < M_d (Здесь M_d - температура начала пластической деформации B2 фазы при переходе к точке M_d из температурной области инициируемого напряжением МП или температура начала МП под нагрузкой при переходе к этой точке из высокотемпературной области), для сплава II – в интервале ($M_н \div M_d$).

Структурные исследования проведены методами оптической металлографии и просвечивающей электронной микроскопии.

Третий раздел **"Закономерности и механизмы механического двойникования при пластической деформации монокристаллов TiNi сплавов"** посвящен исследованию закономерностей механического двойникования в B2 фазе сплавов на основе никелида титана и разработке на этой основе нового механизма двойникования – механизма прямых плюс обратных (B2→B19(B19′)→B2) МП с осуществлением обратных превращений по альтернативным системам.

В разделе 3.1 приведены результаты исследования микроструктуры сплавов I и II после прокатки при комнатной температуре. Показано, что характерной особенностью пластической деформации является при этом образование двух типов полос локализации деформации (ПЛД).

1. ПЛД, границы которых можно интерпретировать как следы габитусных плоскостей {0.89 0.22 0.40} мартенсита B19'. Показано, что эти полосы часто имеют характерную для мартенситных пластин линзовидную форму (рис. 1), но не являются пластинами мартенсита, так как дают картину микродифракции, характерную для B2-фазы. Внутри ПЛД обнаруживается микрополосовая субструктура с границами, параллельными плоскостям {110} B2 решетки, которые по ориентационному соотношению с мартенситной решеткой параллельны плоскостям {001} составного упругого двойникования в фазе B19′. Все полосы этого типа разориентированы относительно окружения на небольшие (не более ~ 10^0) углы.

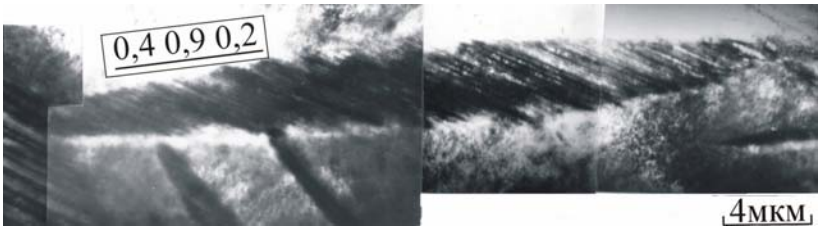

Рис. 1 Полоса локализации деформации с малоугловой переориентацией кристаллической решетки

2. Более грубые ПЛД, которые состоят из пачек длинных (десятки мкм) микрополос толщиной в доли микрона (рис. 2). Электронномикроскопический анализ следов показал, что границы этих микрополос параллельны плоскости $(1\,\bar{3}\,1)$, а кристаллическая решетка внутри них переориентирована относительно окружения на углы,

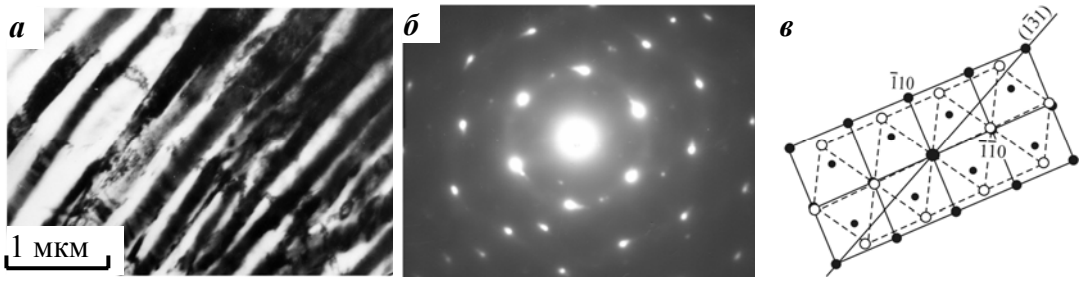

Рис. 2. Пачка $(1\bar{3}1)$ микродвойников деформации в монокристалле сплава I после прокатки ($\varepsilon \approx 7\%$) при комнатной температуре.

а –изображение в светлом поле; *б*– картина микродифракции; *в* – схема электронограммы: ось зоны $[\bar{1}11]$ двойника параллельна оси зоны [001] матрицы

близкие к 50° вокруг осей типа <110>. Следовательно, эти полосы являются типичными $(1\bar{3}1)$ двойниками деформации B2 фазы.

С ростом степени деформации объем материала занятый двойниками и число их систем возрастают. При этом в зонах обратимого B2→B19′→B2 МП обнаружены двухфазные области со значительным количеством аустенита исходной (до деформации) ориентации и частично сохранившегося после деформации мартенсита B19. Наблюдается также формирование широких (десятки микрон) {113} двойников деформации, содержащих пластинки мартенсита B19′.

Важной особенностью микроструктуры внутри и в окрестности представленных выше ПЛД и двойников деформации является формирование структурных состояний с высокими ($\chi_{ij} \approx 10$ - 20 град/мкм) значениями кривизны кристаллической решетки и локальных остаточных внутренних напряжений $\sigma_{лок} \approx E/60$ - $E/40$.

В разделе 3.2 представлены результаты исследования особенностей механического двойникования при сжатии (ε = (2.2 – 8.7) %, таблица 1) монокристаллов сплава I в направлении [001]. Деформацию осуществляли при комнатной температуре (в температурном интервале ($M_н$ - $A_к$) < M_d) с разгрузкой и последующим нагревом деформированных образцов до температуры 373 К (выше M_d).

Таблица 1 – Соотношение величин от вкладов обратимой деформации, связанной с ЭПФ ($\varepsilon_{ЭПФ}$), СЭ ($\varepsilon_{СЭ}$) и пластической деформации ($\varepsilon_{пл}$) в зависимости от величины полной (ε) деформации образцов сплава I при T = 20 °C.

Тип деформации	Степень деформации, %				
$\varepsilon = \varepsilon_{СЭ}+\varepsilon_{ЭПФ}+\varepsilon_{пл}$	2.2	3.8	4.2	5.6	8.7
$\varepsilon_{ЭПФ}$	1	2.0	2.3	2.8	2.7
$\varepsilon_{пл}$	0	0	0.2	1.8	5.3
$\varepsilon_{СЭ}$	1.2	1.6	1.7	1	0.7

Показано, что ЭПФ и СЭ обнаруживаются во всем интервале ε = (2.2 – 8.7) %. При величинах ε = 3.8 и 4.2 %, близких к расчетным значениям деформации B2→B19′ превращения в процессе сжатия в направлении [001], практически вся деформация является обратимой. Следовательно, после такой деформации исходный кристалл B2 фазы полностью превращается в монокристалл мартенсита B19′, и последующая де-

формация осуществляется путем пластической деформации в мартенситной фазе.

В процессе металлографического и электронномикроскопического исследования образцов после пластической деформации обнаружено формирование нескольких типов дефектной субструктуры.

1. Зоны обратимого мартенситного превращения, приводящего к ЭПФ и СЭ (см. $\varepsilon_{СЭ}$ и $\varepsilon_{ЭПФ}$ в таблице 1). Особенностями их микроструктуры являются, во-первых, микрополосы с повышенной ($\approx 5\times10^9$ см$^{-2}$) плотностью дислокаций с векторами Бюргерса **b** = [100], лежащих в плоскостях типа {110} B2 фазы; во-вторых, {113} двойники деформации шириной десятые доли микрона; в-третьих, участки с высокой ($\varepsilon_{упр} = \Delta d/d \approx 3.5$ %) упругой деформацией кристаллической решетки, свидетельствующие о формировании высоких локальных внутренних напряжений $\sigma_{лок} \approx E\varepsilon_{упр} \approx E/30$ (E – модуль Юнга).

2. Широкие (несколько десятков микрон) {113} двойники деформации. Внутри этих двойников наблюдается микрополосовая структура с малоугловыми разориентировками и повышенной (около 10^{10} см$^{-2}$) плотностью дислокаций. Кроме того, обнаружены клиновидные полосы шириной несколько микрон, характер переориентации которых позволил аттестовать эти полосы как двойники деформации в плоскостях {114}. Внутри и в окрестности этих двойников обнаружены высокие ($\sigma_{лок} \approx E/40$) локальные внутренние напряжения и стабилизированные этими напряжениями участки остаточного мартенсита B19′.

Эти результаты позволили сделать заключение, что в температурном интервале индуцированного напряжением обратимого мартенситного превращения важным механизмом пластической деформации при сжатии монокристаллов в направлении [001] является механическое двойникование с образованием {113} и {114} двойников B2 фазы, которое происходит в процессе пластической деформации мартенсита B19′ после полного B2→B19′ превращения с участием обратного B19′→B2 превращения. Это свидетельствует о весьма высокой вероятности формирования этих двойников предложенными в постановке задачи механизмами прямых плюс обратных (по альтернативным системам) МП.

В разделе 3.3 изложены результаты разработки атомных моделей указанных выше превращений как механизмов образования полос локализации и двойников деформации.

В основу этих моделей положена геометрическая теория МП в TiNi сплавах [2], в которой механизмы атомных перестроек в ходе B2→B19′ превращений качественно подобны таковым в ходе ОЦК→ГПУ превращений. С использованием этой теории (в модели мартенситной фазы как фазы с искаженной ГПУ решеткой) проведен анализ переориентации кристаллической решетки в ходе B2→B19(B19′)→B2 превращений для разных систем обратного B19(B19′)→B2 превращения в условиях реализации ориентационного соотношения (ОС) Курдюмова – Закса (К-З). Атомные перестройки в ходе прямого B2→B19(B19′) (ОЦК→ГПУ) превращения (рис. 3 *а*) являются при этом комбинацией однородной деформации превращения (сжатия и растяжения в направлениях [001] и[$\bar{1}$10], соответственно) с поворотом на угол 5.26° вокруг оси, нормальной

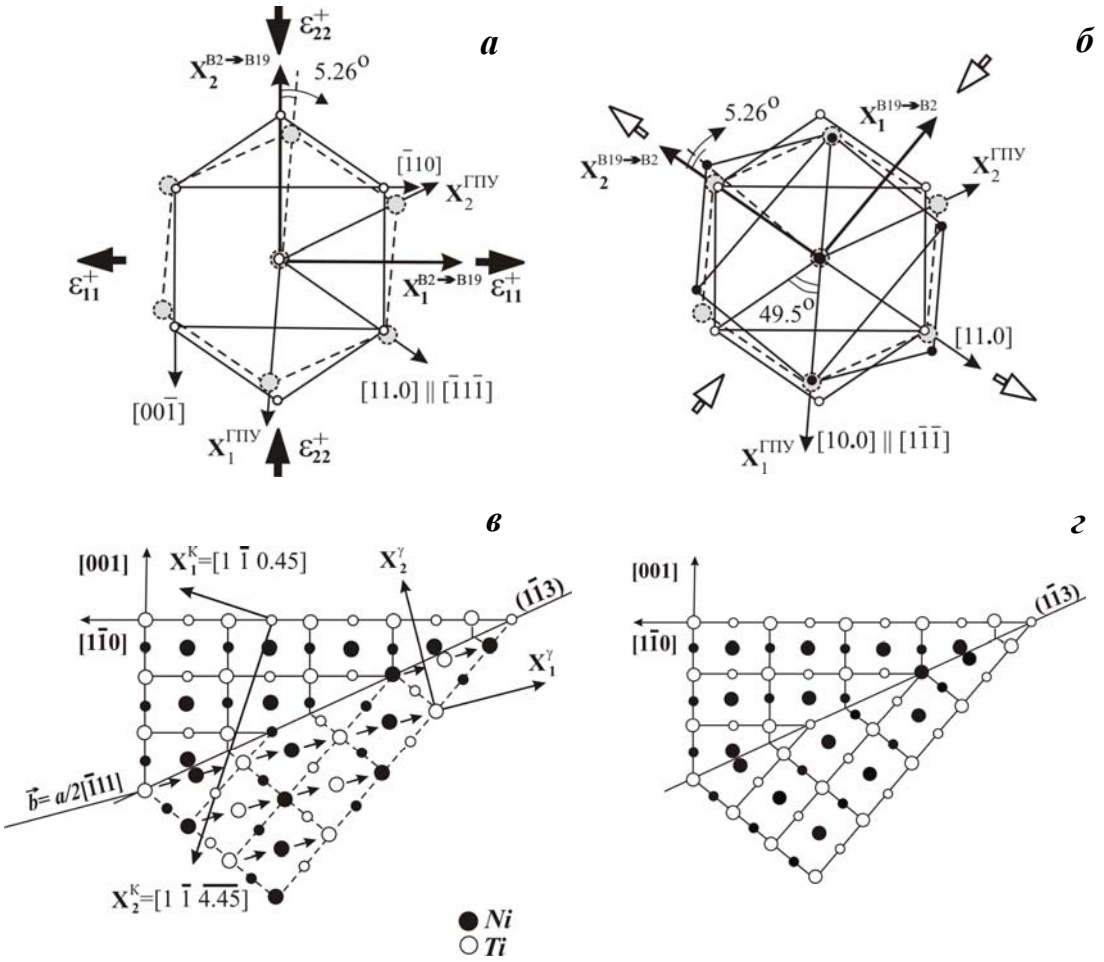

Рис. 3 – Схемы атомных перестроек в плоскости ОЦК→ГПУ→ОЦК превращения при образовании $(1\bar{1}3)$ двойника деформации в ходе прямого (*а*) и прямого плюс обратного (*б*) превращений. Светлые кружки – атомы ОЦК фазы в исходной решетке; крупные кружки – атомы промежуточной ГПУ фазы после прямого превращения; темные кружки – атомы ОЦК фазы после обратного превращения.

$\mathbf{X_i}^{B2\to B19}$ – главные оси прямого превращения; $\mathbf{X_i}^{B19\to B2}$ – главные оси обратного превращения; $\mathbf{X}_i^{ГПУ}$ – система координат ГПУ фазы.

в, *г* – дислокационная модель восстановления сверхструктуры B2 фазы.

$\mathbf{X_i}^{\gamma}$ – система координат для определения сдвиговой деформации.

$\mathbf{X_i}^{K}$ - главные оси тензора $\varepsilon_{K}^{\pm}$

плоскости (110) B2 фазы.

Показано, что при принятой модели фазового перехода для каждого варианта прямого МП существует шесть вариантов обратного превращения, вытекающих из 3-х возможных направлений растяжения ГПУ решетки в плоскости базиса, каждому из которых соответствуют два варианта поворотов кристаллической решетки на углы ±5.26° вокруг оси [00.1] (или [110] B2 фазы). Следствием изменения при обратном превращении осей деформации является переориентация кристаллической решетки ОЦК фазы на угол +60° или –60° вокруг оси [110]. ±5.26 градусные повороты могут иметь при прямом и обратном превращениях

как одинаковые, так и разные знаки. Поэтому они либо взаимно уничтожаются, либо приводят к изменению (на ±10.52°) угла ±60° переориентации кристаллической решетки. Общая переориентация является, таким образом, результатом комбинации указанных выше ±60° и ±10.52° поворотов. Все возможные варианты B2→B19(B19′)→B2 переориентации кристаллической решетки представлены в таблице 2.

На рис. 3 приведен пример прямого плюс обратного превращения с образованием {113} двойника деформации. Видно, что результатом такого превращения является формирование нового структурно и энергетически невыгодного варианта сверхструктуры. Вместо чередования слоев Ti и Ni в направлениях <001>, эти слои чередуются в направлениях типа <110>. В результате, проблема восстановления сверхструктуры B2 фазы в этих зонах решается (рис. 3 *в, г*) путем дислокационных сдвигов в каждой четной (или нечетной) плоскости $(1\bar{1}2)$ с характерными для ОЦК решетки векторами Бюргерса дислокаций $\frac{a}{2}[\bar{1}11]$. Следовательно, с учетом сохранения в двойниках деформации сверхструктуры B2 фазы, двойникование в никелиде титана можно моделировать как комбинации прямых плюс обратных B2→B19′(ГПУ)→B2 МП с указанными выше сдвигами.

Таблица 2 – Векторы переориентации [θ] в процессе ОЦК→ГПУ→ОЦК превращений

№	ОС прямого превращения	ОС обратного превращения	θ_{min}
1	(110) ‖ (00.1); $[\bar{1}1\bar{1}]$ ‖ [11.0]	(00.1) ‖ (110) [11.0] ‖ $[\bar{1}1\bar{1}]$	0^0
2	(110) ‖ (00.1); $[\bar{1}1\bar{1}]$ ‖ [11.0]	(00.1) ‖ (110) [01.0] ‖ $[\bar{1}11]$	10.52^0 $[\bar{1}\bar{1}0]$
3	(110) ‖ (00.1); $[\bar{1}1\bar{1}]$ ‖ [11.0]	(00.1) ‖ (110) [10.0] ‖ $[1\bar{1}\bar{1}]$	49.48^0 [110]; ≈ $(1\bar{1}3)$ или $(\bar{3}32)$ двойник
4	(110) ‖ (00.1); $[\bar{1}1\bar{1}]$ ‖ [11.0]	(00.1) ‖ (110) [01.0] ‖ $[\bar{1}1\bar{1}]$	60^0 [110]; ≈ $(2\bar{2}5)$ двойник
5	(110) ‖ (00.1); $[\bar{1}1\bar{1}]$ ‖ [11.0]	(00.1) ‖ (110) [10.0] ‖ $[\bar{1}1\bar{1}]$	60^0 $[\bar{1}\bar{1}0]$; ≈ $(\bar{2}25)$ двойник
6	(110) ‖ (00.1); $[1\bar{1}\bar{1}]$ ‖ $[0\bar{1}.0]$	(00.1) ‖ (110) $[0\bar{1}.0]$ ‖ $[1\bar{1}1]$	70.52^0 [110]; $(1\bar{1}2)$ двойник

Сопоставление представленных выше результатов с литературными данными показало также, что с привлечением обсуждаемого здесь механизма удается объяснить образование {114} двойников деформации, являющихся результатом B2→B19′(ГПУ)→B2 превращения с участием предварительно сдвойникованной мартенситной фазы.

Таким образом, в рамках механизма прямых плюс обратных (по альтернативным системам) МП удается решить следующие проблемы: 1 - понять физическую природу развития механического двойникования в TiNi сплавах, заключающуюся в фазовой нестабильности B2 фазы в полях высоких локальных напряжений; 2. - в единой модели описать образование ПЛД с малоугловыми гра-

ницами, традиционное для ОЦК кристаллов двойникование по плоскостям типа {112} и образование двойников в плоскостях со сложными ({113}, {332}, {225}, {114}) индексами; 3 - в сочетании с энергетически выгодными сдвигами с характерными для ОЦК решетки векторами Бюргерса дислокаций $\frac{a}{2}$<111> в плоскостях типа {112}, объяснить сохранение сверхструктуры B2 фазы во всех указанных выше двойниках деформации.

В четвертом рзделе **«Дисторсии кристаллической решетки и асимметрия предела текучести в условиях механического двойникования в B2 фазе никелида титана»** проведен теоретический анализ дисторсий кристаллической решетки в процессе механического двойникования B2 фазы механизмом прямого плюс обратного (по альтернативной системе) МП. Установлена взаимосвязь механического двойникования с эффектом асимметрии предела текучести при растяжении и сжатии монокристаллов TiNi сплавов в направлениях типа <001>. С привлечением понятия фактора нормальных напряжений, приведенных к главным осям тензора однородной деформации превращения, дано объяснение этого явления.

В разделе 4.1 с использованием представленной выше модели B2→B19′(ГПУ)→B2 превращения (рис. 3) рассчитаны тензоры дисторсии кристаллической решетки при образовании {112} и {113} двойников деформации B2 фазы. Согласно этой модели, полная дисторсия указанного превращения ($\beta^{\pm}$) складывается из трех компонент: однородной ("контракционной") деформации превращения Бейновского типа - $\beta_{\kappa}^{\pm}$; сдвиговой компоненты, необходимой для восстановления B2 сверхструктуры в сдвойникованной области - $\beta_{\gamma}^{\pm}$; поворотной моды дисторсии - $\beta_{\omega}^{\pm}$. В приближении малых деформаций

$$\beta^{\pm} = \beta_{\kappa}^{\pm} + \beta_{\gamma}^{\pm} + \beta_{\omega}^{\pm}.$$

Тензоры дисторсии однородной деформации превращения не содержат антисимметричной части и сводятся к тензорам деформации $\beta_{\kappa}^{\pm} \equiv \varepsilon_{\kappa}^{\pm}$. Их компоненты рассчитаны с использованием экспериментальных значений деформации кристаллической решетки в процессе B2→B19′ превращения. Показано, что после приведения к главным осям деформации эти тензоры будут иметь вид:

$$\text{Для двойника в плоскости } \{113\}: \ \beta_{\text{К}}^{\pm} \equiv \varepsilon_{\text{К}}^{\pm} = \begin{pmatrix} 0.084 & 0 & 0 \\ 0 & -0.084 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (1)$$

$$\text{Для двойника в плоскости } \{112\}: \ \beta_{\text{К}}^{\pm} \equiv \varepsilon_{\text{К}}^{\pm} = \begin{pmatrix} 0.094 & 0 & 0 \\ 0 & -0.094 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (2)$$

Тензоры дисторсий сдвиговых компонент деформации (β_{γ}) удобно записать в системах координат (X_1^{γ}, X_2^{γ}, X_3^{γ} на рис. 3), содержащих базисные оси параллельные направлениям сдвигов (X_1^{γ}) и нормалям к плоскостям сдвига (X_2^{γ}). В этих системах координат тензоры β_{γ} для анализируемых здесь {113} и {112}

двойников деформации одинаковы и имеют лишь одну ненулевую компоненту $\partial U_1/\partial X_2$, абсолютное значение которой равно отношению величины сдвига ($a\sqrt{3}/2$) к удвоенному расстоянию между плоскостями сдвига $2d_{\{112\}} = 2a\sqrt{6}$. После разделения β_γ на симметричную (тензор деформации $\varepsilon_{ij} = (\partial U_j/\partial X_i + \partial U_i/\partial X_j)/2$) и антисимметричную (тензор поворота $\omega_{ij} = (\partial U_j/\partial X_i - \partial U_i/\partial X_j)/2$) части и приведения ε_γ к диагональному виду получим:

$$\varepsilon_\gamma = \frac{1}{8\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.088 & 0 \\ -0.088 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (3)$$

$$\omega_\gamma = \frac{1}{8\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0.088 & 0 \\ -0.088 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4)$$

$$\varepsilon_\gamma = \begin{pmatrix} -0.088 & 0 & 0 \\ 0 & 0.088 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (5)$$

Тензор дисторсии, описывающий поворот кристалла до ОС К-З также не зависит от типа ({112} или {113}) анализируемого двойника. Поскольку во всех приведенных на рис. 3 системах координат ($X_i^{B2\to B19}$, $X_i^{B19\to B2}$, X_i^{γ}) этот поворот осуществляется в направлении X_3, описывающий его тензор дисторсии $\beta_\omega^{\pm}$ во всех этих системах имеет одинаковый вид. С учетом того, что при образовании как {113}, так и {112} двойников в процессе прямого и обратного МП повороты осуществляются в одну сторону, в обоих случаях угол поворота равен 2α (α = 5.26°, см. рис. 3) и тензор поворота имеет вид:

$$\beta_\omega^{\pm} = \omega_{\text{К-З}}^{\pm} = tg2\alpha\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0.186 & 0 \\ -0.186 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

После приведения тензоров к единой системе координат, сложения и разделения на симметричную ($\varepsilon^{\pm}$) и антисимметричную ($\omega^{\pm}$) части, полные дисторсии прямых плюс обратных превращений при образовании {113} и {112} двойников деформации запишутся в виде:

$$\beta^{\pm}\{113\} = \varepsilon_I^{\pm} + \omega_I^{\pm} = \begin{pmatrix} 0.114 & -0.125 & 0 \\ -0.125 & -0.114 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0.273 & 0 \\ -0.273 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (7)$$

$$\beta^{\pm}\{112\} = \varepsilon_I^{\pm} + \omega_I^{\pm} = \begin{pmatrix} 0.167 & -0.068 & 0 \\ -0.068 & -0.167 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0.097 & 0 \\ -0.097 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (8)$$

Как видно из соотношений (1), (2) и (5), вклад однородной деформации превращения Бейновского типа в общую деформацию превращения при образовании {113} и {112} двойников деформации сравним с вкладом сдвиговой (дислокационной) моды деформации. Кроме того, при анализе последней следует учитывать, что в рассматриваемой здесь модели она необходима лишь для восста-

новления сверхструктуры B2 фазы, и важным фактором ее (дислокационной моды) реализации, помимо величины приведенных касательных напряжений, является термодинамический стимул, связанный с восстановлением порядка.

Эти обстоятельства позволили сделать заключение, что важной модой дисторсии в процессе механического двойникования механизмами (B2→B19(B19′)→B2) превращений является однородная деформация превращения Бейновского типа. Следовательно, при анализе закономерностей этого явления, помимо сдвиговых, необходимо учитывать нормальные (диагональные) компоненты тензора напряжений в зонах превращений.

В разделе 4.2 проведены расчеты инвариантных плоскостей (B2→B19(B19′)→B2) превращений при образовании {113} и {112} двойников деформации.

Поскольку в процессе этих превращений стимул к реализации сдвиговой моды деформации (необходимой лишь для восстановления сверхструктуры B2 фазы) появляется только после ОЦК→ГПУ→ОЦК превращения, расчеты плоскостей нулевых дисторсий проведены в предположении, что эти плоскости определяются представленными в предыдущем разделе тензорами однородной деформации превращения $\varepsilon^{1}_{K^{\pm}}$. Как видно из выражений (1) и (2), оба этих тензора удовлетворяют необходимым и достаточным условием наличия инвариантной плоскости (равенства нулю одной из компонент тензора, записанного в главных осях деформации и противоположные знаки деформации двух других компонент).

Рассчитанные значения индексов Миллера инвариантных плоскостей анализируемых здесь двойников приведены в таблице 3. Видно, что для {113} двойника деформации одна из рассчитанных инвариантных плоскостей практически совпадает с плоскостью двойникования - угол между плоскостями и $(1\bar{1}3)$ и $(1\bar{1}3.21)$ равен 1.47°. При образовании {112} двойника угол отклонения плоскости двойникования от рассчитанной теоретически инвариантной плоскости (около 7°) в несколько раз больше. Следовательно, в процессе прямых плюс обратных (B2→B19(B19′)→B2) мартенситных превращений наиболее благоприятные условия имеют место при образовании {113} двойников деформации. Сделано предположение, что с этим может быть связан тот факт, что именно этот тип двойников чаще всего обнаруживается экспериментально.

Таблица 3 – Расчетные значения индексов Миллера инвариантных плоскостей (B2→B19(B19′)→B2) превращений при образовании двойников деформации

Тип двойника	Индексы инвариантных плоскостей	Отклонение от плоскости двойникования, град
$(1\bar{1}3)$	$(1\ \bar{1}\ 3.21)$ и $(\bar{1}\ 1\ 0.85)$	1.47°
$(1\bar{1}2)$	$(1\ \bar{1}\ 2.65)$ и $(\bar{1}\ 1\ 1.07)$	7.2°

В разделе 4.3 на основе результатов экспериментальных исследований температурной зависимости предела текучести монокристаллов TiNi сплавов (рис. 4) и представленного выше механизма механического двойникования B2 фазы (рис. 3) проведен анализ асимметрии механического поведения при растяжении

и сжатии указанных материалов в направлении [001].

В основу анализа положены предположения, что величина предела текучести определяется напряжением механического двойникования, а важной модой дисторсии, определяющей это напряжение, является однородная деформация превращения типа деформации Бейна, которая осуществляется под действием нормальных (диагональных) компонент тензора напряжений в зонах превращений.

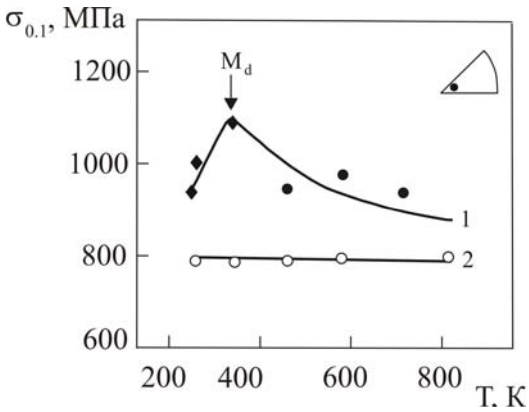

Рис. 4. Температурная зависимость напряжения мартенситного превращения (♦) и предела текучести (•, о) при растяжении (кривая 1) и сжатии (кривая 2) монокристаллов Ti-47 ат.%Ni-3 ат.%Fe в направлении [001]

Поэтому для анализа асимметрии предела текучести при растяжении и сжатии монокристаллов никелида титана в направлении [001] в работе по аналогии с фактором Шмида (***m***), характеризующим проекцию приложенного напряжения на направление сдвига, введено понятие фактора нормальных напряжений (***n***), приведенных к главным осям однородной деформации превращения, который определяет проекции приложенного напряжения на направления атомных смещений по главным осям тензора $\dot{\varepsilon}_{К}^{\pm}$:

$$\boldsymbol{n_i} = \cos\alpha_i . \quad (9)$$

Здесь α_i (рис. 5) – углы между направлением внешнего напряжения растяжения или сжатия (σ_+ или σ_-) и направлениями атомных смещений. На рис. 5 тройка этих направлений обозначена векторами $\mathbf{X}_i^+$ или $\mathbf{X}_i^-$, где верхние индексы указывают на знаки деформации по соответствующим главным осям тензора $\dot{\varepsilon}_{К}^{\pm}$. Для $(1\bar{1}3)$ двойника деформации, представленного на рис. 5, $\mathbf{X}_1^+ = \mathbf{X}_1^{К}$ и $\mathbf{X}_2^- = \mathbf{X}_2^{К}$.

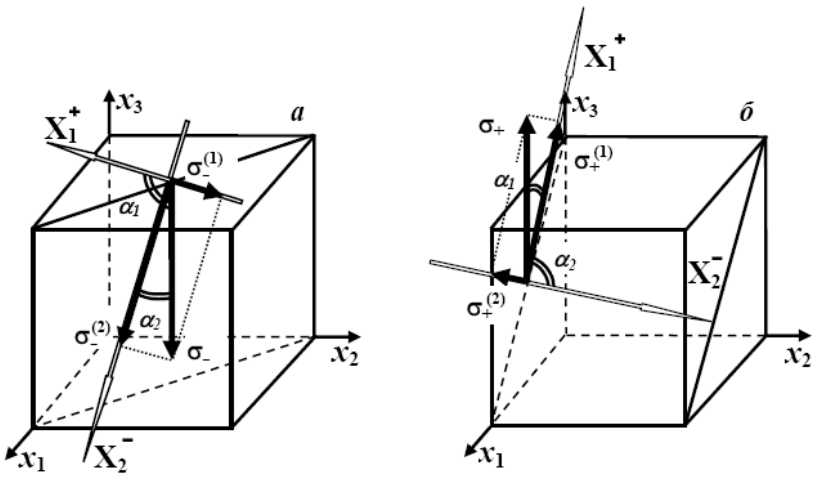

Рис. 5. К анализу геометрии полей напряжений и деформаций при образовании $(1\bar{1}3)$ (*а*) и $(\bar{1}31)$ (*б*) двойников деформации в процессе сжатия (*а*) и растяжения (*б*) монокристаллов в направлении [001]

При определении указанных выше направлений учтем, что в полях напряжений атомные смещения осуществляются в направлениях положительных проекций напряжений растяжения (или сжатия) на соответствующие направления атомных смещений или при положительных значениях $\boldsymbol{n_i} = \cos\alpha_i$. Следовательно, при заданном направлении и знаке внешнего напряжения направления атомных смещений ($\mathbf{X_i^+}$ и $\mathbf{X_i^-}$) при одинаковых знаках напряжений и деформаций образуют острые углы с направлением приложенной нагрузки. В этом случае положительные величины $\boldsymbol{n_i}$ будут характеризовать уровень напряжений, стимулирующих соответствующую моду деформации. Чем они больше, тем больше положительные проекции приложенных напряжений ($\sigma_-^{(2)}$ и $\sigma_+^{(1)}$ на рис. 5 *а* и 5 *б*) на соответствующие направления атомных смещений по главным осям деформации. В случае противоположных знаков напряжений и деформаций внешние напряжения препятствуют однородной деформации превращения. Это соответствует отрицательным значениям проекций этих напряжений ($\sigma_-^{(1)}$ на рис. 5 *а* и $\sigma_+^{(2)}$ на рис. 5 *б*) на соответствующие направления атомных смещений или отрицательным значениям $\boldsymbol{n_i} = \cos\alpha_i$. Следовательно, в этом случае углы между направлениями атомных смещений и внешнего напряжения должны быть тупыми.

При указанном выше выборе тройки векторов $\mathbf{X_i^+}$ и $\mathbf{X_i^-}$ напряжения однородной деформации превращения будут тем ниже, чем больше положительные и меньше отрицательные величины $\boldsymbol{n_i}$.

Результаты расчета этих величин при образовании {113} двойников деформации в процессе растяжения и сжатия монокристаллов TiNi сплавов в направлении [001] приведены в таблице 4.

Таблица 4

Плоскости двойникования	Деформация сжатием		Деформация растяжением	
	$\boldsymbol{n_1} = \cos\alpha_1$	$\boldsymbol{n_2} = \cos\alpha_2$	$\boldsymbol{n_1} = \cos\alpha_1$	$\boldsymbol{n_2} = \cos\alpha_2$
$(1\bar{1}3)$, $(\bar{1}13)$, (113), $(\bar{1}\bar{1}3)$	-0.30	+0.95	+0.30	-0.95
$(3\bar{1}1)$, $(31\bar{1})$, (311), $(3\bar{1}\bar{1})$, $(13\bar{1})$, $(\bar{1}31)$, $(\bar{1}3\bar{1})$, (131)	-0.67	+0.21	+0.67	-0.21

Видно, что смена знака деформации сопровождается, во-первых, изменением плоскостей двойникования. Во-вторых, изменением фактора приведенных нормальных напряжений. В случае сжатия $\boldsymbol{n_2}$ = +0.95; при растяжении $\boldsymbol{n_1}$ = +0.67. Последнее должно привести к асимметрии напряжения течения (двойникования) при растяжении и сжатии в указанном выше направлении.

В предположении, что образование двойников деформации при растяжении и сжатии происходит при одинаковых значениях положительных проекций внешних приложенных напряжений на соответствующие главные оси деформации, проведена количественная оценка этого эффекта. Показано, что при изменении знака деформации от сжатия к растяжению относительное увеличение напряжения двойникования должно составлять около 40%, что хорошо согласуется с экспериментальными данными по асимметрии предела текучести вблизи темпе-

ратуры M_d (рис. 4). Предполагается, что уменьшение этой асимметрии при более высоких температурах связано с уменьшением (при растяжении) величины предела текучести вследствие активизации термически активируемых дислокационных механизмов деформации.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

1. В температурном интервале индуцированного напряжением обратимого мартенситного превращения ($M_н$ - $A_к$) важным механизмом пластической деформации при прокатке и сжатии монокристаллов TiNi сплавов в направлении [001] является механическое двойникование с формированием {113} и {114} двойников деформации B2 фазы.

2. Показано, что образование этих двойников происходит в процессе пластической деформации мартенсита B19′ после полного B2→B19′ превращения с участием обратного B19′→B2 превращения, свидетельствующего о реализации в B2 фазе никелида титана нового механизма деформации и переориентации кристаллической решетки - механизма прямых плюс обратных (по альтернативным системам) B2→B19(B19′)→B2 мартенситных превращений с участием несдвойникованной и предварительно сдвойникованной мартенситной фазы.

3. Установлено, что при образовании {112} и {113} двойников деформации вклад однородной деформации превращения Бейновского типа в общую деформацию (B2→B19(B19′)→B2) превращения сравним с вкладом сдвиговой (дислокационной) моды деформации, необходимой для восстановления сверхструктуры B2 фазы. Сделано заключение, что при анализе закономерностей пластической деформации механизмами прямых плюс обратных (по альтернативным системам) превращений мартенситного типа, в отличие от традиционных подходов теории дислокационной пластичности и мартенситных превращений сдвигового типа, помимо сдвиговых, необходимо учитывать диагональные компоненты тензора напряжений в зонах превращений.

4. Рассчитаны инвариантные плоскости {113} и {112} двойников деформации, формирующихся механизмами прямых плюс обратных мартенситных превращений. В рамках этого механизма с точностью около 1° предсказана плоскость габитуса наиболее часто обнаруживаемых экспериментально {113} двойников деформации.

5. Обнаружена взаимосвязь асимметрии механического поведения монокристаллов TiNi сплавов при растяжении и сжатии в направлениях типа <001> с напряжением механического двойникования механизмом локального обратимого структурного превращения мартенситного типа. Показано, что важной модой дисторсии, определяющей это напряжение, является однородная деформация превращения типа деформации Бейна.

6. Введено понятие фактора нормальных напряжений, приведенных к главным осям тензора однородной деформации (B2→B19(B19′)→B2) превращения. Показана возможность использования этого фактора для количественного анализа асимметрии предела текучести при растяжении и сжатии <001> монокристаллов никелида титана.

Основное содержание диссертации изложено в работах:

1. Tyumentsev A.N., Surikova N.S., Litovchenko I.Yu., Pinzhin Yu.P., Korotaev A.D., Lysenko O.V. (Evtushenko O.V.) Mechanism of deformation and crystal lattice reorientation in strain localization bands and deformation twins of the B2 phase of titanium nickelide // Acta Mat. – 2004. – V. 52. – № 7. – P. 2067-2074.
2. Сурикова Н.С., Тюменцев А.Н., Лысенко О.В.(Евтушенко О.В.), Литовченко И.Ю., Коротаев А.Д.. Особенности механического двойникования в В2 фазе монокристаллов никелида титана // Физ. мезомех. – 2004. – Т. 7. – Спец. выпуск Ч. 1. – С. 245-248.
3. Сурикова Н.С., Тюменцев А.Н., Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.), Литовченко И.Ю. Дисторсии кристаллической решетки в процессе механического двойникования В2 фазы никелида титана механизмом локальных обратимых мартенситных превращений // ФММ. – 2006. – Т.101. –№3. –С. 223-230.
4. Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.), Сурикова Н.С., Тюменцев А.Н. Анализ дисторсий в двойниках В2 фазы никелида титана // Изв. вузов. Физика. – 2006. – № 3. Приложение. – С. 46 – 47.
5. Тюменцев А.Н., Сурикова Н.С., Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.), Литовченко И.Ю. Закономерности и механизмы механического двойникования в сплавах на основе никелида титана // Физ. мезомех. – 2007. – Т.10. – №3. – С. 53–66.
6. Сурикова Н.С. Тюменцев А. Н., Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.) Асимметрия предела текучести в [001] монокристаллах никелида титана // Доклады РАН. – 2007. – Т. 417. - № 2. – С. 189-193.
7. Сурикова Н.С. Тюменцев А. Н., Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.) Асимметрия предела текучести в [001] монокристаллах никелида титана // ФММ. – 2007. – Т. 104. - № 5. – С. 525-533.
8. Сурикова Н.С., Тюменцев А.Н., Литовченко И.Ю, Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.) О механическом двойниковании в В2 фазе никелида титана // Вестник ТГАСУ. – 2003. – №1. – С. 13-19.
9. Surikova N.S., Tyumentsev A.N., Lysenko O.V. (Evtushenko O.V.), Litovchenko I.Yu., Pinzhin Yu.P., and Korotaev A.D. Mechanism for deformation and crystal lattice reorientation in strain localization bands and deformation twins of the B2-phase of titanium nickelide. Abstracts of VII International Conference CADAMT' 2003 Computer- Aided Design of Advanced Materials and Technologies. August 18-23, 2003 Tomsk, Russia, c. 45.
10. Тюменцев А.Н., Сурикова Н.С., Лысенко О.В. (Евтушенко О.В.) Механическое двойникование и асимметрия механического поведения в монокристаллах сплавов на основе никелида титана. Сборник материалов XVII Петербургских чтений по проблемам прочности посвященным 90-летию со дня рождения А.Н. Орлова. 10-12 апреля 2007 г., Санкт-Петебург, часть II, с. 74.

Список цитируемой литературы:

1. Moberly W.J. Mechanical twinning and twinless martensite in ternary $Ti_{50}Ni_{50-x}M_x$ intermetallics // Stanford university, 1991. – 329 p.
2. Кассан-Оглы Ф. А., Найш В. Е., Сагарадзе И. В. Диффузное рассеяние в металлах с ОЦК решеткой и кристаллогеометрия мартенситных фазовых переходов ОЦК-ГЦК и ОЦК-ГПУ // ФММ, 1988. - Т. 65. - №3. - С. 481-492.