

НИИ МЕДИЦИНСКИХ МАТЕРИАЛОВ И ИМПЛАНТАТОВ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ
Сибирского физико-технического института при Томском государственном университете

МАТЕРИАЛЫ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ И НОВЫЕ МЕДИЦИНСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

*Под редакцией
заслуженного деятеля науки РФ, профессора
Виктора Эдуардовича Гюнтера*



Томск
2010

инактивации жизненноважных белковых структур внутри клетки и их гибели. Полученные данные показывают, что воздействие инфракрасными и ультрафиолетовыми спектрами электромагнитных волн на пористо-проницаемые инкубаторы из никелида титана создают слабый тепловой фон в изо-термической системе инкубатора, улучшая жизнеспособность клеточной популяции внутри инкубатора.

Увеличение цитостатического действия УФ-излучения с помощью мелкогранулированного никелида титана может найти применение в онкологии для уничтожения остаточных опухолевых метастазов или других патологических клеточных популяций. Эффект усиления пролиферативной активности клеток внутри порового пространства инкубаторов из никелида титана при облучении может также найти применение в тканевой инженерии различных органов.

Литература

1. Гюнтер В.Э., Ходоренко В.Н., Ясенчук Ю.Ф. и др. Никелид титана. Медицинский материал нового поколения. Томск: Изд-во МИЦ, 2006. 296 с.
2. Дыкман Л.А., Богатырев В.А., Щёголев С.Ю., Хлебцов Н.Г. Золотые наночастицы: синтез, свойства, биомедицинское применение. М.: Наука, 2008. 319 с.
3. Загайнова Е.В., Ширманова М.В., Каменский В.А. и др. Исследование контрастирующих свойств золотых наночастиц для метода ОКТ // Российские нанотехнологии. 2007. Т. 2. № 7–8. С. 135–143.
4. Кокорев О.В., Гюнтер С.В., Ходоренко В.Н. Реакция опухолевых клеток аденокарциномы Эрлиха на электромагнитное излучение в диапазоне 200–1000 нм // Имплантаты с памятью формы. - Томск: Изд-во «НПП МИЦ», 2009. № 1-2. С. 22–26.
5. Руководство по оптической когерентной томографии / Под ред. Н.Д. Гладковой, Н.М. Шаховой, А.М. Сергеева. М.: Физматлит; Медкнига, 2007. 296 с.
6. Hirsch L., Stafford R. J., Bankson J. A. et al. Nanoshell-mediated near-infrared thermal therapy of tumors under magnetic resonance guidance // Proc. Natl. Acad. Sci. 2003. Vol. 23. P. 13549–13554.
7. Huang X., Jain P.K., El-Sayed I.H., El-Sayed M.A. Plasmonic photothermal therapy (PPTT) using gold nanoparticles // Lasers Med. Sci. 2008. Vol. 23. P. 217–228.
8. Khlebtsov B.N., Zharov V.P., Melnikov A.G., Tuchin V.V., Khlebtsov N.G. Optimization of light-absorbing nanostructures for photothermal therapy of cancer cells // Nanotechnology. 2006. Vol. 17. P. 5267–5279.
9. Niemeyer C.M., Mirkin C.A. Nanobiotechnology: Concepts, Applications, and Perspectives. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
10. Pitsillides C.M., Joe E.K., Wei X., Anderson R.R., Lin C.P. Selective cell targeting with light-absorbing microparticles and nanoparticles // Biophys J. 2003. Vol. 84. P. 4023–4032.
11. Sarah L. Westcott, Steven J. Oldenburg, T. Randall Lee, Naomi J. Halas. Formation and Adsorption of Clusters of Gold Nanoparticles onto Functionalized Silica Nanoparticle Surfaces // Langmuir. 1998. Vol. 14. P. 5396–5401.
12. Troutman T.S., Barton J. K., Romanowski M. Optical coherence tomography with Plasmon resonant nanorods of gold // OPTICS LETTERS. 2007. Vol. 32. № 11. P. 1438–1440.
13. W. H. De Jong, W. I. Hagens, P. Krystek, M. C. Burger, A. J.A.M. Sips, R. E. Geertsma. Particle size-dependent organ distribution of gold nanoparticles after intravenous administration // Biomaterials. 2008. Vol. 29. P. 1912–1919.
14. X. Huang, I. H. El-Sayed, W. Qian, and M. A. El-Sayed. Cancer cell imaging and photothermal therapy in the near-infrared region by using nanorods // J. Am. Chem. Soc. 2006. Vol. 128. P. 2115–2120.
15. Zharov V.P., Galitovsky V., Viegas M. Photothermal detection of local thermal effects during selective nanophotothermolysis // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 83. P. 4897–4899.

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА УСТОЙЧИВОСТЬ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

А.И. Потекаев, В.В. Кулагина, А.А. Клопотов, В.Э.Гюнтер

Рассмотрено влияние точечных дефектов и их комплексов, а также дефектов упаковки на мартенситное превращение в металлических системах, находящихся вблизи границы своей стабильности. Существенно, что рассматривается взаимодействие низкоэнергетических точечных и планарных дефектов и их комплексов. Исследовано влияние комплексов точечных дефектов на мартенситные фазовые превращения в ОЦК-системе с низкими модулями упругости.

1. Введение. Сплавы на основе никелида титана относятся к материалам нового поколения, обладающим необычными функциональными свойствами, а именно эффектами памяти формы (ЭПФ). Материалы с этими новыми функциональными свойствами находят в настоящее время широкое применение в медицине [1]. Поэтому не удивительно то пристальное внимание, которое уделяется изучению сплавов с ЭПФ. Наличие ЭПФ обусловлено протекающими в этих сплавах термоупругих мартенситных превращений (МП). Важным этапом при исследовании структурно-фазовых состояний в сплавах с термоупругими МП являлось осознание того факта, что аномалии в поведении структурных

и физико-механических свойств при температурном и деформационном воздействиях обусловлены предпереходными (предмартенситными) состояниями кристаллической решетки накануне МП [2]. Исследование причин возникающих аномалий позволяет получить важную информацию о физической природе и микроскопическом механизме подготовки кристаллической структуры к предстоящему МП.

В свете вышесказанного целью данной работы является изучение роли структурных дефектов на зарождение мартенситной фазы в предмартенситной области, накануне МП системы Ti–Ni в области эквиатомного состава. В работе методом компьютерного моделирования исследуется влияние дефектов кристаллической структуры на мартенситные превращения в ОЦК-системах с низкими модулями упругости.

С точки зрения влияния дефектов структуры на МП последние можно условно разделить на две группы: превращения существенно первого рода и не явно выраженные превращения первого рода [1]. В данной работе интерес представляют, прежде всего, сплавы, принадлежащие ко второй группе. К ним относятся сплавы на основе благородных металлов, на основе TiNi и другие. Зарождение мартенситной фазы в данных сплавах происходит на сложных дефектах структуры, таких, как границы зерен, межфазовые границы, свободная поверхность и т.д. Подобные дефекты, являясь локальными концентраторами напряжений, понижают активационный барьер зарождения мартенситной фазы. В

материалах этой группы предпереходные аномалии наиболее выражены. Это проявляется в аномальном поведении электросопротивления, коэффициента внутреннего трения, размягчении модулей сдвига, появлении провалов на кривых дисперсии фононов при характерных значениях волнового вектора; наблюдается диффузное рассеяние и экстрарефлексы на рентгено- и электронограммах, происходит перестройка электронного спектра [3–4].

В литературе показано [2], что важную роль в зарождении мартенситной фазы могут играть простые дефекты кристаллической структуры (дислокации, дефекты упаковки, комплексы точечных дефектов) и их взаимодействие с мягкими фононными модами. Дефекты могут быть центрами зарождения или закрепления возникающих областей с ближним порядком смещений атомов и промежуточных структур сдвига.

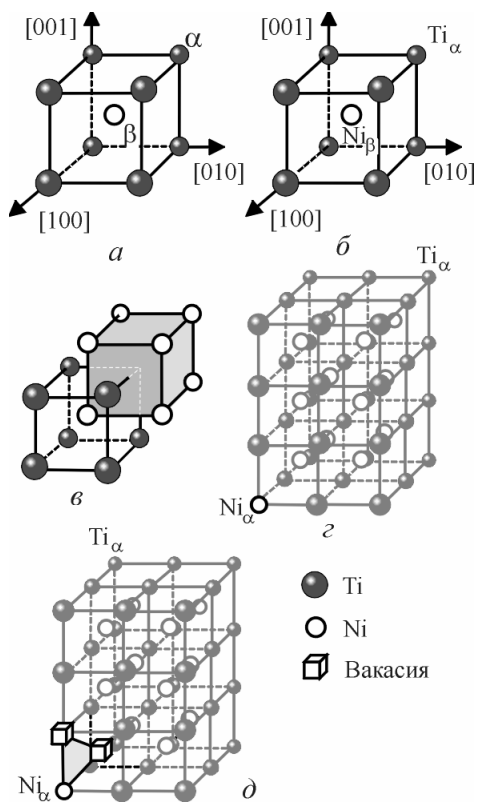


Рис. 1. Элементарная ячейка фазы структуры B2 с выделенными α и β -узлами (а). В фазе TiNi с B2 структурой (б): в α -узлах располагаются атомы Ti, в β -узлах атомы Ni. Две элементарные ячейки простой кубической решетки, вставленные друг в друга (в). Блок из 12 элементарных ячеек структуры B2 с антиструктурным дефектом Ni_{α} (г) и трипл-дефектом (д)

2. Параметр порядка, дефекты и кристаллическая структура B2.

Решетка структуры B2 простая кубическая (точечная группа O_h , пространственная группа O_h^1). В структуре B2 (рис. 1, а) одна из подрешеток ($i=1$), составленная из узлов типа α с координатой (000), занята атомами сорта А, вторая подрешетка: ($i=2$) из узлов типа β с координатой $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ замещается атомами сорта В. В том случае, когда атомы Ni и Ti находятся на «чужих» подрешетках, такие дефекты называют антиструктурными. Вторая группа решеточных дефектов образуются, когда только атомы В попадают в узлы подрешетки α . Такой тип дефектов называют трипл-дефектами. Для стехиометрического состава существует одновременно три типа дефектов: две вакансии в B2 подрешетке и один атом В в узле α подрешетки (рис. 1, д).

Кристаллическую решетку упорядоченного твердого раствора представляют в виде нескольких подрешеток, каждая из которых занята атомами определенного сорта

[6]. Структуру B2 можно представить в виде двух вложенных друг в друга простых кубических решеток, у которых атомы разного сорта А и В могут чисто геометрически занимать одинаково эквивалентные позиции (рис. 1, в). Для описания распределения атомов по узлам кристаллической решетки

упорядоченного сплава используем параметр дальнего порядка (η) по Горскому-Брэггу-Вильямсу [6]. Степень атомного дальнего порядка в упорядоченных сплавах описывается при помощи вероятности замещения узлов, принадлежащих различным подрешеткам разного сорта:

$$\eta = \frac{P_i^A - C_A}{1 - \nu},$$

где C_A - концентрация атомов сорта А, P_i^A - вероятность найти в узле i -го типа атом сорта А, ν - доля узлов (концентрация) сорта i -го типа. В полностью неупорядоченном сплаве узлы кристаллической решетки неразличимы, вероятность обнаружить в каком-либо из них атом сорта А равна концентрации C_A и $\eta=0$. В полностью упорядоченном сплаве стехиометрического состава $C_A = \nu$ и $P_i^A = 1$, тогда $\eta=1$. При частичном упорядочении $0 < \eta < 1$.

Для фазы TiNi со сверхструктурой B2 стехиометрического состава $C_A = 0,5$, $\nu = 0,5$ и $P_i^A = 1$. По мере разупорядочения сплава P_i^A уменьшается и концентрация antisite-дефектов растет и становится равной $1 - P_i^A$. Вероятность их образования зависит от избыточной энергии (ΔE) их формирования:

$$\Delta E^{Ni} = E_{\beta}^{Ni} - E_{\alpha}^{Ni} \quad \text{и} \quad \Delta E^{Ti} = E_{\beta}^{Ti} - E_{\alpha}^{Ti}.$$

При попадании в «чужой» узел атома другого сорта у этого атома изменяется его окружение и число «правильных» парных связей (изменяется и число «неправильных»). На рис. 1, а, б в структуре B2 все атомы находятся в правильных позициях. Координационное число на первой координационной сфере $Z_1=8$. У атомов Ni, расположенных в β -узлах, все 8 соседей – это атомы Ti, и у атомов Ti, расположенных в α -узлах также 8 соседей, но только это атомы Ni. Соответственно у атомов Ni восемь связей Ni–Ti (рис. 1, в). Связей Ni–Ni или Ti–Ti на первой координационной сфере при полном порядке нет. При образовании антиструктурных дефектов парные связи Ni–Ti частично меняются на Ni–Ni, т.е. появляются «неправильные» связи. На рис. 1, г расположение атомов почти такое же как на рис. 1, б, за исключением того, что атом Ni находится в α -узле с координатой (100). Образование антиструктурного дефекта должно привести к понижению степени порядка и как следствие к изменению температуры начала МП.

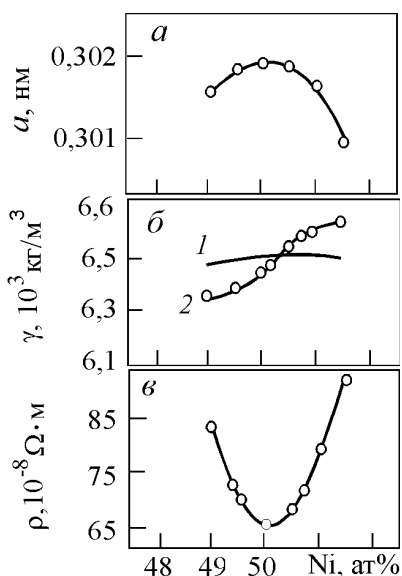


Рис. 2. Концентрационные зависимости: а – параметра решетки; б – плотности (1 – теоретическая кривая, 2 – экспериментальная); в – электросопротивления [1]

О влиянии точечных дефектов на мартенситные превращения свидетельствует существенная зависимость характеристик мартенситных превращений от концентрации легирующего элемента и термомеханической обработки.

Различная роль двух подрешеток в образовании вакансий сказывается в кинетике и морфологии образования частиц с фазами Ti_2Ni и $TiNi_3$ в матричной фазе TiNi и, как следствие, определяет основные характеристики мартенситных превращений и физико-механические свойства сплавов на основе TiNi.

Другим важным моментом оказывается не только присутствие, но и распределение дефектов в высокотемпературной матрице. Известно, что в сплавах Ti–Ni, обогащенных никелем, в зависимости от термообработки меняется последовательность превращений от $B2 \rightarrow B19'$ в закаленных сплавах к $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$ в отожженных. Предполагается, что этот факт связан с появлением полей упругих напряжений ромбоэдрического характера при выделении частиц Ni_4Ti_3 или с упорядочением избыточных атомов никеля по узлам подрешетки титана в отожженных сплавах [7].

3. Экспериментальные результаты. В сплавах на основе никелида титана имеется большое количество точечных дефектов, связанных с отклонением от стехиометрического состава или с температурным разупорядочением. Наличие точечных дефектов хорошо проявляется в бинарных сплавах TiNi в области эквиатомного состава на поведении структурных и физических параметров в зависимости от концентрации. В TiNi установлено,

что в сплаве стехиометрического состава значения параметра решетки имеет максимальное значение, электросопротивление обладает минимальной величиной, а плотность монотонно зависит от концентрации (рис. 2). Немонотонный характер изменения структурных и физических параметров в области эквиатомного состава несомненно, отражает не только наличие точечных дефектов в кристалличе-

ской решетке, но разный вклад вакансий и антиструктурных дефектов в зависимости от направления отклонения от стехиометрического состава [1].

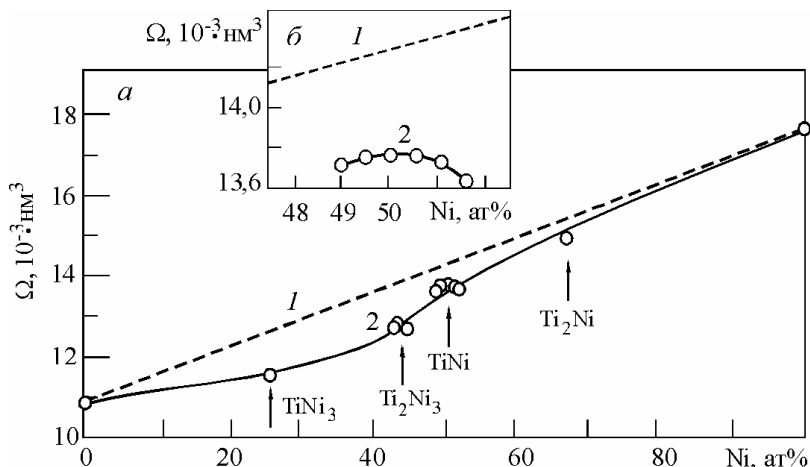


Рис. 3. Концентрационные зависимости атомного объема в соединениях системы Ti-Ni (a). (b – $\Omega=f(\text{at\%Ni})$ в области эквиатомного состава; 1 – теоретически рассчитанное Ω по закону Зена [2]; 2 – атомный объем, рассчитанный из экспериментальных значений параметров элементарных ячеек соединений в системе TiNi)

тивления, плотности, параметров решетки и атомного объема (рис. 2, 3), действительно можно сделать вывод о существенной концентрации вакансий в сплавах TiNi при отклонении их составов от стехиометрического.

4. Результаты теоретических расчетов

4.1. Расчет потенциалов межатомного взаимодействия [1]

Во всех кристаллических телах существует межатомное притяжение, которое приводит к образованию межатомных связей. Поскольку межатомные силы ответственны за энергию системы, то рас-

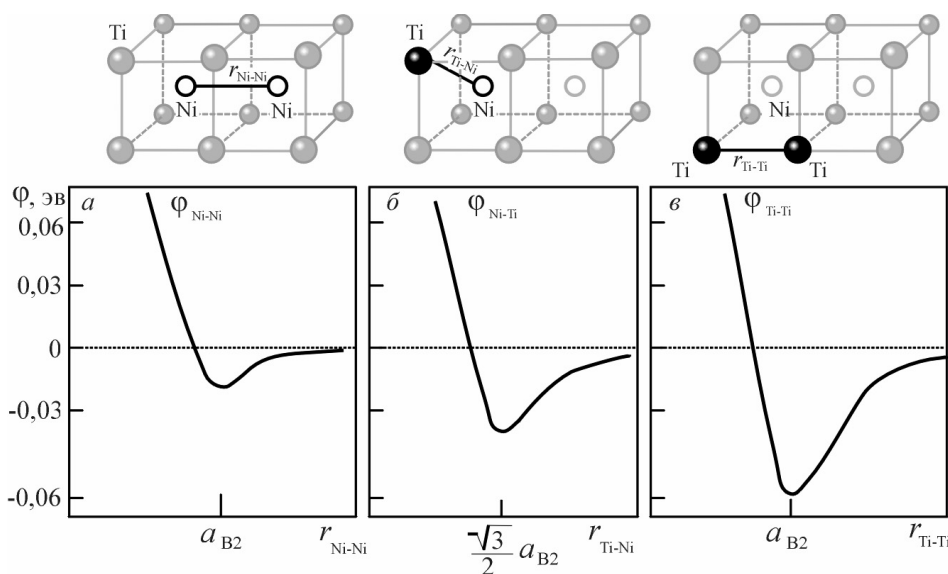


Рис. 4. Кривые потенциала межатомного взаимодействия: a – между одноименными атомами Ni-Ni; б – между разноименными атомами Ni-Ti; в – между Ti-Ti

чет потенциалов межатомного взаимодействия между одноименными атомами (Ni-Ni и Ti-Ti) и разноименными (Ni-Ti) позволяет оценить расположение атомов по узлам кристаллической решетки.

Несомненно, интересным является обнаруженное заметное отклонение экспериментальных значений атомных объемов сплавов при отклонении от стехиометрического состава в области соединения TiNi (рис. 3). При этом наблюдается значительное несоответствие теоретических и экспериментальных значений атомных объемов, и оно связано с явлением сверхструктурного сжатия, которое происходит при образовании интерметаллических соединений с высокими значениями дальнего порядка [2]. Нелинейное изменение атомного объема в области эквиатомного состава обусловлено отклонением от стехиометрического.

Сопоставив эти данные с измерениями удельного электросо-

Согласно данным о волновых функциях атомов Ti и Ni из расчетов вытекает, что взаимодействие атомов титана в соединении TiNi является более дальнедействующим, чем взаимодействия атомов никеля. Это согласуется с данными о том, что волновые функции атомов Ti более размыты, чем у атомов Ni. Расчет потенциалов межатомного взаимодействия в соединении TiNi ($\varphi_{NiNi}(r) > \varphi_{NiTi}(r) > \varphi_{TiTi}(r)$), сделанный в рамках псевдопотенциальной теории [1], показал, что потенциал взаимодействия $\varphi_{TiTi}(r)$ имеет глубокий минимум между первой и второй координационными сферами (рис. 4). Небольшой минимум в этой области наблюдается на кривой парного потенциала $\varphi_{NiNi}(r)$. Такое поведение потенциалов приводит к тому, что энергия образования вакансии в узлах подрешетки атомов никеля на 0,16 эВ меньше, чем в узлах подрешетки атомов титана, что обуславливает более высокую концентрацию вакансий на никелевой подрешетке. Из вида кривых парных потенциалов взаимодействия следует, что энергия атома никеля, находящегося в узле своей подрешетки, больше, чем энергия этого атома, помещенного в узел титановой подрешетки. Атому никеля энергетически выгоднее находиться в узле подрешетки титана, в то же время атому титана выгодно быть в узле своей подрешетки, поэтому можно ожидать, что вакансии должны образовываться преимущественно на никелевой подрешетке в соединении TiNi.

Полученные экспериментальные данные по измерениям удельного электросопротивления, плотности, параметров решетки и теоретические оценки позволяют сделать вывод о преимущественном расположении вакансий на подрешетке никеля в структуре B2. То есть при увеличении концентрации титана возрастает концентрация вакансий на никелевой подрешетке, а при увеличении концентрации никеля - концентрация атомов никеля на подрешетке титана.

4.2. Модифицированный метод молекулярной динамики Паринелло–Рахмана [2]

Несмотря на то, что к настоящему времени предложен ряд моделей зарождения мартенситной фазы (например, модель Ямада [8]), которые позволяют объяснить многие аспекты микроскопического механизма МП, ни одна из них не может в деталях описать пути реакции превращения и механизм наследования дефектов высокотемпературной структуры мартенситной фазой.

В нашей работе предпринята попытка решить эти задачи при помощи метода компьютерного моделирования.

Для этого энергия системы представлялась в виде суммы парной и объемных составляющих:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) + u(\Omega),$$

где $u(\Omega)$ – часть энергии, зависящая только от атомного объема Ω ; $\varphi(r_{ij})$ – потенциал парного межатомного взаимодействия. Для двухкомпонентного сплава

$$\varphi(r_{ij}) = P_i^A P_j^A \varphi_{AA}(r_{ij}) + P_i^B P_j^B \varphi_{BB}(r_{ij}) + (P_i^A P_j^B + P_i^B P_j^A) \varphi_{AB}(r_{ij}),$$

где P_i^A , P_j^A , P_i^B , P_j^B – числа заполнения атомами сорта А или В узлов i или j .

Для определения параметров потенциалов φ_{AA} , φ_{BB} и φ_{AB} использовалась схема [9], адаптированная к упорядоченному сплаву.

Были рассмотрены различные типы дефектов, включая те, которые, согласно экспериментальным данным, не могут быть реализованы в бинарных сплавах на основе никелида титана: 1) антиструктурный атом Ni на подрешетке Ti (рис. 5, a); 2) дефект, вызванный разупорядочением и получаемый перестановкой атомов Ti и Ni на первой координационной сфере (рис. 5, b); 3) антиструктурный атом Ni и дефект порядка, образующие линейную цепочку вдоль направления $\langle 111 \rangle$ (рис. 5, c); 4) избыточный атом Ni и дефект порядка, расположенные в плоскости $\{110\}$ (рис. 5, d).

Установлено, что при упорядочении антиструктурных атомов никеля по узлам подрешетки титана структура B2 остается устойчивой. В случаях 2–4 поля смещений вблизи дефектов утрачивают кубическую симметрию, их взаимодействие между собой способствует нестабильности B2-решетки и образованию через цепочку превращений гексагонального мартенсита. С указанными типами дефектов получается одна и та же конечная структура, если не учитывать тонкую структуру дефектов. Она представляет собой гексагональную слоистую упорядоченную фазу из чередующихся плоскостей, содержащих атомы одного сорта. Слои расположены перпендикулярно оси c , ориентированной вдоль направления $\langle 111 \rangle$ B2-решетки, а оси a и b параллельны $\langle \bar{1}12 \rangle$ и $\langle \bar{1}2\bar{1} \rangle$. Из рис. 6 видно, что плоскости $\{111\}$ ОЦК-решетки смещаются в направлении $\langle 111 \rangle$ подобно тому, как это происходит при образовании ω -фазы. По мере достижения системой равновесного состояния был зафиксирован

локальный минимум, которому соответствует образование промежуточной структуры. Базисная ячейка промежуточной структуры содержит 18 атомов. Ось c направлена вдоль $\langle 111 \rangle$ и равна $a\sqrt{3}$ (a - постоянная решетки), оси a и b , равные $a\sqrt{6}$, направлены соответственно вдоль направлений $\langle \bar{1}1\bar{2} \rangle$ и $\langle \bar{1}2\bar{1} \rangle$ смещений, и граничные условия не препятствуют передаче мартенситного сдвига от одной ячейки к другой. При невыполнении этих условий структурный переход не наблюдался.

Таким образом, в системах с низкими значениями модулей упругости вокруг точечных дефектов возникают дальнедействующие поля смещений, поэтому даже при их малой концентрации дефекты оказываются взаимодействующими между собой. В этом случае они не могут рассматриваться как изолированные. Возникающие статические поля смещений могут как стабилизировать $B2$ -структуру, так и способствовать ее неустойчивости и мартенситному фазовому переходу. В рассмотренной модели при наличии определенного типа дефектов в $B2$ -структуре последняя оказалась неустойчива к сдвигам плоскостей типа $\{111\}$ вдоль направления типа $\langle 111 \rangle$.

Превращение материала с точечными дефектами и их комплексами приводит к разрушению порядка в расположении атомов, поэтому мартенситная фаза запасает дополнительную химическую энергию. Следовательно, в решетке появляются энергетические причины для обратного мартенситного превращения с определенной ориентацией пути превращения. При реакции “точно назад” происходит полное восстановление исходной структуры с низкой энергией. Изменение числа дефектов при мартенситном переходе приводит к накоплению дефектами энергии, связанной с химическим вкладом в термодинамический потенциал, так как меняется число пар атомов различного типа на первых координационных сферах.

На превращение в гексагональную структуру кроме типа введенного дефекта существенное влияние оказывают граничные условия. Переход в фазу с гексагональной симметрией становится возможным, если расчетная ячейка кратна $3n \times 3n \times 3n$, где n - целое. В этом случае в направлении $\langle 111 \rangle$ укладывается целое число модулирующих волн.

Полученные результаты модельного эксперимента показывают, что при мартенситном превращении из $B2$ -фазы в ω -подобную структуру образуются высокоэнергетические линейные цепочки точечных дефектов в направлении $\langle 111 \rangle_{B2}$, что в ряде случаев приводит к увеличению их количества в мартенситной фазе. Этот факт может играть существенную роль в определении обратного пути мартенситного превращения.

Необходимо отметить, что именно применение нетрадиционного метода молекулярной динамики Паринелло–Рахмана, в котором параметры моделируемого блока являются свободными переменными

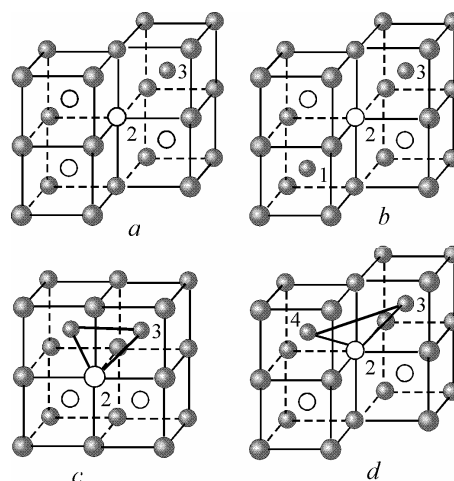


Рис. 5. Типы дефектов

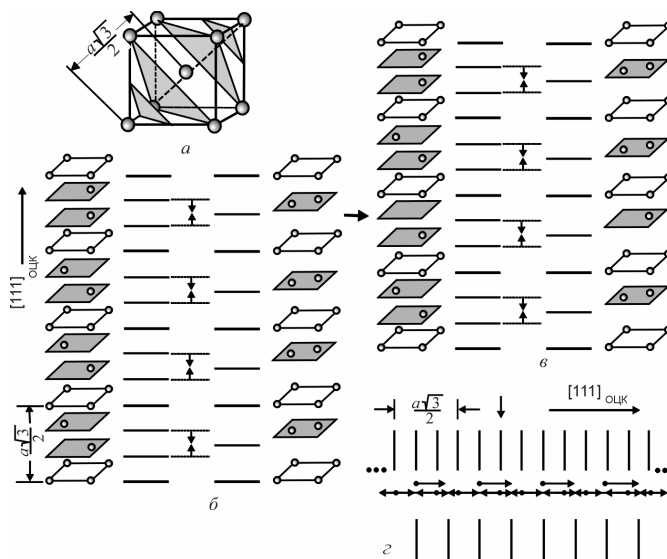


Рис. 6. Элементарная ячейка ОЦК решетки с выделенными плоскостями типа $\{111\}$ (а). Схема смещений атомных рядов $\{111\}$ при образовании ω -подобной структуры без дефекта в решетке (б) и с дефектом (в). Горизонтальными линиями показаны положения плоскостей $\{111\}$ до (левая часть схемы) и после перехода $A1-\omega$ (правая часть схемы). Упрощенная схема смещений атомных рядов $\{111\}$ при образовании ω -подобной структуры, а вертикальными линиями показаны положения плоскостей $\{111\}$ до (вверху) и после (внизу) перехода (г)

ми, позволило изучить мартенситные превращения, которые для своей реализации требуют как изменения объема, так и изменения формы моделируемого блока.

5. Заключение

В системах с низкими модулями упругости перед превращением имеют место значительные статические смещения атомов из узлов кристаллической решетки. Вследствие этого даже при малой концентрации дефекты взаимодействуют между собой. На реализацию структурного превращения оказывают влияние концентрация, тип и симметрия дефектов. Дефекты, нарушающие симметрию исходной структуры, могут способствовать ее неустойчивости и мартенситному превращению. Дефекты, вызывающие значительные смещения в плоскостях $\{110\}$, инициируют мартенситный ОЦК→ГЦК-переход, который представляет собой перетасовочные сдвиги плоскостей $\{1\bar{1}0\}$ в направлении $\langle 110 \rangle$, одновременно сопровождающиеся бейновской деформацией решетки. В конечной структуре смещения атомов в окрестности дефекта локализованы. Поля атомных смещений в окрестности дефектов, не лежащих в плоскостях типа $\{110\}$, препятствуют перетасовочным сдвигам плоскостей $\{1\bar{1}0\}$ в направлении $\langle 110 \rangle$ и реализации мартенситного превращения ОЦК→ГЦК по этому механизму. В данном случае не исключен другой вариант развития мартенситного превращения. Так, взаимодействие дефектов, расположенных в плоскостях $\{111\}$, приводит к возникновению длинно-периодической ω -подобной структуры, которая образуется путем перетасовочных смещений атомных рядов $\langle 111 \rangle$. Таким образом, в предмартенситном состоянии, когда система находится на границе своей стабильности, взаимодействие полей атомных смещений, возникающих в окрестности дефектов, может оказать влияние на выбор возможного пути мартенситного перехода.

Точечные дефекты, вызванные отклонением от стехиометрии, и нарушением дальнего порядка в расположении атомов, могут влиять на устойчивость $B2$ -структуры и способствовать превращению мартенситного типа в ω -подобную структуру. При этом образуются высокоэнергетические цепочки точечных дефектов в направлении $\langle 111 \rangle$, что приводит к увеличению количества точечных дефектов в мартенситной фазе. Последнее может иметь существенную роль в определении обратного пути мартенситного перехода.

Литература

1. Гюнтер В.Э., Ходоренко В.Н., Ясенчук Ю.Ф. и др. Никелид титана. Медицинский материал нового поколения. Томск: МИЦ, 2006. 296 с.
2. Потеев А.И., Клопов А.А., Козлов Э.В. и др. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана. Томск: НТЛ, 2004. 296 с.
3. Mercier O., Melton N., Gremafud G., Hagi J. Single-crystal elastic constants of the equiatomic NiTi alloy near the martensitic transformations // J. Appl. Phys. 1980. Vol. 51. № 3. P. 1833-1834.
4. Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н. Предпереходные явления и мартенситные превращения. Екатеринбург: АН УРО, 1998. 320 с.
5. Андерсон Дж.С. Термодинамика и теория нестехиометрических соединений // Проблемы нестехиометрии. М.: Металлургия. 1975. С. 11-96.
6. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А. Теория упорядочивающихся сплавов. М.: МФ., 1958. 388 с.
7. Fan G., Chen W., Yang S. and al. Origin of abnormal multi-stage martensitic transformation behavior in aged Ni-rich Ti Ni shape memory alloys // Acta Met. 2004. V.52. P. 4351-4362.
8. Yamada Y. Modulated lattice relaxation in P-based premartensitic phase // Met. Trans. A. 1988. Vol.19, № 4. P. 777-783.
9. Maeda K. Vitek V., Sutton A.P. Interatomic potentials for atomic studies of defects in binary alloy // Acta Met. 1982. Vol. 30, № 1. P. 2001-2010.

ОСОБЕННОСТИ ДЕМПФИРОВАНИЯ НИКЕЛИДА ТИТАНА ПРИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ

Т.Л. Чекалкин, В.Э. Гюнтер

Мартенситные фазовые переходы в термодинамическом отношении необратимы, так как сопровождаются диссипацией энергии и производством энтропии. В этом смысле знакопеременная деформация в сплавах, проявляющих мартенситные превращения и эффекты памяти формы, как при низких частотах и больших степенях деформации (большой амплитудой деформации), так и при высоких частотах с малой амплитудой деформации сопровождается особенной взаимосвязью демпфирующих потерь и внутреннего трения со свойствами сплавов, в особенности с эффектами памяти формы и сверхэластичности [1].