



Санкт-Петербургский  
государственный  
университет

XI Международная конференция  
"Фазовые превращения и  
прочность кристаллов"

# Тензор деформации и кристаллографический ресурс превращения в сплаве с памятью формы TiZr

Чернышева Т.Ю., Волков А.Е., Евард М.Е., Ребров Т.В.



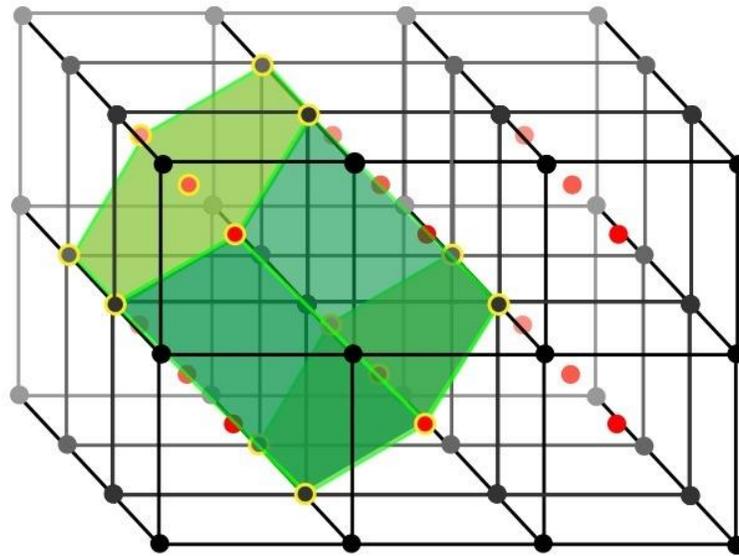
# О преимуществах TiZr

- Данный сплав — высокопрочная и биосовместимая альтернатива титану, особенно для применений в медицине при изготовлении ортопедических, стоматологических и сосудистых имплантатов
- Имплантаты из TiZr обладают прочностью на 40 % выше, чем имплантаты, произведенные из титана марки Grade IV
- Коррозионная стойкость и биосовместимость сплава не уступает таковым в имплантатах из чистого титана



## Цель работы

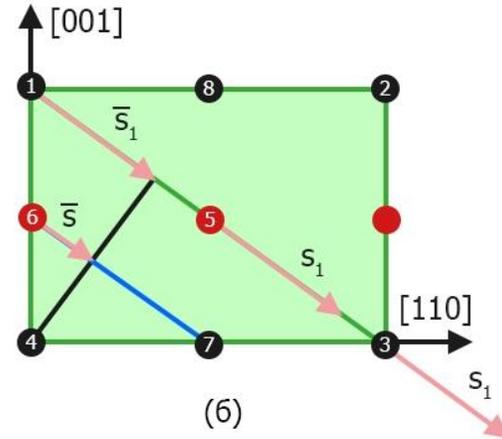
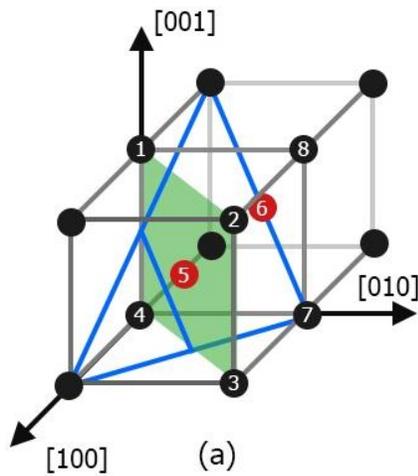
Построить тензор деформации Грина-Лагранжа для мартенситного превращения в СПФ TiZr и оценить кристаллографический ресурс деформации.



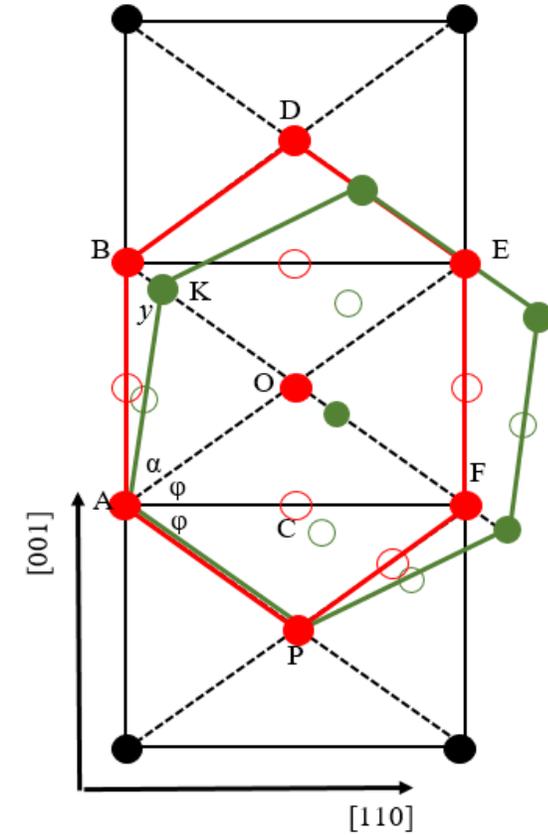
## Обозначения

- ● ● Центральные атомы в ОЦК
- ● ● Атомы в вершинах куба в ОЦК
- ● ● Атомы, являющиеся частью изображённой новой ГПУ структуры
- ■ ■ Стороны призмы ГПУ

Выделение структуры ГПУ в ОЦК



а) – ячейка ОЦК с введённой системой координат; б) – Плоскость  $\{\bar{1}10\}$ , и спроецированные на нее атомы;



Осуществление сдвига на вектор  $\bar{s}_1$  (красным цветом выделено начальное положение атомов, зеленым – положение после сдвига; Закрашенные атомы – атомы в рассматриваемой плоскости, незакрашенные – спроецированные атомы на рассматриваемую плоскость)



$$\bar{s} = \frac{1}{\sqrt{3}} |\bar{s}| [11\bar{1}] = \frac{3-\sqrt{6}}{18} [11\bar{1}]$$

Вычисление тензора градиента деформации:

$$F = I + \bar{s} \otimes \bar{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{3-\sqrt{6}}{18} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes (1 \quad 1 \quad 2) = \begin{pmatrix} \frac{21-\sqrt{6}}{18} & \frac{3-\sqrt{6}}{18} & \frac{3-\sqrt{6}}{9} \\ \frac{3-\sqrt{6}}{18} & \frac{21-\sqrt{6}}{18} & \frac{3-\sqrt{6}}{9} \\ \frac{-3+\sqrt{6}}{18} & \frac{-3+\sqrt{6}}{18} & \frac{6+\sqrt{6}}{9} \end{pmatrix}$$

Вычисление тензора деформации Грина-Лагранжа:

$$D = \frac{1}{2} (F^T F - I) = \begin{pmatrix} \frac{-6\sqrt{6}+17}{72} & \frac{-6\sqrt{6}+17}{72} & \frac{-3\sqrt{6}+8}{36} \\ \frac{-6\sqrt{6}+17}{72} & \frac{-6\sqrt{6}+17}{72} & \frac{-3\sqrt{6}+8}{36} \\ \frac{-3\sqrt{6}+8}{36} & \frac{-3\sqrt{6}+8}{36} & \frac{-1}{18} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.032 & 0.032 & 0.018 \\ 0.032 & 0.032 & 0.018 \\ 0.018 & 0.018 & -0.056 \end{pmatrix}$$



Главные деформации:

$$\lambda_1 = 0, \varepsilon_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \lambda_2 = -0.06, \varepsilon_2 = 1.02 * \begin{pmatrix} -0.14 \\ -0.14 \\ 1 \end{pmatrix}; \lambda_3 = 0.07, \varepsilon_3 = 5.02 * \begin{pmatrix} 3.48 \\ 3.48 \\ 1 \end{pmatrix};$$

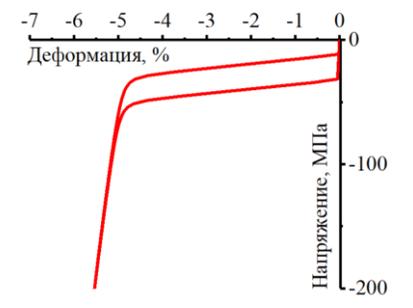
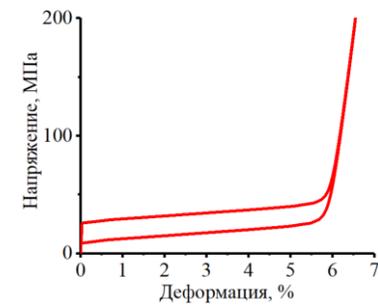
Расчёт кристаллографического ресурса:

$$E^{\text{гл}}_i = \sqrt{1 + 2\lambda_i} - 1, i = 1, 2, 3;$$

$$E^{\text{гл}}_1 = 0, E^{\text{гл}}_2 = -0.0621 (\approx -6,2\%), E^{\text{гл}}_3 = 0.067 (\approx 6,7\%).$$



0, 14, 22



Ориентация  
монокристалла

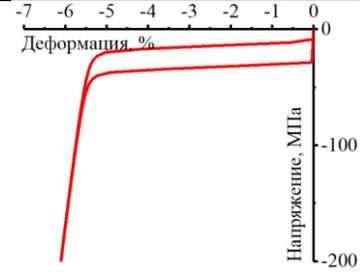
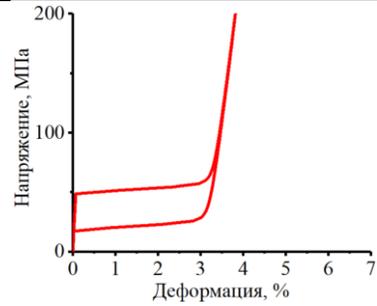
Диаграмма деформирования

Растяжение

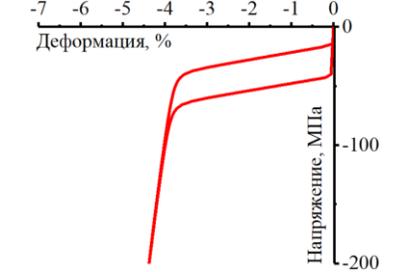
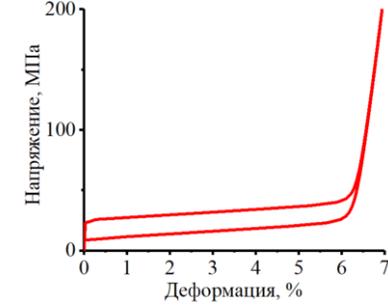
Диаграмма деформирования

Сжатие

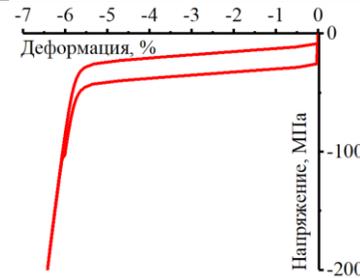
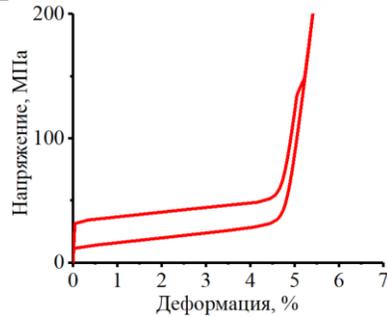
27, 0, 22



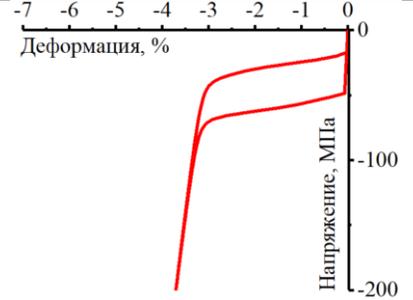
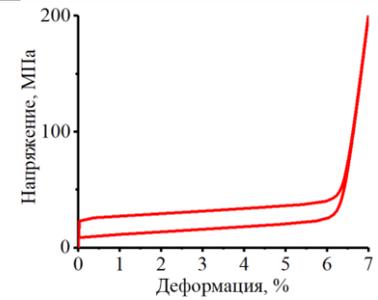
27, 19, 22



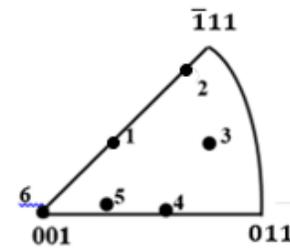
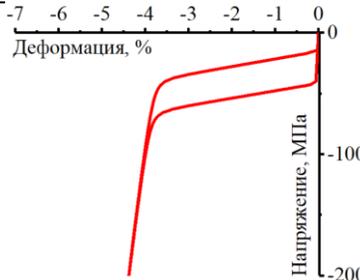
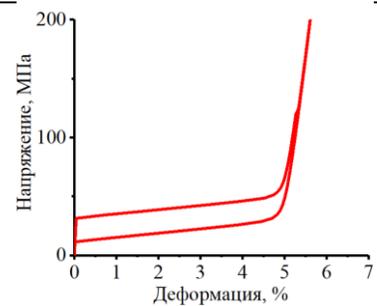
2, 7, 22



45, 23, 22



45, 8, 22



Стереографический  
треугольник для фазы  $\beta_1$

$M_f = 800 \text{ K}$  ;  $M_s = 813 \text{ K}$  ;  $A_s = 871 \text{ K}$  ;  $A_f = 900 \text{ K}$  Скрытая  
теплота превращения  $q = -10 \text{ МДж/м}^3$ ,  
температура проведения эксперимента  $T = 950 \text{ K}$ .

1 - 45°, 8, 22,

2 - 45°, 23, 22,

3 - 27°, 19, 22,

4 - 0°, 14, 22,

5 - 2°, 7, 22,

6 - 27°, 0, 22



# Заключение

Выполнено построение тензора деформации Грина-Лагранжа для мартенситных превращений в сплаве TiZr. Рассчитан кристаллографический ресурс данного превращения: на растяжение он достигает 6,7%, на сжатие – 6,2%. Выполнено моделирование эффекта псевдоупругости для различных ориентаций монокристалла TiZr.