

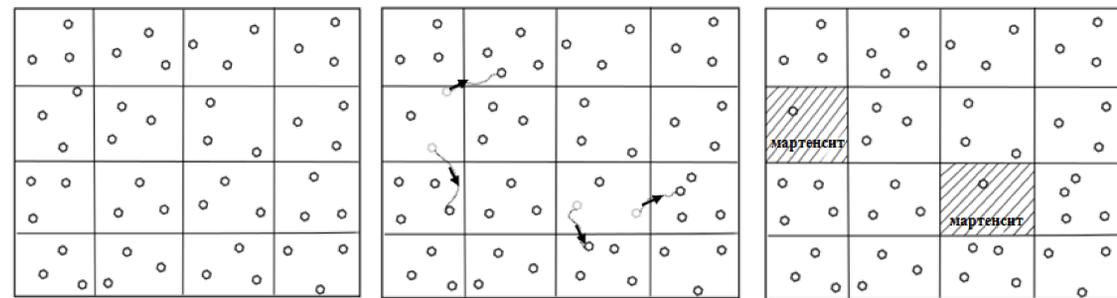
МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ОБЪЕМНОЙ ДОЛИ МАРТЕНСИТА В ПРОЦЕССЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО МАРТЕНСИТНОГО ПЕРЕХОДА В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ TiNi

Иванов А.М., Беляев С.П., Реснина Н.Н.

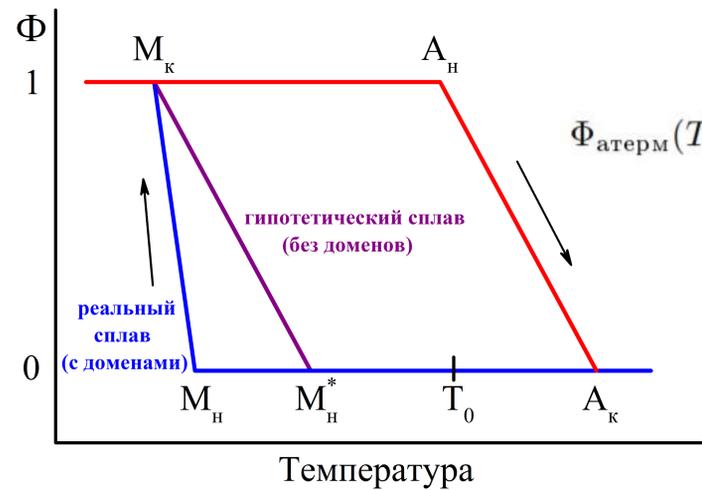
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
ileavenovasky@gmail.com

Цель работы: моделирование изменения объемной доли мартенсита при реализации прямого мартенситного превращения в условиях изотермической выдержки сплавов на основе TiNi

Описание модели: Материал разбит на большое количество N нанодоменов, в которых локальная концентрация точечных дефектов замещения c пошагово задается как случайная величина с нормальным распределением с математическим ожиданием c_0 (средняя концентрация дефектов замещения в материале) и дисперсией σ . Дисперсия σ характеризует подвижность дефектов замещения. Наличие нанодоменов в материале локально увеличивает упругую энергию кристалла (на величину $E_{упр}^*$). Таким образом, в материале без доменов превращение началось бы при температуре M_H^* , которая больше, чем температура начала прямого превращения M_H в реальном сплаве. При температуре выдержки T^* уменьшение концентрации c в домене может привести к уменьшению упругой энергии $E_{упр}^*$, что в свою очередь приведет к нарушению термодинамического равновесия. В таком случае будем считать, что этот домен переходит в мартенситное состояние. На каждом шаге выдержки объемная доля мартенсита Φ рассчитывается как отношение количества доменов в мартенситном состоянии к количеству всех доменов N .



Изотермическая выдержка



$$\Phi_{атерм}(T) = \begin{cases} 0, & \text{если } T > M_H \\ \frac{M_H - T}{M_H - M_K}, & \text{если } M_H \geq T > M_K \\ 1, & \text{если } M_K \geq T \end{cases}$$

$$M_H^* = M_K + A_K - A_H$$

$$T_0 = \frac{1}{2}(A_K + M_H^*)$$

Условие термодинамического равновесия

$$\Delta G^{A \rightarrow M}(T) = \Delta S^{A \rightarrow M}(T_0 - T) \quad E_{упр}^*(c) = \Delta S^{A \rightarrow M}(M_H^* - M_H) \frac{c}{c_0}$$

$$\Delta G^{A \rightarrow M} = E_{дис} + E_{упр}^{A \rightarrow M} + E_{упр}^*$$

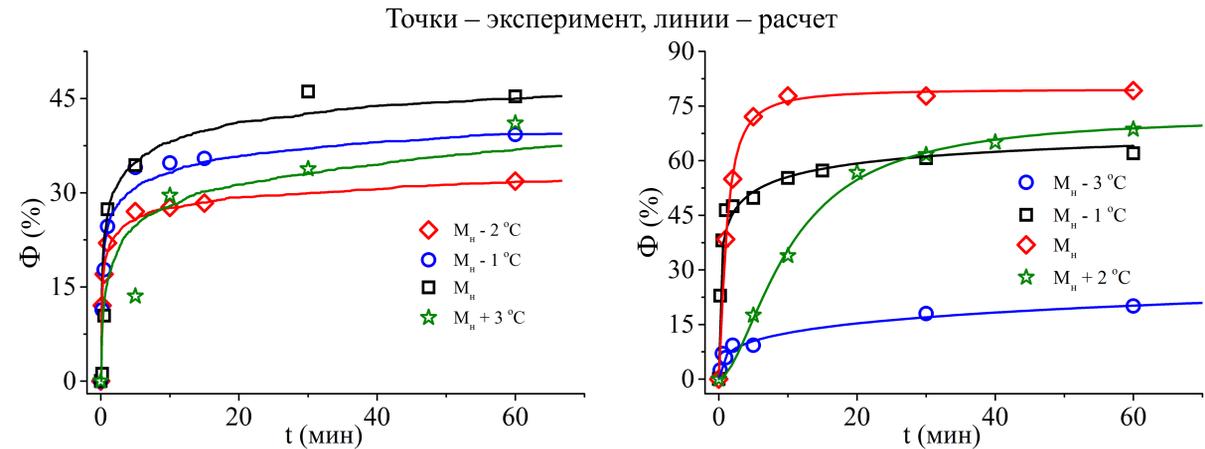
$$E_{дис} = \Delta S^{A \rightarrow M}(T_0 - M_H^*) \quad E_{упр}^{A \rightarrow M}(\Phi) = \Delta S^{A \rightarrow M}(M_H - M_K)\Phi$$

Параметры исследуемых сплавов

Сплав	Ti ₄₉ Ni ₅₁	Ti _{40.7} Hf _{9.5} Ni _{44.8} Cu ₅
M _H , °C	-45	-7
M _K , °C	-59	-13
A _H , °C	-28	29
A _K , °C	-11	52
c ₀ , ат. %	2	14.5

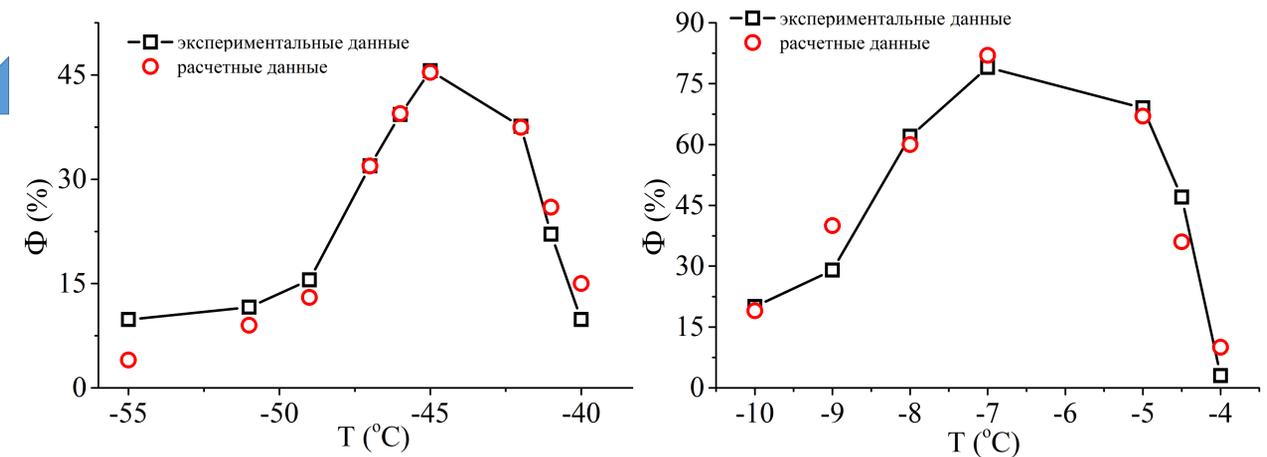
Результаты моделирования

Изменение объемной доли мартенсита от времени при выдержке



Ti₄₉Ni₅₁

Зависимости прироста объемной доли мартенсита от температуры выдержки



Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{44.8}Cu₅

Выводы:

- Впервые смоделировано изменение объемной доли мартенсита в процессе прямого B2 → B19' мартенситного превращения в изотермических условиях для сплавов на основе TiNi;
- Расчетные данные хорошо совпадают с экспериментальными данными, полученные для сплавов Ti₄₉Ni₅₁ и Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{44.8}Cu₅.