

УПРУГИЕ ПОСТОЯННЫЕ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ TiNi С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

Муслов С.А.¹, Лотков А.И.²

¹ГБОУ ВПО Московский Государственный Медико-Стоматологический Университет (МГМСУ) им. А.И. Евдокимова Минздрава РФ, Москва, Россия, 127473, Москва, ул. Делегатская, 20, стр. 1, e-mail: muslov@mail.ru

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук» (ИФПМ СО РАН), 634055, г. Томск, просп. Академический, 2/4, e-mail: lotkov@ispms.ru

Упругие постоянные – одни из важнейших характеристик твердого тела. Упругие постоянные второго порядка и упругие постоянные третьего порядка являются коэффициентами разложения внутренней энергии по степеням деформации при квадратичных и кубических членах этого разложения. В области применимости закона Гука плотность упругой энергии квадратична относительно компонент деформации. Вне этой области появляются произведения деформаций более высокого порядка. Упругие постоянные (модули) C_{ijk} третьего порядка связывают упругую энергию кристалла с произведениями трех компонент тензора деформации [6, 7]. В общем случае анизотропное твердое тело имеет всего 216 модулей третьего порядка. Из условий симметрии, однако, могут быть найдены дополнительные связи между модулями третьего порядка. Кристаллы кубической симметрии имеют три независимых упругих постоянных второго порядка, шесть или восемь постоянных третьего порядка и одиннадцать четвертого порядка. Кубические кристаллы наиболее симметричных групп O , O^h и T^d имеют шесть независимых модулей третьего порядка C_{111} , C_{112} , C_{123} , C_{144} , C_{456} и C_{166} . Модули третьего порядка обычно в 3-10 раз больше модулей второго порядка. Ангармонические эффекты важны при рассмотрении явлений, связанных с потерей устойчивости кристаллическими решетками и фазовыми переходами твердых тел. В [1] получены численные критерии устойчивости исходной B2 кристаллической решетки сплавов на основе никелида титана TiNi к однородным и коротковолновым деформациям. Критерии содержат соотношения между модулями упругости 2-го и 3-го порядка.

Некоторые соотношения между модулями упругости можно получить при гидростатическом сжатии исследуемого материала. Остальные необходимые соотношения получаются путем измерения скорости звука в условиях одноосного сжатия материала. Мы применили для расчета упругих постоянных третьего порядка данные [3] измерения скорости ультразвуковых волн (УЗВ) на частотах 3 и 5 МГц для различных мод, распространявшихся в кристаллах TiNi-2%Fe в различных направлениях при гидростатическом давлении от 0 до 0,8 ГПа (табл. 1).

В сплавах на основе TiNi хорошо изучено, что высокотемпературная ОЦК B2-фаза, упорядоченная по типу CsCl, может подвергаться при понижении температуры мартенситным превращениям по двум каналам: $B2 \rightarrow B19'$ и $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$, в зависимости от состава и термомеханической обработки (ТМО). Здесь $B19'$ и R – моноклинная и ромбоэдрическая фазы, соответственно [3]. Сплавы с эффектом памяти формы нашли широкое применение в технике и медицине, например в качестве финальных соединений при сборке конструкций (втулок), имплантируемых в организм длительно функционирующих материалов, ортодонтических дуг, сосудистых стентов и сфера применения этих материалов постоянно продолжает расширяться. Они способны обратимо изменять свою форму при изменении температуры, проявляют высокие эластичные свойства, не разрушаются в условиях знакопеременной нагрузки.

Монокристаллы системы TiNi-TiFe впервые получены и изучены в работах коллектива в составе Лотков А.И., Чумляков Ю.И., Хачин В.Н., Кузнецов А.В. и Муслов С.А. в СФТИ им. академика В.Д. Кузнецова, г. Томск [2, 4]. Упругие модули второго порядка кристаллов были измерены резонансным методом пьезоэлектрического составного вибратора [4, 8].

Таблица 1.

L/Т	Мода УЗВ	ω	ω , ГПа [4, 8]	$d\omega/\omega dp$	$d\omega/dp$	$1+2\omega/3B+(d\omega/dp)_{p=0}$ [9, 10]
L	[100][100]]	c_{11}	162, 5	0,032	5,20	$-\frac{1}{3B}(c_{111} + 2c_{112})$
Т	[100] $\nabla \perp$ N	c_{44}	34,0	0,0235	7,99	$-\frac{1}{3B}(c_{144} + 2c_{166})$
L	[110][110]]	c_L	179, 3	0,036	6,50	$-\frac{1}{3B}(\frac{1}{2}c_{111} + 2c_{112} + c_{144} + 2c_{166} + \frac{1}{2}c_{123})$
Т	[110][1 $\bar{1}0]$	C'	17,2	-0,020	-0,34	$-\frac{1}{3B}(\frac{1}{2}c_{111} - \frac{1}{2}c_{123})$

Здесь, L – продольные моды колебаний, Т – поперечные моды колебаний; N – единичный вектор вдоль направления распространения волны; ω – упругие постоянные второго порядка или их линейные комбинации: $c_L = \frac{1}{2}(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})$;

$$C' = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12});$$

$$B = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}, \text{ где } B \text{ – модуль объемного сжатия.}$$

В результате для нахождения 6-и упругих постоянных TiNi имеем систему из 4-х линейных уравнений:

$$\begin{cases} c_{111} + 2c_{112} = -2,92 \\ c_{144} + 2c_{166} = -0,82 \\ \frac{1}{2}c_{111} + 2c_{112} + c_{144} + 2c_{166} + \frac{1}{2}c_{123} = -3,50 \\ \frac{1}{2}c_{111} - \frac{1}{2}c_{123} = -0,31 \end{cases} \quad (1)$$

Упругая постоянная c_{456} в уравнения системы не вошла, поскольку отсутствуют данные по зависимости от одноосного давления вдоль направления [111] скорости распространения звуковой волны, которая определяет эту постоянную [9]. Но и без c_{456} система не имеет численного решения, хотя и устанавливает соотношения между упругими постоянными третьего порядка кристаллов TiNiFe. Учтем условия Коши для упругих постоянных третьего порядка кубических кристаллов [9]

$$c_{112} = c_{166}, c_{123} = c_{144} = c_{456}. \quad (2)$$

Условия Коши выполняются, вообще говоря, далеко не всегда, тем не менее, они часто фигурируют в литературе. В нашем исследовании условия (2) позволяют снизить число переменных до трёх. Но в этом случае получаем систему линейных уравнений, которая на первый взгляд попадает под определение переопределенной (число уравнений – 4 превышает число неизвестных – 3):

$$\begin{cases} c_{111} + 2c_{112} = -2,92 \\ 2c_{112} + c_{123} = -0,82 \\ \frac{1}{2}c_{111} + 4c_{112} + \frac{3}{2}c_{123} = -3,50 \\ \frac{1}{2}c_{111} - \frac{1}{2}c_{123} = -0,31 \end{cases} \quad (3)$$

Редактор электронных таблиц Excel Microsoft Office позволяет решать такие системы линейных уравнений через надстройку “Поиск решения”, предназначенную для анализа уравнений и задач оптимизации. Однако более подробный анализ системы (3) выявил, что ранг её матрицы равен 2, в результате она на самом деле является неопределенной и получение даже приближенных её решений является весьма проблематичным. Однако мы можем численно оценить эти приближенные решения. Зная упругие постоянные третьего порядка для сплавов на основе меди, испытывающих мартенситные превращения из β -фазы зададим исходные значения изменяемых ячеек приложения (терминология метода) равными -1 ТПа. Тогда получим следующие значения упругих постоянных третьего порядка TiNi-2%Fe: $c_{111} = -1,19$ ТПа, $c_{112} = -0,51$ ТПа, $c_{123} = -0,57$ ТПа. Сумма отклонений точки решения от плоскостей системы – минимизируемый параметр метода составляет в этом случае 0,66 ТПа (для 3-х переменных уравнения системы можно геометрически интерпретировать как плоскости). Применить для решения системы уравнений (3) другой известный метод нахождения приближенных значений – метод наименьших квадратов (МНК) прямо невозможно, т.к. обратной матрицы системы $(A^T \cdot A)^{-1}$ не существует.

Выводы. Получены численные соотношения между упругими постоянными третьего порядка c_{ijk} кристаллов сплава на основе TiNi с эффектом памяти формы в виде системы линейных уравнений. Рассчитаны приближенные значения упругих постоянных третьего порядка TiNi-2%Fe с учетом условий Коши для кубических кристаллов. Авторы надеются, что приведенные данные помогут лучше понять природу и механизм мартенситных превращений, а также проблему зарождения мартенсита в сплавах никелида титана. Для расчета точных значений всех упругих постоянных третьего порядка сплава необходимы дополнительные исследования зависимости скорости распространения звука в сплаве от одноосного давления для высокосимметричных направлений [110] и [111].

1. Кондратьев В.В., Муслов С.А., Пушин В.Г., Хачин В.Н. Структура и свойства В2 соединений титана. II. Предмартенситная неустойчивость ОЦК (В2) решётки // Физ. метал. и металлоредактирование. – 1988. – Т. 66, Вып. 2. – С. 359-369.
2. Кузнецов А.В., Муслов С.А., Лотков А.И., Хачин В.Н., Гришков В.Н., Пушин В. Г. Упругие постоянные TiNi вблизи мартенситных превращений // Известия вузов, сер. Физика. – 1987, № 7. – С. 98-99.
3. А.И. Лотков, В.П. Лапшин, В.Н. Гришков, В.А. Гончарова. Влияние гидростатического давления на упругие свойства сплавов с памятью формы Ti-Ni-Fe // Перспективные материалы. – 1999. – № 2. – С. 49-53.
4. Муслов С.А., Кузнецов А.В., Хачин В.Н., Лотков А.И., Пушин В. Г., Гришков В.Н. Аномалии упругих постоянных монокристаллов $Ti_{50}Ni_{48}Fe_2$ // Известия вузов, сер. Физика. – 1987. - № 8. – С. 104-105.
5. Секоян С.С. Формулы Тэрстона–Браггера для кубических кристаллов // Акустический журнал, 21, 2, с. 264-267 (1975).
6. Францевич И.Н. и др. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. – Киев: Наукова Думка, 1982. – 286 с.
7. Хантингтон Г. Упругие постоянные кристаллов // УФН –1961. –Т. LXXIV, вып. 2. – С. 303-352.
8. Хачин В.Н., Муслов С.А., Пушин В.Г., Кондратьев В.В. Особые упругие свойства В2-соединений титана с нестабильной решеткой // Металлофизика и новейшие технологии. – 1988. – Т. 10. – № 1. – С. 102-104.
9. R.N. Thurston and K. Brugger. Third-Order Elastic Constants and the Velocity of Small Amplitude Elastic Waves in Homogeneously Stressed Media. Phys. Rev., 133, A1604 (1964).
10. Zung-Ping Chang. Third-Order Elastic Constants of NaCl and KCl Single Crystals. Physical Review, 1965 vol. 140, Issue 5A, pp. 1788-1799.