

УДК 539.3

Н.Д. Няшина

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРОВАНИЯ СТАЛИ ПРИ МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДАХ

Задача описания деформации при фазовых переходах является составной частью проблемы построения двухуровневой модели неупругого деформирования стали при термомеханическом воздействии, основанной на подходах физической теории пластичности. Градиент трансформационной деформации представительного мезообъема построен на основе кристаллографической теории мартенситного перехода и описывает деформирование с инвариантной плоскостью. Он выражается через вектор нормали к инвариантной плоскости и вектор сдвига, которые задают трансформационную систему (по аналогии с системой кристаллографического сдвига для дислокационного скольжения). Согласно ориентационным соотношениям Курдюмова – Закса, существуют 24 трансформационные системы, выражения для компонент которых приводятся в работе. Рассматриваются особенности применения меры неупругого деформирования представительного объема мезоуровня (кристаллита) при мартенситном превращении, в частности определяются условия активации этих систем при разных типах нагружения.

Ключевые слова: мартенситные переходы, двухуровневая модель, физические теории пластичности, математическое моделирование.

N.D. Niashina

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

MATHEMATICAL MODEL OF THE STEEL DEFORMATION AT MARTENSITIC TRANSFORMATION

The task of the deformation description at phase transformation is a part of a problem involving creation of two-level model of steel inelastic deformation at thermomechanical treatment based on approaches of the physical plasticity theory. The gradient of transformational deformation of representative mesovolume is constructed on the basis of the crystallographic theory of martensitic transformation and describes deformation with the invariant plane. It is expressed through a vector of a normal to the invariant plane and a shear vector which set transformational system (by analogy with system of crystallographic shear for dislocation sliding). According to the Kurdjumov – Sachs's orientation relationships, there are 24 transformational systems, expressions for which component are given in the article. Features associated with application of a measure of inelastic deformation of mesolevel (crystallite) representative volume at martensitic transformation are considered. In particular conditions of activation of these systems at different types of loading are defined.

Keywords: martensitic transformations, the two-level model, the physical theory of plasticity, mathematical modeling.

Современные технологии металлургии широко применяют термомеханическую обработку для получения требуемых механических свойств металлических заготовок и конструкций. Процесс обработки включает сложные взаимосвязанные физические явления, такие как теплоперенос, диффузия компонентов сплава, неупругое деформирование, полиморфные превращения в стали. Описание этих процессов вовлекает в рассмотрение различные масштабные уровни, для которых характерны те или иные физические механизмы.

Настоящая работа является составной частью задачи построения двухуровневой модели неупругого деформирования стали под действием приложенных механических нагрузок и изменения температуры. Модель описывает поведение стали при деформировании на уровне представительного объема макроуровня и на мезоуровне (уровне отдельного зерна, кристаллита); математическая постановка для мезоуровня включает в себя конститутивные соотношения физической теории пластичности (закон Гука в скоростной релаксационной постановке), критерии полиморфного превращения, эволюционные уравнения для доли сосуществующих фаз и кинематические соотношения для меры деформации [1–4]. В работе [5] приводится подробный вывод и обоснование применения в многоуровневых моделях градиента деформации, связанной с мартенситными переходами, для представительного объема мезоуровня. Выкладки базируются на использовании кристаллографической теории мартенситных превращений в сталях [6–9], в предположении, что трансформационная деформация является деформацией с инвариантной плоскостью.

Градиент трансформационной деформации для представительного мезообъема родительской фазы аустенита, в котором появляется пластинка мартенсита, для одной трансформационной системы имеет вид [7–9]

$$\mathbf{f}^{tr} = \mathbf{I} + \mathbf{s} \mathbf{m}, \quad (1)$$

где \mathbf{m} и \mathbf{s} – вектор нормали к инвариантной плоскости габитуса и вектор сдвига соответственно (задают трансформационную систему); векторы в общем случае не перпендикулярны. Эта мера описывает деформацию с инвариантной плоскостью, поскольку все плоскости с нормалью \mathbf{m} не искажаются и не поворачиваются, так как смещения

в каждой из них одинаковы и пропорциональны расстоянию от габитусной плоскости.

Соотношение (1) для градиента деформации \mathbf{f}^{tr} записано для одной трансформационной системе. Однако согласно ориентационному соотношению Курдюмова – Закса, в зерне аустенита существуют 24 эквивалентные трансформационные системы. Тогда градиент трансформационной деформации можно записать в виде

$$\mathbf{f}^{tr} = \mathbf{I} + \sum_{\beta=1}^{24} \xi^{(\beta)} \mathbf{s}^{(\beta)} \mathbf{m}^{(\beta)}, \quad (2)$$

где $\xi^{(\beta)}$ – доля мартенситной фазы, образовавшейся по β -й трансформационной системе.

Все 24 трансформационные системы могут быть получены из одной, выведенной в рамках кристаллографического описания мартенситного перехода, путем всевозможных перестановок компонент и изменения знаков.

В табл. 1 приведены значения для компонент векторов всех трансформационных систем. Следует отметить, что они группируются по 8 систем в множества, связанные с ориентацией тензора Бейна.

Таблица 1

Компоненты векторов 24 трансформационных систем

№ п/п	m			s		
1	-0,837	-0,533	0,122	-0,286	0,426	0,112
2	-0,837	0,533	0,122	-0,286	-0,426	0,112
3	-0,837	0,122	-0,533	-0,286	0,112	0,426
4	-0,837	0,122	0,533	-0,286	0,112	-0,426
5	-0,837	-0,122	0,533	-0,286	-0,112	-0,426
6	-0,837	-0,122	-0,533	-0,286	-0,112	0,426
7	-0,837	0,533	-0,122	-0,286	-0,426	-0,112
8	-0,837	-0,533	-0,122	-0,286	0,426	-0,112
9	-0,533	-0,837	0,122	0,426	-0,286	0,112
10	0,533	-0,837	0,122	-0,426	-0,286	0,112
11	0,122	-0,837	-0,533	0,112	-0,286	0,426
12	0,122	-0,837	0,533	0,112	-0,286	-0,426
13	-0,122	-0,837	0,533	-0,112	-0,286	-0,426
14	-0,122	-0,837	-0,533	-0,112	-0,286	0,426
15	0,533	-0,837	-0,122	-0,426	-0,286	-0,112
16	-0,533	-0,837	-0,122	0,426	-0,286	-0,112

Окончание табл. 1

№ п/п	m			s		
17	0,122	-0,533	-0,837	0,112	0,426	-0,286
18	0,122	0,533	-0,837	0,112	-0,426	-0,286
19	0,533	0,122	-0,837	0,426	0,112	-0,286
20	-0,533	0,122	-0,837	-0,426	0,112	-0,286
21	0,533	-0,122	-0,837	-0,426	-0,112	-0,286
22	-0,533	-0,122	-0,837	0,426	-0,112	-0,286
23	-0,122	0,533	-0,837	-0,112	-0,426	-0,286
24	-0,122	-0,533	-0,837	-0,112	0,426	-0,286

Тензор деформации Бейна описывает преобразование элементарной ячейки ГЦК аустенита в ячейку ОЦТ мартенсита в предположении минимальности перемещений атомов. Как видно из рис. 1, в двух смежных ячейках ГЦК-решетки можно формально выделить ячейку ОЦТ (рис. 1, а), параметры которой отличаются от наблюдаемых в мартенсите (рис. 1, б); таким образом, для получения реальной ячейки ОЦТ мартенсита формально выделенную необходимо сжать вдоль одной оси и растянуть вдоль другой (рис. 1, в) [10].

Поскольку ГЦК-решетка симметрична относительно осей [100], [010], [001] и подобную ОЦТ-ячейку можно выделить в любом из этих направлений, деформация Бейна, соответственно, может быть выражена одним из трех тензоров \mathbf{B}_1 , \mathbf{B}_2 или \mathbf{B}_3 , компоненты которых в базисе кристаллографической системы координат решетки аустенита имеют вид

$$[B_1] = \begin{bmatrix} \eta_2 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{bmatrix}, \quad [B_2] = \begin{bmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{bmatrix}, \quad [B_3] = \begin{bmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_2 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$\eta_1 = \frac{\sqrt{2}a}{a_0}, \quad \eta_2 = \frac{a}{a_0}.$$

Здесь a_0 и a – периоды исходной решетки аустенита и мартенсита соответственно.

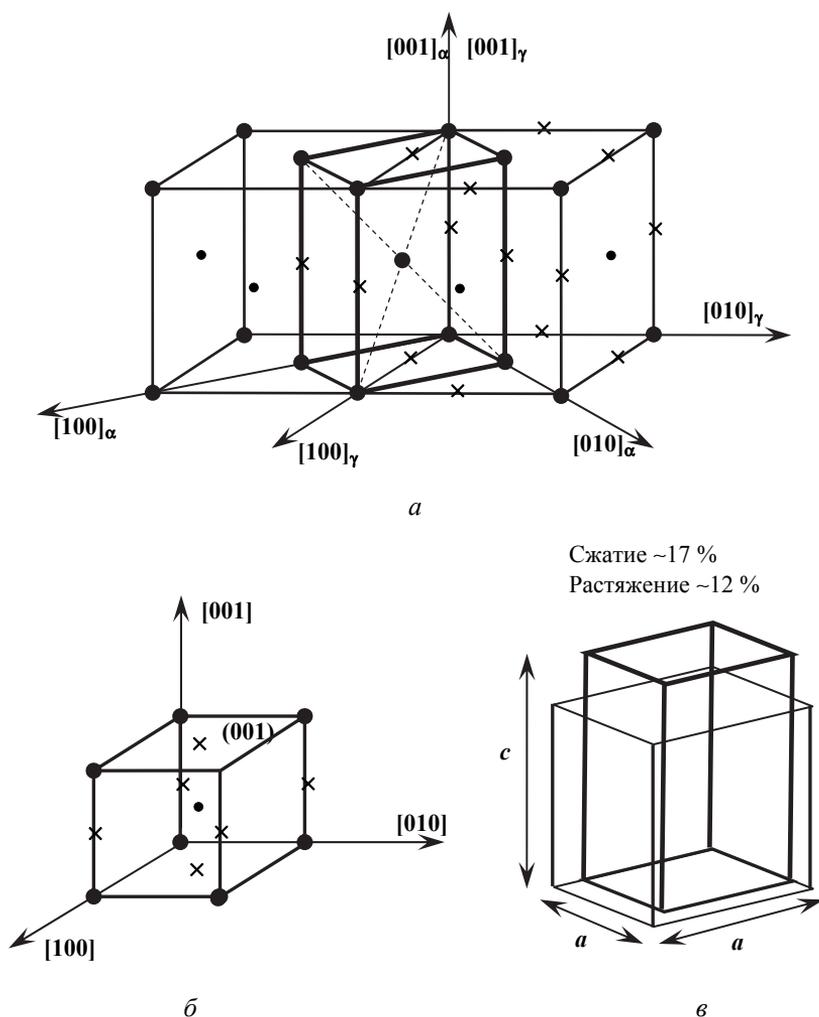


Рис. 1. Геометрическая интерпретация деформации Бейна: *a* – формально выделенная ячейка ОЦТ-решетки (жирная линия) в ГЦК-решетке аустенита; *б* – реальная ячейка ОЦТ-решетки мартенсита; *в* – деформация Бейна, превращающая формально выделенную в аустените ячейку ОЦТ-решетки (жирная линия) в реальную ячейку ОЦТ-решетки мартенсита [10]

На рис. 2 изображены стереографические проекции указанных трансформационных систем, полученные для каждого из трех тензоров Бейна. Для сравнения приведены проекции нескольких характерных для кубических решеток плоскостей (типа $[100]$, $[101]$, $[110]$ и т.д.). Заметно, что они группируются определенным образом: вблизи плоскостей $[101]$ – $[-101]$ для тензора деформации Бейна \mathbf{B}_1 , $[011]$ – $[0-11]$ – для \mathbf{B}_2 , $[-101]$ – $[0-11]$ – для \mathbf{B}_3 .

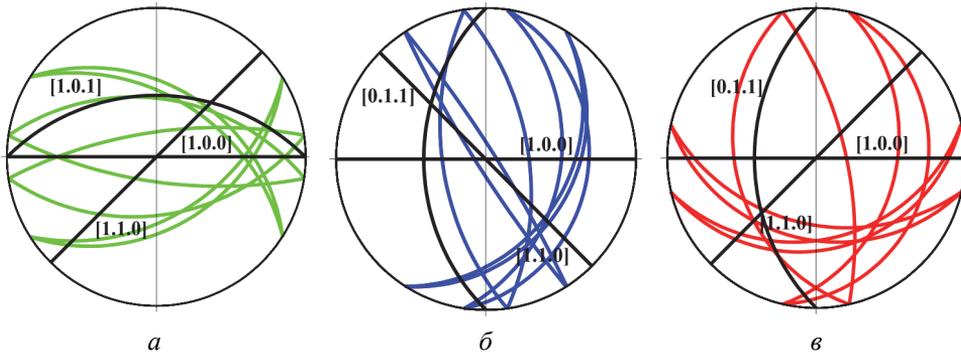


Рис. 2. Стереографические проекции инвариантных плоскостей для 24 трансформационных систем (см. табл. 1): *a* – плоскости, связанные с деформацией Бейна \mathbf{B}_1 ; *b* – \mathbf{B}_2 ; *c* – \mathbf{B}_3 (черным цветом отмечены некоторые кристаллографические плоскости, характерные для ОЦТ кристалла) (авторские результаты)

Для анализа условий активации трансформационных систем под действием приложенных нагрузок воспользуемся простейшим термодинамическим критерием. Как известно из экспериментов [6, 11], значение температуры, при которой начинается мартенситный переход, зависит от приложенного напряжения: чем выше уровень приложенных нагрузок, тем выше температура, при которой начинается переход. Такую зависимость можно объяснить тем, что при высокой температуре нет достаточной движущей силы, чтобы преодолеть потенциальный барьер, необходимый для фазового перехода, т.е. разность между свободной энергией мартенситной фазы и аустенитной фазы недостаточна для активизации фазового перехода. Таким образом, для начала мартенситного перехода при температурах выше равновесной системе необходимо передать дополнительную энергию, например, совершив работу над системой [8]:

$$U = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}.$$

Здесь U – работа приложенного напряжения на деформациях, вызванных мартенситным переходом. При достижении U критического значения при заданной температуре происходит фазовое превращение.

Проводились исследования поведения указанных трансформационных систем под действием простого нагружения (одно-, двух-, трехосное растяжение, простой сдвиг) представительного объема мезоуровня.

Результаты расчетов приведены на рис. 3.

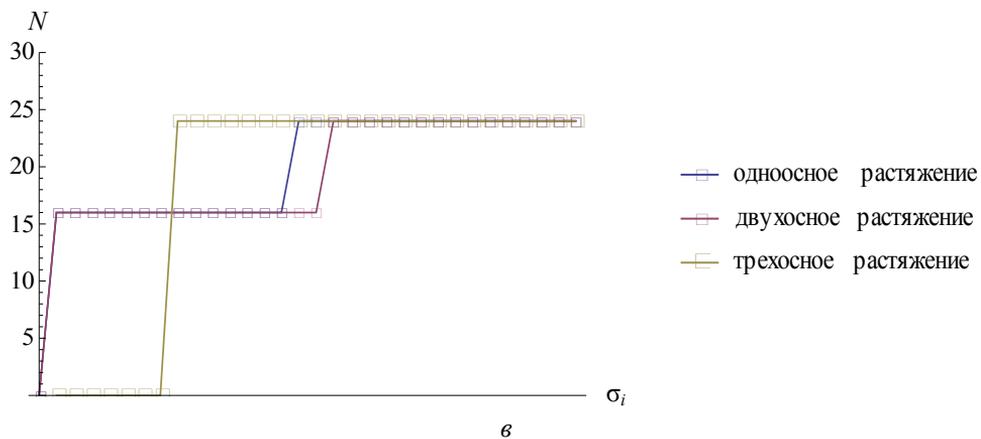
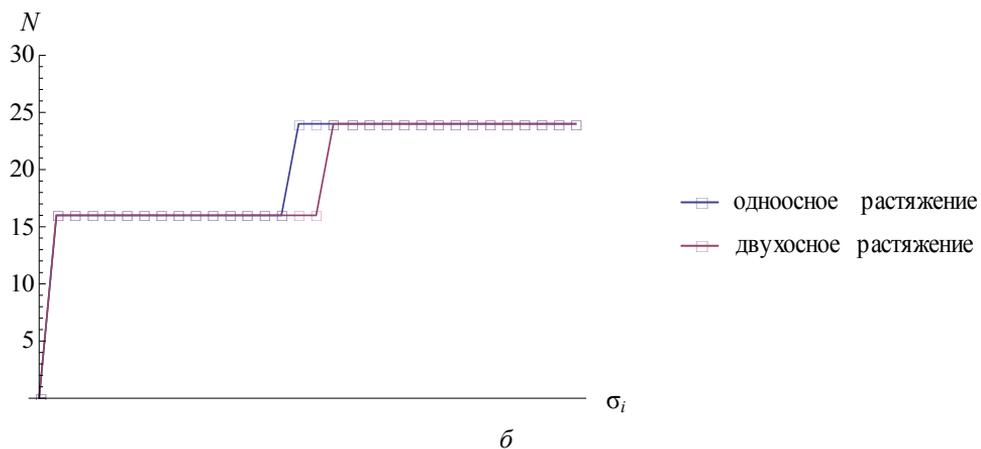
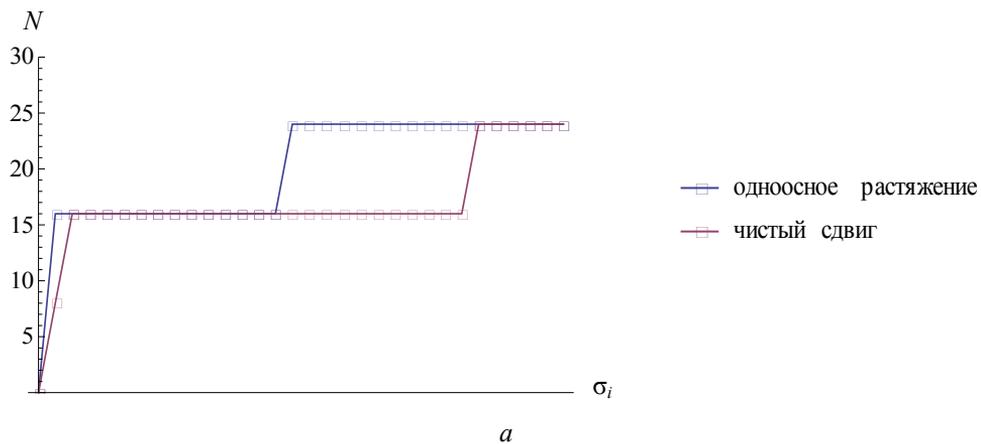


Рис. 3. Число активных трансформационных систем в зависимости от величины нагрузки при разных схемах нагружения (авторские результаты)

Как показали расчеты, при одно- и двухосном растяжении даже при небольшом уровне нагрузки сразу активизируются 16 трансформационных систем – это в первую очередь 8 благоприятно ориентированных систем, полученных с использованием тензора Бейна, «сонаправленного» с направлением нагрузки.

В табл. 2 отмечены номера трансформационных систем, которые активизируются в первую очередь (подчеркиванием отмечены номера систем, полученные из одного тензора деформации Бейна).

Таблица 2

Номера активных трансформационных систем при различных видах нагружения

Вид нагружения	Число активных систем	Номера активных систем (см. табл. 1)
Одноосное растяжение $\sigma_{11} \neq 0$	16	<u>1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8</u> , 9, 10, 15, 16, 19, 20, 21, 22
Одноосное растяжение $\sigma_{22} \neq 0$	16	1, 2, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 23, 24
Простой сдвиг $\sigma_{12} = \sigma_{21} \neq 0$	8	1, 2, 7, 8, 9, 10, 15, 16
	16	<u>1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16</u>
Простой сдвиг $\sigma_{13} = \sigma_{31} \neq 0$	8	3, 4, 5, 6, 19, 20, 21, 22
	16	<u>1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24</u>
Двухосное растяжение $\sigma_{11} = \sigma_{22} \neq 0$	16	3, 4, 5, 6, 11, 12, 13, 14, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24

Для простого сдвига вначале активизируются 8 систем, а затем практически сразу еще 8. Эти 16 систем получены для двух тензоров Бейна, «сонаправленных» с приложенными нагрузками. Для активизации всех 24 систем приходится прикладывать нагрузку, в разы большую, чем для первично активированных систем. Для трехосного растяжения активизируются сразу 24 системы, но это происходит при уровнях нагрузки, значительно меньших, чем для одно-, двухосного растяжения и простого сдвига, но значительно больших, чем необходимо для первичной активации 16 трансформационных систем в рассмотренных примерах.

Выводы

В работе приведены выражения для компонент векторов 24 трансформационных систем. Исследуется последовательность активации трансформационных систем под действием приложенного напряжения: одно-, двух-, трехосного растяжения и простого сдвига. Установлено, что в первую очередь активизируются системы, благоприятно ориентированные по отношению к направлению приложенных нагрузок, и еще несколько систем из других групп.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №13-01-96006-урал_a, грант № 14-01-00069).

Список литературы

1. Исупова И.Л., Трусов П.В. Математическое моделирование фазовых превращений в сталях при термомеханической нагрузке // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2013. – № 3. – С. 126–156.
2. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т. 15, № 3. – С. 327–344.
3. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 17–28.
4. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 5. – С. 5–30.
5. Няшина Н.Д., Трусов П.В. Моделирование мартенситных превращений в сталях: кинематика мезоуровня // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2014. – № 4. – С. 118–151. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.4.05.
6. Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. – М.: Наука, 1977. – 240 с.
7. Bhadeshia H.K.D.H., Kundu S., Abreu H. Mathematics of crystallographic texture in martensitic and related transformations // Microstructure and Textures in steel and other materials. – 2009. – Vol. XIX. – P. 19–31.

8. Perdahcioğlu E.S. Constitutive Modeling of Metastable Austenitic Stainless Steel. Ph.D. Thesis. – Enschede, The Netherlands, 2008. – 145 p.

9. Wechsler M.S., Liebermann D.S., Read T.A. On the theory of the formation of martensite // *J. Metals*. – 1953. – Vol. 5, sect. 2, no. 11. – P. 1503–1515.

10. Физика твердого тела / Г.Н. Елманов, А.Г. Залужный, В.И. Скрытый, Е.А. Смирнов, В.Н. Яльцев // *Физическое материаловедение: учебник для вузов: в 6 т.; под ред. Б.А. Калина*. – М.: Изд-во Моск. физ.-инжен. ин-та, 2007. – Т. 1. – 236 с.

11. Центральный металлический портал РФ. Мартенсит – образование и превращения. Ч. 1. [Электронный ресурс]. – URL: http://metallcheckiy-portal.ru/articles/chermet/fazovie_sostoyania/martensit_obrazovanie_i_prevrasheniya/1 (дата обращения: 7.09.2014).

References

1. Isupova I.L., Trusov P.V. Matematicheskoe modelirovanie fazovykh prevrashchenii v staliakh pri termomekhanicheskoi nagruzke [Mathematical modeling of phase transformations in steel under thermomechanical loading]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2013, no. 3, pp. 126-156.

2. Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Shveikin A.I. Dvukhurovnevaia model' uprugoplasticheskogo deformirovaniia polikristallicheskikh materialov [Two-level model of elastic-plastic deformation of polycrystalline materials]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii*, 2009, vol. 15, no. 3, pp. 327-344.

3. Trusov P.V., Shveikin A.I. Mnogourovnevye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Statisticheskie modeli [Multilevel physical model of mono- and polycrystals. Statistical models]. *Fizicheskaiia mezomekhanika*, 2011, vol. 14, no. 4, pp. 17-28.

4. Trusov P.V., Shveikin A.I. Mnogourovnevye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Priamye modeli [Multilevel physical model of mono and polycrystals. Direct model]. *Fizicheskaiia mezomekhanika*, 2011, vol. 14, no. 5, pp. 5-30.

5. Nyashina N.D., Trusov P.V. Modelling of martensitic transformations in steels: kinematics of the meso-level. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2014, no. 4, pp. 118-151. DOI:10.15593/perm.mech/2014.4.05.

6. Kurdiumov G.V., Utevskii L.M., Entin R.I. Prevrashcheniia v zheleze i stali [Transformations in iron and steel]. Moscow: Nauka, 1977, 240 p.

7. Bhadeshia H.K.D.H., Kundu S., Abreu H. Mathematics of crystallographic texture in martensitic and related transformations. *Microstructure and Textures in steel and other materials*, 2009, vol. XIX, pp. 19-31.

8. Perdahcioğlu E.S. Constitutive Modeling of Metastable Austenitic Stainless Steel. *Ph.D. Thesis*. Enschede, The Netherlands, 2008, 145 p.

9. Wechsler M.S., Liebermann D.S., Read T.A. On the theory of the formation of martensite. *J. Metals*, 1953, vol. 5, sect. 2, no. 11, pp. 1503-1515.

10. Elmanov G.N., Zaluzhnyi A.G., Skrytnyi V.I., Smirnov E.A., Ial'tsev V.N. *Fizicheskoe materialovedenie. Tom 1. Fizika tverdogo tela*. [Physical materials science. Vol. 1. Physics of solids]. Ed. B.A. Kalin. Moscow: Moscovskii fiziko-inzhenernyi institut, 2007. 236 p.

11. Tsentral'nyi metallicheskiy portal Rossoiskoi Federatsii. Martensit – obrazovanie i prevrashcheniia [The Central metal portal of the Russian Federation. Martensite – appearance and transformation. Part 1], available at: http://metallichekiy-portal.ru/articles/chermet/fazovie_sostoyania/martensit_obrazovanie_i_prevrasheniia/1 (accessed 7 September 2014).

Получено 31.12.2014

Об авторе

Няшина Наталья Дмитриевна (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Математические моделирование систем и процессов» Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: nnd73@perm.ru).

About the author

Natal'ia D. Niashina (Perm, Russian Federation) – Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: nnd73@perm.ru).