

УДК 512.643
PACS number(s): 02.10.Yn, 81.30.Kf, 61.50.Ks

МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІН ОРІЄНТАЦІЙНИХ СПІВВІДНОШЕНЬ КРИСТАЛІЧНИХ ГРАТОК ЗА ДОПОМОГОЮ МАТРИЧНОГО АНАЛІЗУ

В. Андрющенко, Д. Богайчук, Т. Шаповал

*Інститут металофізики НАН України,
бульв. Вернадського, 36, 252680 Київ-142, Україна
e-mail: dibog@mail.ru*

Загальний матричний підхід використано для математичного описання зміни полюсних фігур після мартенситного перетворення у високовуглецевих сталях, легованих алюмінієм. Розраховано і побудовано полюсні фігури α -мартенситу з аномально високою тетрагональністю. Трансформовано матрицю, яка відповідає орієнтаційним співвідношенням Нішіяма, допоміжними матрицями, які враховують кути поворотів та ступінь тетрагональності α -мартенситу. Отримано розрахункові полюсні фігури для варіантів орієнтацій Гренінгера-Трояно та Курдюмова-Закса. Визначено, що тільки за певної послідовності матричних трансформувальних розраховані переміщення полюсів мартенситу $\langle 001 \rangle_\alpha$ відносно полюсів $\langle 001 \rangle_\gamma$ та $\langle 011 \rangle_\gamma$ збігаються з експериментальними даними, які отримані за допомогою рентгенографічного методу. Зміну полюсних фігур пояснено наявністю когерентних напружень, які виникають в мартенситі від атомів втілення та карбідних часток.

Ключові слова: матричний аналіз, мартенситне перетворення, орієнтаційні співвідношення.

Для кристалографічного описання мартенситного перетворення зручно застосувати матричний аналіз. Перетворення однієї кубічної ґратки в іншу можна описати за допомогою матриці, дев'ять елементів a_{ij} якої є косинусами кутів між координатними осями ґраток. Зміна кристалічної ґратки у сплавах на основі заліза при $\gamma \rightarrow \alpha$ фазовому переході відбувається з дотриманням певних орієнтаційних співвідношень (ОС), тому для її описання потрібно застосувати формулу:

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

де: $[hkl]_\gamma$ – індекси кристалографічного напрямку в аустенітних кристалах; (γ/α) – задана матриця перетворення координат при $\gamma \rightarrow \alpha$ перетворенні; $[hkl]_\alpha$ – індекси напрямку в мартенситних кристалах, що відповідають обраній матриці (γ/α) .

Добре відомі три ОС [1]:

$$\text{ОС Курдюмова-Закса: } \begin{matrix} (011)_{\alpha m} \parallel (111)_\gamma \\ [1\bar{1}1]_{\alpha m} \parallel [10\bar{1}]_\gamma \end{matrix} \quad (\text{ОС КЗ}),$$

ОС Нішіями	$(011)_{\alpha M} \parallel (111)_{\gamma}$ $[011]_{\alpha M} \parallel [\bar{2}11]_{\gamma}$	(ОС Н),
ОС Гренінгера-Трояно	$(011)_{\alpha M} \parallel (111)_{\gamma}$ $[7, \bar{17}, 17]_{\alpha M} \parallel [\bar{5}, \bar{12}, 17]_{\gamma}$	(ОС Г-Т).

Матриця $(\gamma/\alpha)_H$, що описує $\alpha \rightarrow \gamma$ перетворення для ОС Н має вигляд [2]:

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

Якщо взяти до уваги, що полюсні фігури для ОС Г-Т і ОС К-3 відрізняються від полюсної фігури для ОС Н поворотом на кут $\varphi=2^\circ 30'$ та $\varphi=5^\circ 16'$, відповідно, гратки мартенситу [1] відносно напрямку $[011]_{\alpha M} \parallel [111]_{\gamma}$, то для отримання матриць для ОС Г-Т і ОС К-3 треба помножити матрицю для ОС Н на матрицю повороту $R_{[111]_{\gamma}}^{\varphi}$ на відповідний кут φ відносно напрямку $[111]_{\gamma}$:

$$(\gamma \rightarrow \alpha)_{\varphi} = R_{[111]_{\gamma}}^{\varphi} \cdot (\gamma \rightarrow \alpha)_H. \quad (1)$$

Але розрахунки, які проведені для випадку утворення мартенситу з кубічної граткою, не відповідають експериментальним даним, бо не враховують існуючої в α -мартенситі тетрагональності. Наприклад, у сплавах системи Fe-Al-C завдяки спотворенням кристалічних ґраток аустеніту і мартенситу атомами вуглецю та впорядкованими карбідними частками змінного складу $Fe_{4-y}Al_y-C_x$ когерентними з аустенітом і мартенситом, останній має ОЦТ кристалічну ґратку з аномально високою тетрагональністю (до значень $c/a = 1,12$). Тому для математичного описання $\gamma \rightarrow \alpha$ перетворення в аналогічних сплавах потрібно враховувати аномально високий параметр тетрагональності c/a . Для цього потрібно ввести допоміжну матрицю $T_{c/a}$:

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

Тепер матриця для ОС набуде вигляду:

$$(\gamma \rightarrow \alpha) = T_{c/a} \cdot R_{[111]_{\gamma}}^{\varphi} \cdot (\gamma \rightarrow \alpha)_H.$$

Підставляючи $\varphi=2^\circ 30'$ для ОС Г-Т, $\varphi=5^\circ 16'$ для ОС К-3 та c/a , отримуємо потрібну матрицю для відповідного ОС з заданою тетрагональністю.

Для Fe-Al-C сплавів відомо експериментальний факт: при збільшенні концентрації вуглецю у загартованих сплавах збільшується ступінь тетрагональності мартенситу і, унаслідок цього, полюси мартенситу на стереографічній проекції наближаються до полюсів аустеніту. Це можна фіксувати в загартованих від високої температури сплавах при кімнатній температурі після мартенситного перетворення. І навпаки, при зменшенні ступеня тетрагональності, який залежить від наявності вуглецю в мартенситі, його полюси віддаляються від полюсів мартенситу (рис. 1) [3].

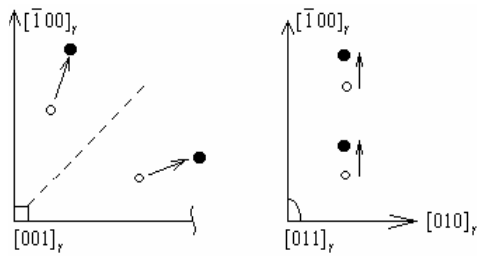


Рис. 1. Переміщення полюсів на стереографічній проекції у разі зменшення тетрагональності мартенситу: \circ – $\{100\}_{\alpha_M}$ до відпуску, \bullet – $\{100\}_{\alpha_M}$ після відпуску

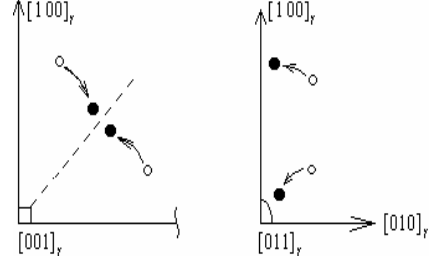


Рис. 2. Переміщення полюсів на стереографічній проекції при збільшенні концентрації алюмінію у сплаві: \circ – 0% Al; \bullet – 6% Al

Фрагмент розрахованої за допомогою матриць полюсної фігури мартенситу з різними ступенями тетрагональності для ОС Н, ОС Г-Т та ОС К-З наведено на рис. 3.

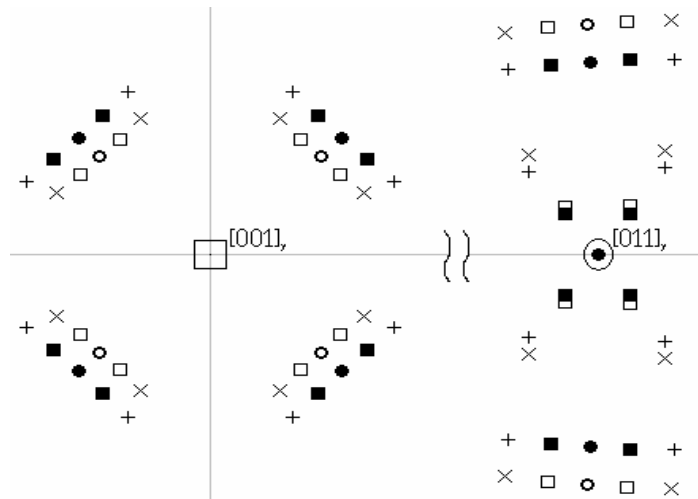


Рис. 3. Фрагмент полюсної фігури мартенситу для ОС Н, ОС Г-Т та ОС К-З при зміні ступеня тетрагональності:
 \bullet – ОС Н ($c/a=1,009$), \blacksquare – ОС ГТ ($c/a=1,009$), $+$ – ОС КЗ ($c/a=1,009$),
 \circ – ОС Н ($c/a=1,2$), \square – ОС ГТ ($c/a=1,2$), \times – ОС КЗ ($c/a=1,2$)

Маємо наближення полюсів мартенситу до полюса $[001]_{\gamma}$ при збільшенні c/a для всіх трьох орієнтаційних співвідношень. Біля полюсів $[011]_{\gamma}$ фіксують протилежне. Якщо поміняти послідовність матричних трансформуваль, а саме, взяти послідовність $(\gamma \rightarrow \alpha) = R_{[111]_{\gamma}}^{\phi} \cdot T_{c/a} \cdot (\gamma \rightarrow \alpha)_H$, то полюсна фігура зовсім не схожа з експериментальною.

Отже, можна зробити висновок, що для опису мартенситного перетворення, крім матриці ОС Н $(\gamma \rightarrow \alpha)_H$ та матриці кута повороту $R_{[111]_{\gamma}}^{\phi}$, обов'язково потрібно застосовувати матрицю тетрагональності $T_{c/a}$. Окрім цього, треба враховувати, що тільки за певної послідовності матричних трансформуваль

розраховані переміщення полюсів мартенситу $\langle 001 \rangle_{\alpha m}$ відносно полюсів $\langle 001 \rangle_{\gamma}$ та $\langle 011 \rangle_{\gamma}$ збігаються з експериментальними даними, які отримані за допомогою рентгенографічного методу. Зміна полюсних фігур мартенситу з аномально високою тетрагональністю при його двійникуванні та когерентному спотворенні від карбідних часток також може бути описана за допомогою відповідних матриць.

1. Андрющенко В.А., Коваль Ю.Н., Гнатюк І.Е., Шаповал Т.А. Ориентации α -мартенсита в высокоуглеродистых сплавах системы Fe-Al-C. Металлофиз. новейшие технол. 2001. Т. 23. № 5. С. 639–654.
2. Лысак Л.И., Николин Б.И. Физические основы термической обработки стали. К.: Техніка, 1975. 304 с.
3. Сорокин И.П. О кристаллографической упорядоченности α - γ превращения в сплаве Fe – 30% Ni. ФММ, 1966. Т. 22. № 2. 239 с.

MODULATION OF VARIATIONS IN ORIENTATION OF CRYSTALLINE STRUCTURE BY MEANS OF MATRIX ANALYSIS

V. Andryuschenko, D. Bogaychuk, T. Shapoval

*Institute for Metal Physics, Ukrainian National Academy of Science, Kyiv,
Vernnadskego Str., 36, 252680 Kyiv-142, Ukraine
e-mail: dibog@mail.ru*

The global matrix approach has been used for the mathematical description of polar figures' changes after martensite transformation in the high-carbon steels alloyed with Al. Stereographic projections of α -martensite with abnormally high tetragonality were theoretically calculated and built. The matrix which corresponds to the Nishiyama orientation was transformed using additional matrixes, taking into account rotation angle and degree of tetragonality of α -martensite. The stereograms for Greninger-Troyano and Kurdjumova-Sachs orientations have been created. It was established that only definite sequence of the matrix transformation leads to the correlation between X-rays experimental data and theoretically calculated movements of the $\langle 001 \rangle_{\alpha}$ martensite poles according to the $\langle 001 \rangle_{\gamma}$ and $\langle 011 \rangle_{\gamma}$ ones. Polar figure variations have been described by the presents of coherent stresses, which appear in the martensite due to the influence carbide particles.

Key words: matrix analysis, martensite transformation, orientations.

Стаття надійшла до редколегії 19.05.2004
Прийнята до друку 21.11.2005