

УДК 669.245.018:539.216.54-1

*А.И. Потекаев<sup>1</sup>, В.А. Хохлов<sup>1</sup>, С.В. Галсанов<sup>2</sup>*<sup>1</sup> Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова<sup>2</sup> Томский государственный университет

## СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СВОЙСТВА НИКЕЛИДА ТИТАНА ПРИ ГЛУБОКОМ НЕОДНОРОДНОМ ПЛАСТИЧЕСКОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ

Общепризнано, что никелид титана является очень перспективным материалом для различных областей применения (и технических [1 – 18], и медицинских [19]), однако понимание физики процессов его деформирования и изменения свойств пока далеко от совершенства. В преддверии широкого использования никелида титана вопросы исследования и прогноза его свойств и особенностей поведения (особенно в процессах пластической деформации и трения) приобретают важнейшее значение [1 – 5].

Сплав никелид титана – это интерметаллическое соединение титана и никеля (например TiNi), область гомогенности которого колеблется в пределах 2 – 3 %. Структура сплава TiNi идентифицируется как упорядоченная по типу CsCl (сверхструктура B2). В интервале температур  $-150 \div +200$  °C в сплаве TiNi происходят мартенситные превращения, характер и последовательность которых зависят от состава, термической обработки, температурных и силовых воздействий.

При охлаждении высокотемпературная фаза со структурой B2 (аустенит *A*) может превращаться в зависимости от состава сплава как непосредственно в низкотемпературную структуру B19' (ромбическая структура B19 с моноклинным искажением, мартенсит *M*), так и в промежуточную ромбоэдрическую структуру R, которая при дальнейшем охлаждении тоже превращается в структуру B19'. В обогащенных никелем или легированных сплавах превращение идет по схеме  $B2 \rightarrow B2 + B19' \rightarrow B19'$ , т.е. реализуется прямое мартенситное превращение  $A \rightarrow M$ .

При нагреве идет обратное мартенситное превращение по схеме  $B19' \rightarrow B19' + B2 \rightarrow B2$ , в легированном сплаве реализуется схема превращений  $B19' \rightarrow R + B2 \rightarrow B2$ .

Возможно образование мартенсита под действием напряжений и деформаций (мартенсит деформации  $M_d$ ), причем эти воздействия смещают температурные точки начала мартенситного превращения в область более низких температур.

Процессы как прямых, так и обратных мартенситных превращений характеризуются петлей гистерезиса на зависимостях температура  $T$  – количество фазы (мартенсита *M* или аустенита *A*).

Прогноз свойств и исследования особенностей поведения никелида титана приобретают особую актуаль-

ность в задачах механики контактного взаимодействия и трения. Это связано с тем, что в зоне контакта в условиях сложного напряженного состояния находятся единичные микронеровности, в каждой из которых существуют области с различными прочностными свойствами, определяемыми количественным соотношением фаз аустенита и мартенсита [20]. Для дальнейшего использования в изучении физики процессов трения в зоне контакта тел из никелида титана в настоящей работе рассматриваются структурно-фазовые состояния и свойства этого материала, обусловленные глубокими неоднородными пластическими деформациями при внедрении жесткого сферического штампа в упругопластическое полупространство.

Целью настоящей работы является исследование свойств никелида титана во всех деформированных зонах от зоны контакта индентора с полупространством до недеформированных областей.

Для исследований из соединений системы Ti – Ni выбран сплав ТН-1К ( $Ti_{50}Ni_{47.5}Fe_{2.5}$ ) как наиболее широко применяемый в технике. Более того, важно и удобно следующее: ввиду неширокой петли гистерезиса деформационный мартенсит в этом сплаве может образоваться и при комнатных температурах, в то время как термический мартенсит *M* возникает при температуре  $-80$  °C [18].

При исследовании применяли традиционный микроструктурный анализ и нетрадиционный метод разрезных образцов. Этот метод заключается в том, что цилиндрические образцы предварительно разрезают по диаметру вдоль продольной оси, а поверхности разреза полируют. Далее полученные половинки отжигают при температуре гомогенизирующего отжига, соединяют между собой и помещают в жесткую обойму, исключаящую взаимное смещение частей образца. Затем жесткой сферой по центру прикладывается сжимающая нагрузка, значение которой подбирается таким образом, чтобы после ее снятия существовали две области: с остаточной деформацией и недеформированная. После разгрузки части образца вынимают из обоймы и проводят исследования свойств поверхностей. Так как половины образца после нагружения не подвергаются последующим механическим или тепловым воздействиям, то отсутствует связанная с эти-

ми процессами релаксации напряжений (как это имеет место на сплошных образцах). Полученные результаты, таким образом, отражают только напряженно-деформированные состояния при внедрении индентора.

В результате появляется возможность как визуального, так и инструментального исследования свойств материала в ряде зон вдоль оси на разном удалении  $h$  от дна отпечатка и идентификации фазового состава этих зон (рис. 1).

Прочностные свойства изучали методом определения кинетической нанотвердости на приборе фирмы «CSEM instruments» [21]. Это метод испытания материалов вдавливанием, основанный на непрерывной регистрации нагрузок на индентор на глубинах отпечатка от нуля до выбранного максимума с построением диаграммы, аналогичной диаграмме при испытаниях на растяжение и сжатие.

При анализе изображений (рис. 2) обнаруживается, что существует несколько характерных типов зон. Прежде всего, ко дну отпечатка прилегает зона с однородным структурным составом (белого цвета, рис. 2, а), зоны с мартенситной фазой и разным структурным состоянием (рис. 2, б) и зоны со смешанным мартенсит-аустенитным составом (рис. 2, в), зона с исходным аустенитом (рис. 2, г). Последние три типа зон могут

быть идентифицированы по эталонам аустенитно-мартенситных ( $A-M$ ) фаз [3], в которых прямое превращение осуществлялось термическим воздействием.

Аналогичные ситуации наблюдаются в пластически деформированных и упруговосстановленных областях. На рис. 2, б видны мартенситные фазы в виде отдельных пластин и блоков пластин. При удалении от дна отпечатка, а также по мере уменьшения остаточных деформаций меняется характер фазового распределения от однородного до неоднородного, т.е. наблюдается образование отдельных групп (мезоуровень) мартенситных кристаллов. Удаление от дна отпечатка сопровождается уменьшением количества  $M$ -фазы вплоть до полного ее отсутствия (рис. 2, г).

Наибольший интерес представляет зона, прилегающая ко дну отпечатка (рис. 2, а). По результатам экспериментальных исследований, проводимых в последнее время [1 – 18], особую роль имеют поверхностные слои нагруженного материала в процессах зарождения и развития пластической деформации, трения, изнашивания и разрушения материалов.

Толщина такого слоя, например при нагрузке на индентор 100 кН, составляет 0,13 – 0,15 мм. Определить структурно-фазовое состояние этого слоя в отличие от других областей затруднительно, так как использование тонких методов анализа сложно из-за малых размеров слоя и отсутствия эталона этой структуры в случае никелида титана. Однако на основе изучения и анализа литературных источников можно сказать, что образуются высокодефектные мелкодисперсные (нанокристаллические) структуры, состоящие из  $A$ -фазы (прямое превращение которой было подавлено из-за большого влияния гидростатической компоненты тензора напряжений) и упрочненной  $M$ -фазы.

Такое изменение структурно-фазового состояния сопровождается изменением и прочностных свойств деформированных зон. Показано, что твердость четко определяет прочностные свойства всех указанных выше зон.

На рис. 3, а приведены результаты исследования кинетической нанотвердости в виде диаграммы для сплава ТН-1К при нагрузке на пирамиду 50 Н.

Нагрузочные и разгрузочные ветви позволяют рассчитывать непрерывный ряд значений твердости по глу-

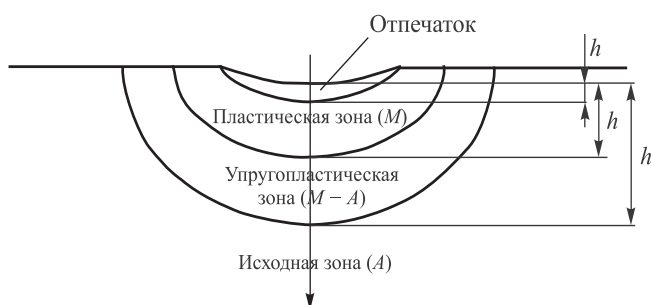


Рис. 1. Схема деформируемых зон и направления измерений нанотвердости

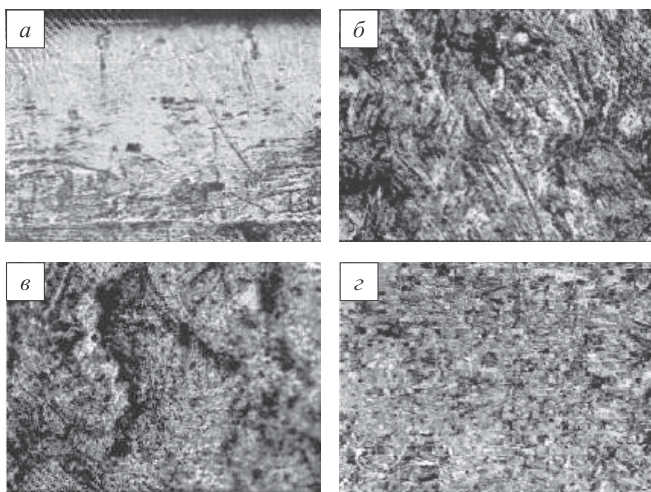


Рис. 2. Структура поверхности на удалении 0,1 мм (а), 1,0 мм (б), 2,0 мм (в) и 8,5 мм (г) от дна отпечатка,  $\times 200$

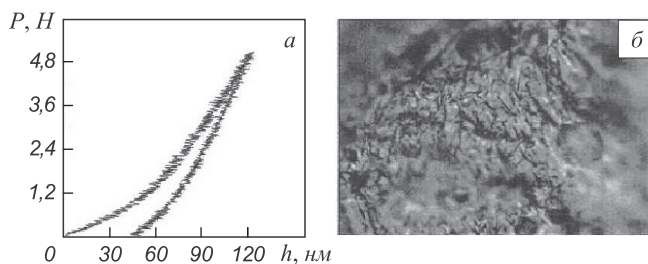


Рис. 3. Диаграмма (а) кинетической нанотвердости при внедрении индентора (удаление от дна отпечатка 3 мм) и вид (б) структурных составляющих,  $\times 1000$

бине отпечатка, получить ряд характеристик материала (в частности, твердость и модули упругости). Благодаря диаграммам обнаружен ряд важных явлений в приповерхностных слоях, например, диффузионная релаксация твердости в переменном поле внутренних напряжений, увеличение активационного объема материала вблизи поверхностей. Отметим, что сам метод дает возможность точного выбора места индентирования в нужную структурную составляющую при одновременной фотофиксации этого листа (рис. 3, б).

На рис. 4 приведена зависимость нанотвердости от расстояния от дна отпечатка вглубь материала. В прилегающей ко дну отпечатка области твердость составляет приблизительно 600 единиц, затем по мере удаления от дна отпечатка твердость возрастает, но далее снижается до твердости мартенситной фазы, а в последующем несколько возрастает до твердости исходной  $A$ -фазы. Аналогичные зависимости ранее были получены при испытании на микротвердость.

Следует заметить, что на обычных материалах (например, стали) характер изменения твердости вдоль оси материала иной, чем у никелида титана. Так, на рис. 5 показаны распределения микротвердости для стали 15X<sup>1</sup>. Линия 5 соответствует твердости недефор-

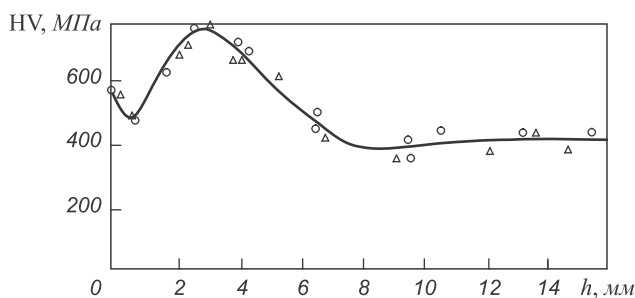


Рис. 4. Распределение нанотвердости в сплаве ТН-1К по нормали к поверхности (кругом и треугольником показаны значения, соответствующие разным структурным составляющим)

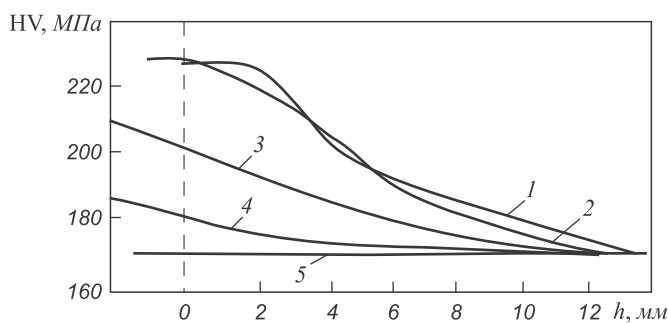


Рис. 5. Распределение микротвердости в стали 15X по нормали к поверхности:

1 — твердость вглубь материала вдоль оси; 2, 3, 4 и 5 — твердость в вертикальных направлениях на расстояниях 1,5, 3,0, 5,0 и 7,0 мм от оси соответственно

мированного материала. Наблюдается монотонное понижение твердости вглубь образца вплоть до твердости исходного недеформированного материала. Это обстоятельство объясняется монотонным снижением деформационного упрочнения при неизменном структурно-фазовом состоянии.

**Выводы.** В результате исследования влияния остаточных деформаций на структурно-фазовое (в том числе наноструктурное) состояние и свойства никелида титана по глубине залегания выявлены четыре типа структурных зон, плавно переходящих друг в друга, существенно отличными прочностными свойствами и структурно-фазовыми составами. Образование этих зон инициируется глубокими неоднородными пластическими деформациями, сопровождающимися прямыми (при нагружении) и обратными (при разгрузке) мартенситными превращениями.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кристаллогеометрические и кристаллохимические закономерности образования тройных соединений на основе титана и никеля / А.И. Потекаев, А.А. Клопотов, Э.В. Козлов и др. Под ред. А.И. Потекаева. — Томск: изд. политех. ун-та, 2011. — 312 с.
2. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана / А.И. Потекаев, А.А. Клопотов, Э.В. Козлов, В.В. Кулагина. Под ред. А.И. Потекаева. — Томск: Изд-во НТЛ, 2004. — 296 с.
3. Потекаев А.И., Плотников В.А. Акустическая диссипация энергии при термоупругих мартенситных превращениях / Под ред. А.И. Потекаева. — Томск: Изд-во НТЛ, 2004. — 196 с.
4. Слабоустойчивые длиннопериодические структуры в металлических системах / А.И. Потекаев, С.В. Дмитриев, В.В. Кулагина и др. Под ред. А.И. Потекаева. — Томск: Изд-во НТЛ, 2010. — 308 с.
5. Естественные длиннопериодические наноструктуры / А.И. Потекаев, И.И. Наумов, В.В. Кулагина и др. Под ред. А.И. Потекаева. — Томск: Изд-во НТЛ, 2002. — 260 с.
6. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вуз. Физика. 2009. № 8/2. С. 456 — 459.
7. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Кулагина В.В., Гюнтер В.Э. // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 10. С. 61 — 67.
8. Макаров С.В., Плотников В.А., Потекаев А.И. // Изв. вуз. Физика. 2011. Т. 54. № 3. С. 47 — 55.
9. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Козлов Э.В. и др. // Изв. вуз. Физика. 2010. № 1. С. 65 — 69.
10. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Гюнтер В.Э. и др. // Изв. вуз. Физика. 2009. Т. 52. № 12/2. С. 60 — 67.
11. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Ясенчук Ю.Ф. и др. // Изв. вуз. Физика. 2009. Т. 52. № 9/2. С. 77 — 97.
12. Клопотов А.А., Клопотов В.Д., Потекаев А.И. и др. // Фундаментальные проблемы совр. материаловедения. 2010. № 3. С. 83 — 89.
13. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Гюнтер В.Э. и др. // Материаловедение. 2010. № 12(165). С. 37 — 44.
14. Гюнтер В.Э., Потекаев А.И., Клопотов А.А., Грищенко Ю.Е. // Изв. вуз. Физика. 2011. Т. 54. № 5. С. 50 — 56.
15. Potekaev A.I., Haimzon B.B. // Journal of Engineering Materials and Technology. 1999. V. 121. № 1. P. 61 — 66.
16. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вуз. Физика. 2011. Т. 54. № 8. С. 5 — 23.
17. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Калачева Е.С. и др. // Изв. вуз. Физика. 2010. № 10/2. С. 152 — 157.

<sup>1</sup> Цукублина К.Н. Исследования НДС при внедрении осесимметричных штампов в упрочняющийся материал. Автореф. дисс. канд. техн. наук. Воронеж, 1971. 32 с.



18. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Кулагина В.В. и др. // Деформация и разрушение материалов. 2011. № 11. С. 40 – 43.
19. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Гюнтер В.Э., Кулагина В.В. – В кн.: Влияние структурных дефектов на устойчивость сплавов на основе никелида титана / Под ред. В.Э. Гюнтера. – Томск: Изд-во НПП «МИЦ», 2010. С. 296 – 302.
20. Хохлов В.А. // Вестник ТГУ. 2004. № 32. С. 101 – 108.
21. Хохлов В.А. – В кн.: Современные проблемы машиностроения. Тр. II междунар. науч.-техн. конф. – Томск: изд-во ТПУ, 2004. С. 107 – 110.

© 2012 г. А.И. Потекаев, В.А. Хохлов,  
С.В. Галсанов  
Поступила 31 января 2012 г.

УДК 669.018:538.931

**Г.М. Полетаев, А.Н. Мартынов,  
Д.В. Дмитриенко, М.Д. Старостенков**

Алтайский государственный технический университет

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН КРУЧЕНИЯ В НИКЕЛЕ В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Диффузионные свойства деформированных металлов и сплавов зависят от величины деформации и скорости деформирования. Механизм влияния деформации на диффузию по различным кристаллографически определенным границам зерен изучен слабо, тем более на атомном уровне. Кроме того, безусловный интерес представляет атомный механизм пластической деформации с участием границ зерен.

Малоугловые границы кручения, как известно, имеют упорядоченную структуру, представляющую собой сетку винтовых дислокаций [1, 2]. В работе [3] проведена идентификация винтовых дислокаций в границах кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах на примере никеля, меди, алюминия. Показано, что границы (100) содержат квадратную сетку винтовых дислокаций  $1/2\langle 110 \rangle$ ; границы (110) – прямоугольную сетку винтовых дислокаций двух типов:  $1/2\langle 110 \rangle$  и  $1\langle 100 \rangle$ ; границы (111) – гексагональную сетку винтовых дислокаций  $1/4\langle 112 \rangle$ . С увеличением угла разориентации размеры ячеек дислокационной сетки уменьшаются. В центре ячеек сетки структура соответствует практически идеальному кристаллу.

В работах [4, 5] описаны результаты исследования методом молекулярной динамики самодиффузии по границам кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах (никеле, меди, алюминии). Самодиффузия по малоугловым границам кручения осуществляется посредством образования цепочек смещенных атомов вдоль ядер зернограницных винтовых дислокаций, причем местами инициации цепочек атомных смещений выступают узлы дислокационной сетки. Цепочки атомных смещений зачастую имеют замкнутую форму. Это связано с тем, что в таком случае рекомбинирует пара избыточных точечных дефектов (вакансия и междоузельный атом), образующихся в соседних узлах дислокационной сетки при возникновении цепочки смещенных атомов

вдоль ядра дислокации от одного узла к другому. Значения энергии активации диффузии по границам (100), (110), (111), полученные в работе [5], сильно отличаются друг от друга. Наибольшей диффузионной проницаемостью (минимальной энергией активации) обладают границы (110), наименьшей – границы (111). С ростом угла разориентации энергия активации падает.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики самодиффузии и структурных превращений вблизи границ зерен кручения (100), (110), (111) в никеле в условиях одноосной деформации.

Границу кручения создавали в середине расчетного блока путем поворота двух ГЦК кристаллов (двух половин блока) на угол разориентации  $\theta$  вокруг оси, перпендикулярной границе. Рассматривали три варианта плоскости границы: (100), (110), (111). Получающийся расчетный блок обрезают таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот. Затем проводили динамическую релаксацию структуры, в ходе которой бикристалл переходил в равновесное состояние. В завершении релаксации выполняли процедуру охлаждения до 0 К.

Граничные условия по всем осям задавали жесткие, т.е. крайним атомам расчетного блока не позволялось двигаться. Такой тип условий позволяет сохранить положение границы зерен с заданными изначально геометрическими параметрами. Количество атомов в расчетном блоке составляло около 30 000. Шаг интегрирования движения частиц по времени в соответствии с методом молекулярной динамики варьировали от 1 до 10 фс.

Межатомные взаимодействия описывали многочастичным потенциалом Клери-Розато [6]. Параметры потенциала для никеля взяты из работы [6].

При определении коэффициентов самодиффузии проводили компьютерные эксперименты продолжи-