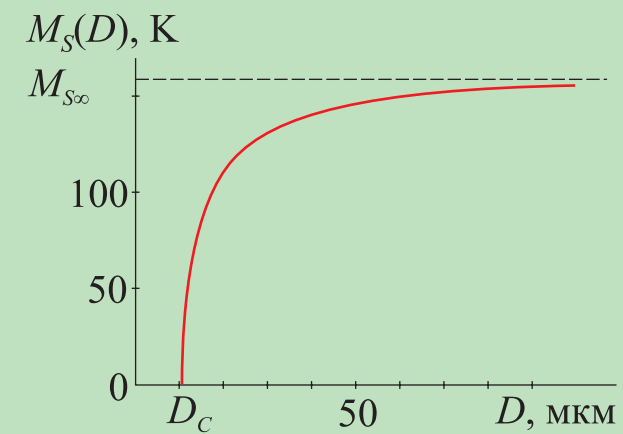


М. П. Кащенко, В. Г. Чащина

**ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ  
 $\gamma$ - $\alpha$  МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ  
В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА  
И РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ  
КРИТИЧЕСКОГО РАЗМЕРА ЗЕРНА**



ISBN 978-5-93972-841-6



**М. П. Кащенко, В. Г. Чашина**

**ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ  
 $\gamma$ - $\alpha$  МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ  
В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА  
И РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ  
КРИТИЧЕСКОГО РАЗМЕРА ЗЕРНА**



Москва – Ижевск  
2010

УДК 34.2  
ББК 669.017  
К 317

**Кащенко М. П., Чащина В. Г.**

Динамическая теория  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна. – М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. – 132 с.

На основе оригинальных исследований стадий зарождения и роста мартенсита в рамках динамической теории температура начала превращения  $M_s$  рассматривается как наиболее оптимальная для процесса генерации волн, управляющих ростом мартенситных кристаллов. Представление о возникновении начального возбужденного состояния в упругом поле отдельной дислокации приводит к соотношению пространственных масштабов: ожидаемая толщина мартенситной пластины порядка сотой доли от среднего междислокационного расстояния (в частности, от диаметра зерна). С помощью соотношения неопределенностей для энергии и времени появление на начальной стадии неоднородности динамической природы с характерным пространственным масштабом легко учитывается в энергетическом «размытии» распределения электронов, важном для расширения интервала энергий вблизи энергии Ферми, заселяемом электронами, активными в генерации волн при наличии в межфазной области градиента химического потенциала. Получены зависимость температуры  $M_s$  от размера зерна и формула для критического размера зерна как функции значимых физических параметров. Предложен алгоритм оценки доли мартенсита при атермической макрокинетике. Показано, что магнитное поле может снижать критический размер зерна, снимая стабилизацию аустенита и повышая  $M_s$ .

Самостоятельный интерес представляет качественное обсуждение в заключительной главе монографии возможностей протекания бездиффузионной перестройки в нанокристаллическом состоянии.

Для научных сотрудников и специалистов в области металловедения и физики металлов и сплавов, а также преподавателей, аспирантов и студентов, специализирующихся в области материаловедения.

**ISBN 978-5-93972-841-6**

**ББК 669.017**

© М. П. Кащенко, В. Г. Чащина, 2010

<http://shop.rcd.ru>

<http://ics.org.ru>

---

---

## Оглавление

Список сокращений.....	6
Предисловие.....	7
Глава 1. Введение .....	9
1.1. Мягко- и жесткомодовые реализации мартенситных превращений .....	9
1.2. Основные положения волновой модели роста мартенситного кристалла при реконструктивных превращениях.....	10
Глава 2. Пространственные, временные и энергетические масштабы, характеризующие процесс зарождения мартенситного кристалла.....	15
2.1. Диапазоны значений $r$ и $d$ .....	15
2.2. Оценки нижних границ размеров зерна, еще совместимых с формированием кристаллов мартенсита.....	20
2.3. Время образования зародыша (начального возбужденного состояния), способного к быстрому росту.....	23
2.4. Энергетические масштабы, характеризующие процесс зарождения мартенситного кристалла.....	24
Глава 3. Зависимость температуры $M_s$ от диаметра зерна. <b>Качественные трактовки</b> .....	26
3.1. Трактовки, базирующиеся на термодинамических соотношениях.....	26
3.2. Сценарии эстафетного превращения зерен с позиций волновой теории роста мартенсита .....	30
3.3. Пример обработки экспериментальных данных с помощью зависимостей, включающих критический размер зерна.....	34

3.4.	Интерпретация зависимости $M_S(D) \sim (1 - \sqrt{D_c/D})$ при учете поля дислокационного скопления и предварительное обсуждение результатов .....	36
3.5.	Интерпретация зависимости $M_S(D) \sim (1 - \sqrt{D_c/D})$ с позиций динамической теории и выводы относительно специфики механизма зарождения в зерне поликристалла .....	39
3.6.	Дополнительная экспериментальная информация, существенная для постановки задачи .....	44
<b>Глава 4. Зависимость температуры, оптимальной для генерации управляющих волн неравновесными электронами, от диаметра зерна.....</b>		<b>48</b>
4.1.	Постановка задачи о генерации волн смещений неравновесными электронами.....	49
4.2.	Область согласованного изменения температуры и состава сплавов, благоприятная для поддержания высокого уровня $\sigma_0$ .....	51
4.3.	Пример параболической аппроксимации отображения зависимости $M_S(C)$ на плоскость переменных $(\Gamma', T')$ .....	57
4.4.	Явный вид зависимости вклада $\Gamma(D)$ в затухание s-электронов.....	59
4.5.	Зависимость оптимальной температуры генерации от размера зерна. Критический размер зерна.....	60
4.6.	Вклад $\Gamma(d_{tw})$ , обусловленный дополнительным масштабом $d_{tw}$ , характерным для двойникованных кристаллов.....	65
<b>Глава 5. Обработка экспериментальных данных для критического размера зерна <math>D_c</math>.....</b>		<b>67</b>
5.1.	Зависимость $D_c$ от состава при аппроксимации $1 - \Gamma' = 4T'^2$ .....	67
5.2.	Сравнение с экспериментальными данными по влиянию химического состава на величину $D_c$ .....	71
5.3.	Факторы, отражающие структурную чувствительность $D_c$ .....	74
5.4.	Оптимальная температура генерации при аппроксимации $1 - \Gamma' = B(T')^P$ для низкотемпературного участка ветви $\tilde{M}_S^{IV}$ .....	76
5.5.	Обсуждение результатов.....	78
5.5.1.	Предварительные итоги.....	78
5.5.2.	Учет влияния изменения температурных вкладов в затухание электронов.....	78
5.5.3.	Оценка различия параметров $D_{cp}$ и $D_c$ .....	79

---

5.5.4. О возможном влиянии состояния границ зерен на результаты интегральной методики регистрации превратившегося объема.....	80
5.6. Краткое резюме о температуре $M_s$ и критическом размере зерна	82
<b>Глава 6. Расчет доли мартенсита при атермической макрокинетике.....</b>	<b>83</b>
6.1. Особенности атермической макрокинетике.....	83
6.2. Методика проведения расчетов на примере плоской симметричной модели сопряжения кристаллов.....	86
6.3. Результаты расчетов долей мартенсита для плоской и трехмерной моделей.....	89
6.4. Оценки температуры $M_f$ .....	92
6.5. Изменения температуры $M_s$ и критического размера $D_c$ , связанные с увеличением параметра $ \epsilon_d - \mu $ в сильном магнитном поле.....	93
6.6. Заключительные замечания к главе 6.....	95
<b>Глава 7. Аккомодационное мартенситное превращение в нанокристаллическом состоянии.....</b>	<b>101</b>
<b>Заключение.....</b>	<b>110</b>
<b>Литература.....</b>	<b>118</b>

---

---

## Список сокращений

ГЦК	гранецентрированная кубическая
ОЦК	объемно центрированная кубическая
ОЦТ	объемно центрированная тетрагональная
ГПУ	гексагональная плотно упакованная
МП	мартенситное превращение
УВП	управляющий волновой процесс
ГП	габитусная плоскость
ДЦЗ	дислокационный центр зарождения
ДО	деформация-отжиг
ЗР	закалка из расплава
ИНЭС	инверсно населенные электронные состояния

---

---

## Предисловие

Говоря о динамической теории, мы имеем в виду, прежде всего, подход, разработанный ранее применительно к описанию возникновения и распространения носителей пороговой деформации, инициирующей  $\gamma$ - $\alpha$  (ГЦК-ОЦК или ОЦТ) мартенситное превращение (МП) в сплавах на основе железа [1 – 3]. К настоящему времени достигнут существенный прогресс как в дальнейшей интерпретации особенностей  $\gamma$ - $\alpha$  МП (список ряда работ авторов содержится в эпилоге монографии [4]), связанных с носителями пороговой деформации, так и при построении динамической теории формирования кристаллов мартенсита, включающей описание финишных деформаций, превышающих пороговые на два-три порядка [5]. Впервые переход к финишным деформациям в рамках динамического подхода удалось реализовать для ОЦК-ГПУ ( $\alpha$ - $\varepsilon$ )<sup>1</sup> МП [6 – 8]. Было достигнуто описание всех наблюдаемых макроскопических морфологических признаков (и даже параметра решетки) как функций упругих свойств исходной фазы.

Как было подчеркнуто в предисловии к [1, 4], суть парадигмы, дополнительной к традиционной схеме равновесной термодинамики, сводится к расшифровке динамической структуры возбужденного состояния решетки в неравновесной области фронта нелинейной волны превращения. Поскольку для  $\gamma$ - $\alpha$  и  $\alpha$ - $\varepsilon$  МП эти динамические структуры в качественном отношении подобны, изложение удобно начать с краткого освещения сути концепций гетерогенного зарождения и волнового роста мартенситного кристалла, являющихся основой аксиоматики динамической теории.

Далее обсуждается важный вопрос, касающийся критического размера зерна  $D_c$  исходной фазы, ниже которого мартенсит охлаждения со стандартным набором морфологических признаков образовываться не может. Для превращений в сплавах с электронной подсистемой, способной в неравновесных условиях поддерживать генерацию управляющих волн

---

<sup>1</sup> В металловедческой литературе, касающейся, например, титановых сплавов, для ОЦК-ГПУ перестройки используют обозначения  $\beta$ - $\alpha$ . Поскольку здесь обсуждаются в основном ГЦК-ОЦК ( $\gamma$ - $\alpha$ ) переходы, типичные для сплавов железа, во избежание недоразумений ОЦК решетке сопоставляется символ  $\alpha$ , а ГПУ решетке - символ  $\varepsilon$ .



смещений, найдена формула для критического размера зерна, базирующаяся на соотношении пространственных масштабов, характерном для зарождения мартенситного кристалла в упругом поле отдельной дислокации, и соотношении неопределенностей для энергии и времени. Подробно проанализирована зависимость от размера зерна температуры начала мартенситного превращения  $M_s$  в сплавах Fe–Ni при (29–32)% Ni. Зависимость  $D_c$  от химического состава позволяет объяснить существование предельной для протекания мартенситного превращения концентрации  $C^*$  легирующего элемента, приближение к которой соответствует предельному случаю  $D_c \rightarrow \infty$ . В частности, для сплавов Fe–Ni, по литературным данным,  $33\% < C^*_{Ni} < 35\%$ .

Отдельная глава посвящена приложению найденных закономерностей для оценки важного макроскопического параметра – доли образовавшегося мартенсита при атермической макрокинетике и трактовке влияния сильного магнитного поля на протекание МП. В частности, показано, что в окрестности особой концентрации  $C^*$  стабилизация аустенита по отношению к образованию мартенсита охлаждения за счет выполнения неравенства  $D_c > D$  может нарушаться магнитным полем, приводя к резкому снижению значения критического размера зерна до величины  $D_{сн} \ll D_c$  и неравенству  $D_{сн} < D$ .

И, наконец, в завершающей части проводится качественное рассмотрение возможностей протекания мартенситного превращения в объемных нанокристаллических материалах. Этот тип превращения, не обладающий полным представительным набором морфологических признаков, характерным для мартенсита охлаждения, предложено именовать «аккомодационным». Показано, что можно выделить, по крайней мере, два масштаба размеров нанокристаллических зерен, критических для протекания различных вариантов «аккомодационного мартенситного превращения», заметно меньших по сравнению с микронным критическим размером зерна, характерным для мартенсита охлаждения в сплавах с концентрацией  $C$  второго компонента, не принадлежащей ближней окрестности концентрации  $C^*$ .

Авторы выражают благодарность коллегам и специалистам, дискуссии с которыми способствовали критическому отбору значимой для анализа информации и инициировали исследования проблемы существования критического размера зерна для протекания мартенситного превращения с полным набором морфологических признаков.

---

---

# Глава 1

## Введение

### 1.1. Мягко- и жесткомодовые реализации мартенситных превращений

Мартенситные превращения (МП) в кристаллических твердых телах представляют собой варианты реализации полиморфизма, особенностью которых является кооперативный характер смещений атомов. Касаясь вкратце вопроса о состоянии микроскопической теории МП, уместно напомнить о двух предельных случаях реализации МП в переходных металлах и сплавах и роли электрон-фононного взаимодействия.

1. Превращение протекает как переход второго рода в равновесных условиях. В этом случае в системе при температуре начала превращения наблюдается “размягчение” решетки, то есть в фононном спектре исходной фазы частоты некоторых мод обращаются в нуль, а структура конечной фазы может рассматриваться как следствие искажений исходной фазы суперпозицией смещений, обусловленных этими модами. Обращение частоты в нуль означает абсолютную неустойчивость решетки к определенным смещениям, то есть к флуктуациям со сколь угодно малыми амплитудами. Поэтому для идеальных переходов второго рода типично гомогенное зарождение. Причиной “размягчения” мод является электрон - фононное взаимодействие при наличии достаточно обширных участков поверхности Ферми, совмещающихся при сдвиге на определенные квазиимпульсы, которые (с точностью до векторов обратной решетки) и задают квазиимпульсы “мягких” фононных мод. Подобные превращения являются крайними случаями дисторсионных переходов (близких к переходам второго рода), когда симметрии решеток исходной и конечной фаз связаны отношением соподчинения. Примером такой реализации МП могут служить структурные переходы в соединениях с решеткой А-15 [9, 10].

2. Превращение протекает как ярко выраженный фазовый переход первого рода в существенно неравновесных условиях. В фононном спектре исходной фазы вплоть до температуры начала превращения отсутствуют заметные аномалии, что указывает на

метастабильную устойчивость решетки. Зарождение является гетерогенным. Рост кристаллов осуществляется за счет распространения управляющего процесса, несущего локализованную в области волнового фронта пороговую деформацию. При таких (реконструктивных) превращениях симметрии решеток исходной и конечной фаз не связаны отношением соподчинения. Классическим примером здесь является  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах на основе железа. В этом случае, как впервые предложено в [11 – 13], неравновесная электронная подсистема в области волнового фронта при определенных условиях способна генерировать бегущие волны смещений, поддерживая управляющий волновой процесс (УВП). Следовательно, речь идет о “жестких” модах.

Заметим, что в обоих предельных случаях важно наличие большого числа эквидистантных (по энергии и квазиимпульсам) пар электронных состояний в доступном для заселенности энергетическом интервале  $\Delta$  вблизи энергии Ферми  $\mu$ . Подчеркнем, что во втором случае важна инверсная населенность таких пар. Для переходных металлов характерно наличие сравнительно узких энергетических зон с несколькими пиками в плотности состояний. Поэтому, в первую очередь, интерес представляют металлы и сплавы с составами, при которых один из пиков плотности состояний (соответствующий энергии  $\epsilon_t$ ) попадает в интервал  $\Delta$ , то есть выполняется условие:  $|\epsilon_t - \mu| \leq \Delta$ .

Накопленная для реконструктивных МП информация (см., например, [14, 15]) свидетельствует, что образующиеся мартенситные кристаллы обладают набором взаимосвязанных морфологических признаков (кристаллографические ориентации габитусных плоскостей, макросдвига, решеток исходной и конечной фаз), отражающих кооперативный характер процесса. Кроме того, яркой чертой микрокинетики является высокая скорость роста кристаллов. Поэтому теория, претендующая на приемлемую степень полноты описания, должна давать объяснение всего комплекса наблюдаемых особенностей превращения.

Уместно подчеркнуть, что данный подход может оказаться эффективным и для фазовых переходов первого рода близких к переходам второго рода, поскольку наличие дефектов дает возможность для начала мартенситного превращения при температуре, заметно отличающейся от температуры абсолютной потери устойчивости решетки.

## **1.2. Основные положения волновой модели роста мартенситного кристалла при реконструктивных превращениях**

На наш взгляд, требованию полноты описания реконструктивного  $\gamma$ - $\alpha$  МП в значительной степени удовлетворяет волновая модель роста [1, 2, 4, 5, 6] мартенситного кристалла, органично связанная со стадиями зарождения и аккомодации. Растущему кристаллу соответствует волна

переключения, фронт (межфазная переходная область) которой обладает динамической структурой, отражающей специфику УВП.

Для спонтанного (при изменении температуры) МП достаточно универсальной является модель УВП, в которой однородная (на мезомасштабе порядка толщины кристалла) пороговая деформация близка к плоской (типа растяжения – сжатия в ортогональных направлениях). Именно такой волновой процесс задает пластинчатую форму кристаллов и ориентацию их габитусной плоскости, наследуя и перенося информацию об ориентации главных осей тензора деформации упругого поля дефекта в области зарождения. Этот процесс иллюстрирует рис. 1.

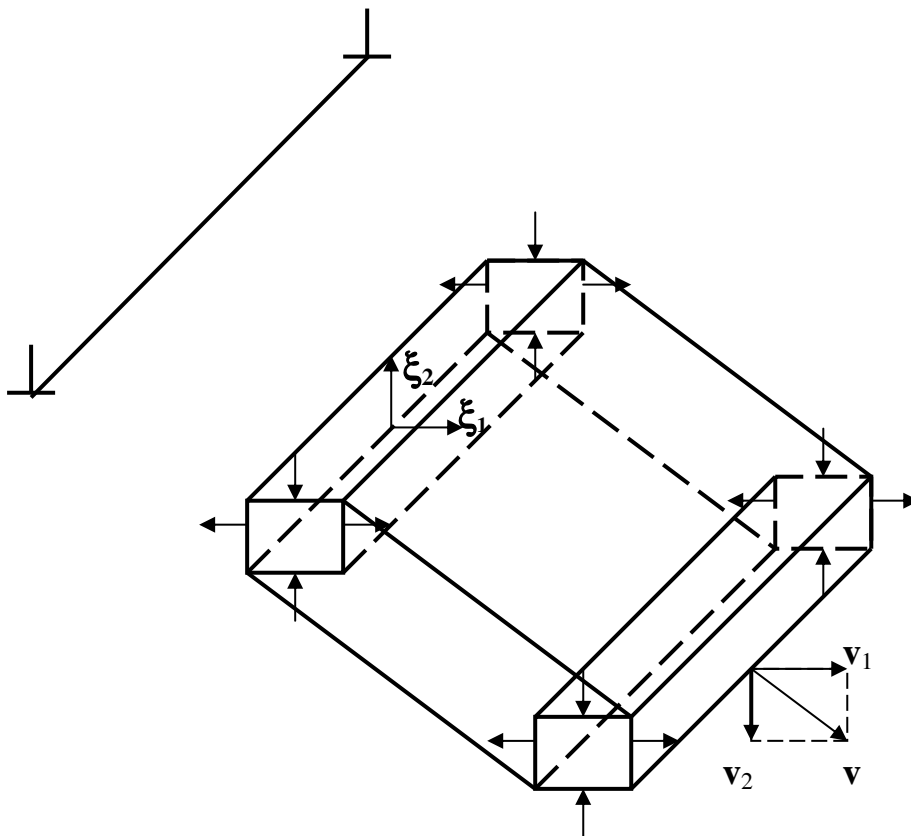


Рис. 1. Волновая модель управления ростом мартенситного кристалла

Роль объемного элемента, в котором осуществляется переход коллектива атомов через энергетический барьер (с выделением энергии и возбуждением колебаний) играет трехмерная ячейка в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда. Его грани попарно колеблются в противофазе, стимулируя пороговую деформацию типа растяжение – сжатие во взаимно ортогональных направлениях, совпадающих с направлениями распространения волновых пучков, излучаемых колеблющимся параллелепипедом. Решетка последовательно теряет

устойчивость, образуя пластинообразную область там, где налагаются волновые пучки с благоприятным для реализации пороговой деформации полем смещений атомов. Формирование пластинчатого прообраза мартенситного кристалла естественно интерпретировать как перемещение параллелепипеда со скоростью  $\mathbf{v}$ , являющейся векторной суммой скоростей  $\mathbf{v}_1$  и  $\mathbf{v}_2$  волновых пучков. Поскольку выделение энергии, необходимое для автокаталитической подпитки волны, происходит только в объеме, испытавшем пороговую деформацию, именно сверхзвуковая скорость  $\mathbf{v}$  становится реальной скоростью роста кристалла.

УВП формирует габитусную плоскость (ГП), являющуюся инвариантной (или слабоискаженной) плоскостью. Учитывая, что упругие внешние напряжения смещают температуру начала спонтанного МП, естественно считать, что пороговые деформации (растяжения  $\varepsilon_{1th} > 0$  и сжатия  $\varepsilon_{2th} < 0$ ) спонтанного МП не превышают предела упругости  $\varepsilon_{el}$ , т.е.

$$\varepsilon_{1th}, |\varepsilon_{2th}| < \varepsilon_{el}, \quad \varepsilon_{el} \sim (10^{-4} \div 10^{-3}) \ll 1. \quad (1)$$

Превышение пороговых деформаций, нарушает устойчивость решетки исходной фазы и запускает самопроизвольный процесс развития деформации превращения, не требующий энергозатрат, а напротив, сопровождающийся выделением энергии. Из кристаллогеометрических соображений [14] следует, что микроскопически однородной деформации превращения (деформации Бейна  $\varepsilon_B$ ) соответствуют значения  $\varepsilon_{1,3} \approx 0.13$ ,  $\varepsilon_2 \approx -0.2$ , то есть на два-три порядка превышающие пороговые значения и оказывающиеся в диапазоне пластических деформаций.

Начальное возбужденное состояние в форме колеблющегося параллелепипеда возникает в упругих полях, создаваемых дефектами, после перевала энергетического барьера. Это состояние естественно интерпретировать, как развитие (за счет выделения энергии) критической флуктуации поля смещений атомов исходной фазы.

Выполненные ранее расчеты упругих полей позволяют идентифицировать дефекты как вполне определенные дислокации (на рис. 1 отрезок, ограниченный символами  $\perp$ , соответствует линии дислокации). Ребра параллелепипеда совпадают с выделенными (главными) направлениями  $\xi_i$  упругого поля дефекта в области, наиболее благоприятной для зарождения и последующего быстрого роста. Синтез концепций гетерогенного зарождения и волнового роста достигается, если считать, что волновые нормали  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  волновых пучков, описывающих в области наложения соответственно деформации растяжения ( $\varepsilon_1 > 0$ ) и сжатия ( $\varepsilon_2 < 0$ ), коллинеарны собственным векторам  $\xi_i$  ( $i=1,2$ ) тензора деформации упругого поля дефекта в области зарождения:

$$\mathbf{n}_1 \parallel \xi_1, \quad \mathbf{n}_2 \parallel \xi_2, \quad \mathbf{n}_1 \perp \mathbf{n}_2, \quad |\mathbf{n}_i| = |\xi_i| = 1. \quad (2)$$

Значит, УВП наследует информацию о направлениях главных осей деформации. Легко показать [1, 2, 4, 5], что нормаль  $\mathbf{N}_w$  к плоскости габитуса, связанная с распространением УВП, задается кинематическим соотношением:

$$\mathbf{N}_w \parallel \mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1 \alpha, \quad \alpha = \frac{v_2}{v_1}, \quad (3)$$

где  $v_1$  и  $v_2$  – модули скоростей распространения волн в  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  направлениях. С другой стороны, при плоской однородной деформации растяжения-сжатия нормали к инвариантным плоскостям имеют вид:

$$\mathbf{N}_d = \xi_2 \pm k \xi_1, \quad (4)$$

$$k = \frac{1 - |\varepsilon_2|}{1 + \varepsilon_1} \left( \frac{\varepsilon_1 (2 + \varepsilon_1)}{|\varepsilon_2| (2 - |\varepsilon_2|)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Поскольку УВП несет деформацию с инвариантной плоскостью, естественно считать, что имеет место совпадение кинематического и динамического описания габитусной плоскости при распространении УВП, то есть формулы (3) и (4) описывают один и тот же габитус, если значения  $\varepsilon_i$  в (5) соответствуют пороговым значениям. Тогда при учете (2) получаем важное условие:

$$\alpha = k, \quad (6)$$

задающее связь между деформациями и скоростями распространения волн. Строго говоря, выполнение (6) имеет место лишь при распространении чисто продольных волн. В анизотропной среде, это реализуется, если волновые нормали направлены вдоль осей симметрии, в изотропной среде для любых направлений. При больших отклонениях волновых нормалей от осей симметрии (акустических осей), как и при умеренных отклонениях, в случае большой анизотропии, замену квазипродольных волн чисто продольными можно использовать как первое приближение для качественных оценок.

Малость пороговых деформаций  $\varepsilon_{th}$  позволяет представить условие (6) в виде:

$$\alpha = \frac{v_2}{v_1} = k \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}, \quad (7)$$

где скорости  $v_2$  и  $v_1$  можно рассчитывать с помощью уравнения Кристоффеля [16], используя модули упругости исходной кристаллической решетки (желательно при температуре  $M_s$  начала превращения).

Следует отметить, что эта методика хорошо себя зарекомендовала не только при интерпретации ГП  $\alpha$ -мартенсита в сплавах железа, но и при интерпретации габитусов в сплавах с эффектом памяти формы [17-22].

Подобный алгоритм позволяет идентифицировать дислокационные центры зарождения (ДЦЗ) конкретных мартенситных кристаллов.

Построение динамической теории формирования кристаллов мартенсита, включающей описание финишных деформаций, превышающих пороговые на два-три порядка [5-8], в значительной степени базируется на следующем утверждении: отношение (7) деформаций в пороговом режиме практически не изменяется при развитии деформаций от пороговых до финишных значений. Это утверждение можно рассматривать как следствие высокой скорости превращения и отсутствия сопротивления со стороны области решетки, потерявшей устойчивость и не достигшей нового метастабильно устойчивого состояния.

---

---

## Глава 2

### Пространственные, временные и энергетические масштабы, характеризующие процесс зарождения мартенситного кристалла

Анализ стадий зарождения и роста  $\alpha$  – мартенсита в сплавах железа позволяет сделать ряд выводов и количественных оценок, развивающих аксиоматику динамической теории формирования мартенситного кристалла, изложенную в главе 1.

1. Превращение начинается в области пространства, имеющей форму, близкую к вытянутому прямоугольному параллелепипеду, ориентация ребер которого задается тремя собственными векторами  $\xi_i$  тензора поля упругой деформации дислокации, играющей роль центра зарождения. Как показывают расчеты упругих полей прямолинейных дислокаций, соответствующие главные значения тензора деформации в области зарождения не только удовлетворяют условию плоской деформации с парой инвариантных (слабоискаженных) плоскостей:

$$\varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 < 0, \varepsilon_3 \approx 0, \quad (8)$$

но и  $\varepsilon_1$  и  $|\varepsilon_2|$  близки к максимальным значениям  $\varepsilon_1(\Theta_0)$ ,  $|\varepsilon_2(\Theta_0)|$  (экстремумы ищутся по угловой переменной  $\Theta$  при некотором фиксированном расстоянии  $r$  до дислокационной линии). Следовательно, в области зарождения упругое поле дефекта в максимальной степени снижает энергетический барьер для старта плоской деформации с инвариантной (при  $\varepsilon_3=0$ ) или слабоискаженной (при  $\varepsilon_3 \approx 0$ ) плоскостью.

2. Угловая локализация этой области определяется окрестностью  $\Delta\Theta \sim d/r$  вблизи полярного угла  $\Theta_0$ , в которой выполняются условия (8) и изменение удельного объема  $\delta$  имеет определенный знак.



## 2.1. Диапазоны значений $r$ и $d$

Обсудим теперь вопросы о расстоянии  $r$  от линии дислокации до места локализации начального возбужденного состояния (до оси зародыша  $\xi_3$  на рис. 2), а также о величине  $d$  его поперечного размера. Очевидно, что упругое поле дефекта по сечению параллелепипеда (на масштабе  $d$ ) можно считать приблизительно однородным, если выполняется условие:

$$d/r \leq 0.1. \quad (9)$$

Будем считать также, что прямолинейный сегмент отдельной дислокации может играть роль центра зарождения (см. рис. 3). Полагая, что среднее расстояние между дислокациями равно  $L$ , влиянием упругих полей других дислокаций можно пренебречь, если

$$r \sim 0,1L. \quad (10)$$

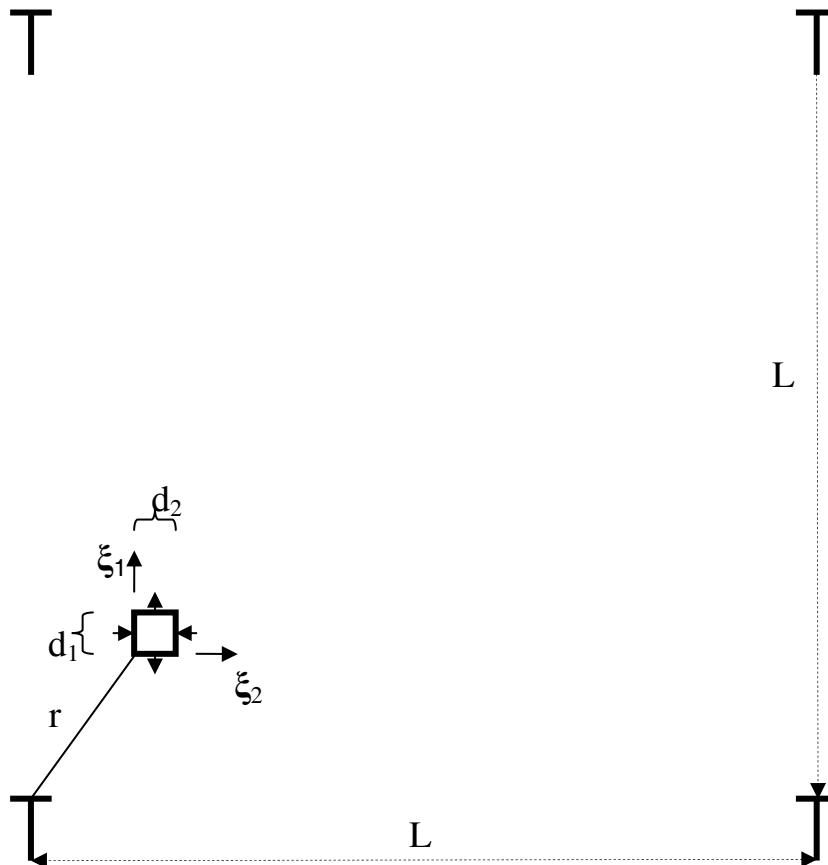


Рис. 2. Область локализации начального возбужденного состояния в упругом поле отдельной дислокации: соотношение масштабов  $L$  и  $r$

Но  $L$ , в свою очередь, связана с плотностью дислокаций  $\rho$ :

$$L \sim 1/\sqrt{\rho}. \quad (11)$$

Из (9) – (11) ясно, что

$$d \sim 10^{-2} \rho^{-0.5}. \quad (12)$$

Естественно, при реалистической оценке в качестве нижней границы значений  $\rho$  принять типичную для отожженных монокристаллов плотность дислокаций  $\rho \sim 10^4 \text{ см}^{-2}$ . Тогда из (12) получаем  $d \sim 1 \text{ мкм}$ . Напомним, что размеры  $d_{1,2}$  порядка половин длин волн, управляющих ростом кристалла мартенсита, и задают толщину пластинчатых мартенситных кристаллов (либо толщину мидриба - центральной пластинчатой зоны линзовидных кристаллов). Именно такие толщины и характерны для первых крупных кристаллов мартенсита, появляющихся в монокристаллических образцах, либо в крупных зернах поликристаллов (с диаметрами порядка 100 мкм)

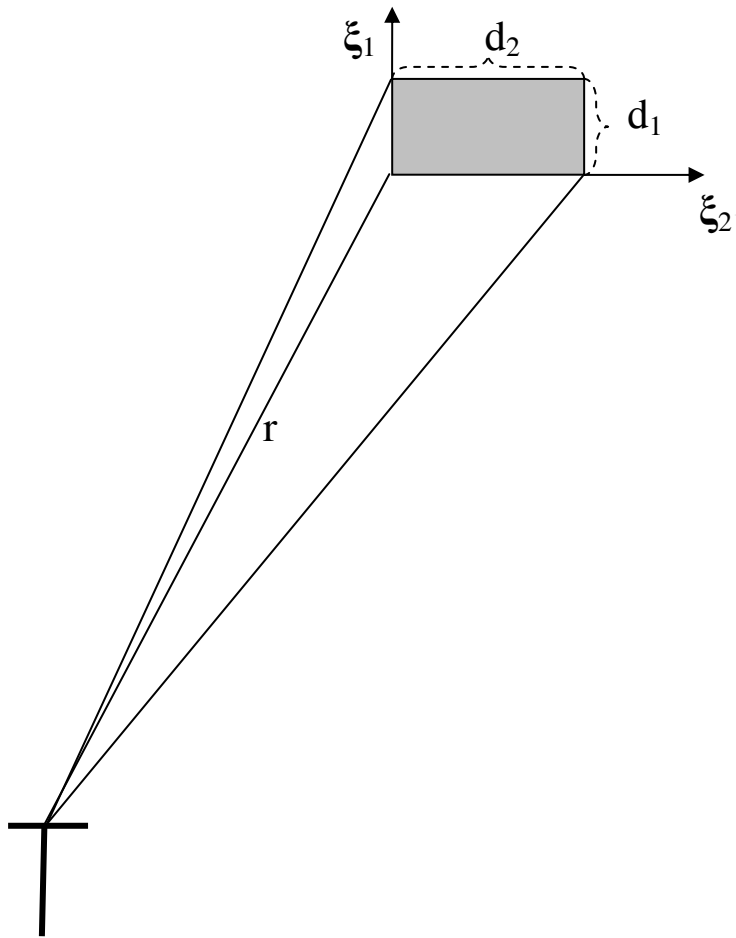


Рис. 3. Область локализации начального возбужденного состояния в упругом поле отдельной дислокации: соотношение масштабов  $r$  и  $d$

Подчеркнем, что условию (9) приблизительной однородности упругой деформации по поперечному сечению зародыша можно формально удовлетворить, выбирая и меньшие значения  $d$  (разумеется, выбор величины  $d$  меньше параметра решетки  $a$  лишен физического смысла). Однако мы сознательно используем при оценке максимальные значения  $d$ , еще совместимые с требованием (9). Дело в том, что при переходе первого рода высвобождающаяся энергия тем больше, чем меньше отношение площади поверхности зародыша  $S_N$  к его объему  $V_N$ . Например, для зародыша в форме кругового цилиндра с длиной образующей  $\ell$  и радиусом основания  $R$  имеет место

$$\frac{S_N}{V_N} = 2 \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{\ell} \right),$$

а для интересующего нас зародыша в форме прямоугольного параллелепипеда с длинами ребер  $d_1, d_2, \ell$  получаем

$$\frac{S_N}{V_N} = 2 \left( \frac{1}{d_1} + \frac{1}{d_2} + \frac{1}{\ell} \right), \quad (13)$$

то есть рост размеров зародыша (в частности, рост поперечного размера) будет способствовать росту высвобождающейся энергии.

Ясно, что выбор в качестве величины  $d$  максимального значения  $d_m$ , еще совместимого с требованием (9), не противоречит условию (1), поскольку упругая деформация  $\varepsilon_{ed}$ , создаваемая прямолинейной дислокацией, пропорциональна  $1/r$ , а возрастание  $d_m$  при выполнении (9) предполагает и возрастание  $r$ . Встает вопрос, не слишком ли мал уровень этой деформации, а значит, и пороговой деформации, которая должна иметь тот же порядок величины в области зарождения. Действительно, полагая  $\varepsilon_{ed}(r) \sim a/2 \cdot \pi r$ , при  $a \approx 3,5 \cdot 10^{-10}$  м и  $r_m \approx 10^{-5}$  м ( $r_m$  соответствует  $d_m \approx 10^{-6}$  м) находим  $\varepsilon_{ed}(r) \sim 10^{-5}$ , меньшее по порядку величины предела упругости  $\varepsilon_{el}$ . Тем не менее, учитывая, что преодоление конечного межфазного энергетического барьера при зарождении осуществляется при изменении энергии порядка  $k_B T$  ( $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура), а пластинчатый мартенсит с такой толщиной кристаллов может формироваться вплоть до температур, близких к абсолютному нулю, полученное значение можно считать приемлемым для оценки пороговой деформации  $\varepsilon_{th}$ .

Ясно, что при возрастании плотности дислокаций величины  $L(\rho)$ ,  $r_m(\rho)$  и  $d_m(\rho)$  будут уменьшаться. Нижние границы диапазонов изменения указанных величин, в рамках развиваемых представлений, естественно

связать с такой плотностью дислокаций, при которой, на расстоянии  $(r_m)_{\min}$  от линии отдельной дислокации, поле упругой деформации достигает значения предела упругости, то есть

$$\varepsilon_{ed}(r) \sim \varepsilon_{th} \sim \varepsilon_{el}. \quad (14)$$

Тогда при  $\varepsilon_{el} \sim (10^{-4} \div 10^{-3})$  для нижних границ значений величин  $L$ ,  $r_m$  и  $d_m$  в упругой области получаем:

$$(r_m)_{\min} \sim (1 \div 10^{-1}) \text{ мкм}, (d_m)_{\min} \sim (10^{-1} \div 10^{-2}) \text{ мкм}, (L)_{\min} \sim (10 \div 1) \text{ мкм}, \quad (15)$$

что соответствует максимальной плотности дислокаций  $\rho_{\max} \sim (10^6 - 10^8) \text{ см}^{-2}$ .

Заметим, что при расчете упругого поля отдельной дислокационной петли роль  $L_{\min}$  играет диаметр петли, а при рассмотрении реализации механизма гетерогенного зарождения и волнового роста мартенсита в поликристаллических образцах – диаметр зерна  $D$ . В соответствии с (12)

$$d_m \approx n^{-1} 10^{-2} D. \quad (16)$$

Следует ожидать, что для коэффициента  $n$  в (16) будет, как правило, иметь место неравенство  $n \geq 1$ . Действительно, допустим, что прямолинейный участок единственной в объеме зерна дислокационной линии расположен рядом с одним из близких к плоскому участков границы зерна (в предельном случае речь идет о зернограничной ступеньке). Тогда расстояние свободное от дефектов (до противоположной границы зерна) соответствует  $D$ , что и определяет нижнюю границу значений  $n$ .

Если же прямолинейный участок единственной в объеме зерна дислокационной линии расположен в центре зерна, то расстояние свободное от дефектов (до границы зерна) составляет не более, чем  $D/2$ , что соответствует значению  $n=2$ . Отсюда ясно, что значения  $1 < n < 2$  соответствуют промежуточному положению единственной дислокации в зерне. Очевидно, что для равноосной (в пределе сферической) формы зерна наибольший прямолинейный участок дислокационной линии совпадает с диаметром зерна, и для таких зерен можно ожидать значения  $n=2$  в качестве нижнего предела. В случае нескольких центров зарождения в зерне величина  $n$  будет пропорционально расти, снижая  $d_m$ . Таким образом, естественно объясняется появление критического размера  $D_c$  зерна  $\sim 1$  мкм, ниже которого наблюдается подавление  $\gamma$ - $\alpha$  МП. По этому поводу имеется достаточно много публикаций (см., например, [23 – 29] и ссылки в этих источниках).

Можно ожидать, что зарождению в зерне критического размера соответствует единственная дислокация в объеме зерна, и поэтому типичным диапазоном значений  $n$  является именно  $1 \leq n \leq 2$ .

## 2.2. Оценки нижних границ размеров зерна, еще совместимых с формированием кристаллов мартенсита

В связи с существованием соотношения масштабов (16) легко установить нижний предел значений размера зерна  $D=(D_w)_{\min}$ , формально еще совместимый с картиной роста кристалла, управляемого волновым процессом. Для этого приравняем  $d_m$  параметру решетки  $a$  аустенита. Как известно,  $a$  совпадает с наибольшим ребром минимальной объемно центрированной тетрагональной ячейки (с тетрагональностью  $\sqrt{2}$ ), выделяемой в исходной ГЦК решетке для кристаллографической демонстрации деформации Бейна. Тогда из (16) находим:

$$(D_w)_{\min}=10^2 a. \quad (17)$$

При  $a \approx 3,6 \cdot 10^{-10}$  м из (17) получаем  $(D_w)_{\min}=36$  нм. Полезно обсудить, в какой мере оценка (17) согласуется с соотношением (14), в котором выше при численных оценках в качестве верхнего значения предела упругости использовалась величина  $\varepsilon_{el} \approx 10^{-3}$ . Уместно напомнить, что величина  $\varepsilon_{el} \approx 10^{-3}$  соответствует макроскопическому описанию и предшествует началу процесса текучести. Текучесть же связана, главным образом, с неупругим процессом генерации дислокаций. На малых масштабах пропорциональность между напряжением и деформацией (закон Гука) может выполняться в более широком интервале значений  $\varepsilon_{el}$ , что хорошо демонстрируют эксперименты по наноиндентированию.

Используем при оценках критического значения напряжения  $\tau_k$  для действия источника Франка-Рида (см., например, [30, 31]) соотношение:

$$\tau_k(L) \sim \frac{G b}{L^*}, \quad (18)$$

где  $b$  - модуль вектора Бюргерса,  $G$  - модуль сдвига, а  $L^*$  - длина закрепленного на концах дислокационного сегмента, периодическое выгибание которого сопровождается образованием дислокационных петель. Ясно, что если сегмент локализован в зерне с диаметром  $D$ , то выгибание сегмента до критического радиуса ( $r \geq L^*/2$ ) будет подавляться при  $D \leq L^*$ . Значит, предел упругости в зерне с характерным размером  $D$  задается, согласно (18), величиной:

$$\varepsilon_{el}(D) \sim \tau_k(D)/G = b/D \approx a/D. \quad (19)$$

В соответствии с (14) самое близкое к дислокационной линии место локализации возбужденного состояния задается радиусом  $r \approx (r_m)_{\min}$ , на котором

$$\varepsilon_{ed}(r) \sim a/2\pi r \approx \varepsilon_{el}(D) \sim a/D,$$

откуда  $(r_m)_{\min} \sim D/2\pi \sim 0.1D$ . Таким образом, соотношению масштабов (16) отвечает локализация возбужденного состояния в области с близкими к максимальным упругими деформациями, создаваемыми дислокацией.

Подстановка в (19) значения  $(D_w)_{\min}$  из (17) дает величину

$$\varepsilon_{el}(D_w) = 10^{-2}, \quad (20)$$

превышающую на порядок значение  $\varepsilon_{el}$ , использованное ранее в качестве максимального для упругой области. Заметим, значения  $\varepsilon_{el} \approx 10^{-2}$ , в соответствии с  $\varepsilon_{ed}(r) \sim a/2\pi r$ , достигаются на расстояниях  $(r_m)_{\min} \sim 10a \approx 3.6\text{нм}$ , и, следовательно, аналогично (15), получаем иерархию нижних граничных значений параметров, существенных для динамической теории формирования кристаллов мартенсита:

$$(d_m)_{\min} \approx 0.36\text{нм}, \quad (r_m)_{\min} \sim 10a \approx 3.6\text{нм}, \quad (L)_{\min} \sim (D_w)_{\min} \approx 10^2 a \approx 36\text{нм}. \quad (21)$$

Разумеется, достижение (и тем более превышение) значений пороговых деформаций  $\varepsilon_{th} \sim \varepsilon_{el} \approx 10^{-2}$  в режиме стационарного волнового роста, поддерживаемого неравновесной подсистемой d-электронов, оказывается трудно реализуемым. Теоретические оценки на основе формального квазиимпульсного описания d-состояний с использованием, опять же формально, больших значений градиентов химического потенциала (за счет сужения переходного межфазного слоя до нескольких параметров решетки) позволяют, конечно, получить требуемые значения. Однако подобное описание уже не может претендовать на надежность оценок. По-видимому, реальная нижняя граница  $(D_w)_r$  расположена между  $(D_w)_{\min}$  и 1мкм. Скорее всего, она соответствует условию (19) при  $\varepsilon_{el} \approx 10^{-3}$ , то есть

$$(D_w)_r \sim 10^3 a \approx 350 \text{ нм} = 0.36 \text{ мкм}. \quad (22)$$

Поэтому для зерен с диаметрами  $D \geq (D_w)_r \sim 0.1\text{мкм}$ , вероятно, еще возможен волновой механизм роста кристаллов мартенсита, сохраняющих представительный набор макроскопических морфологических признаков.

В зернах поликристалла с размерами  $D < (D_w)_r$  формирование тонких кристаллов мартенсита возможно лишь при распространении кристонов – носителей (супердислокационного типа) пороговой локализованной сдвиговой деформации (см., например, [2], [3], [32]). Возникать кристоны

могут как при внешнем нагружении, так и при релаксации напряжений на всевозможных неравновесных границах.

При  $D < (D_w)_r$  и, тем более, при  $D < (D_w)_{\min}$  коротковолновые смещения в поликристаллах, в принципе, могут создавать еще тонкие двойники превращения, с границами типа  $\{110\}_\gamma \parallel \{112\}_\alpha$ , “заметаемые” линиями  $\langle 110 \rangle_\gamma$ . Обсуждение вопроса о критическом размере зерна будет продолжено в гл. 3–5.

В связи с существованием критического размера зерна естественно ожидать и для свободных малых частиц существования критического диаметра частиц порядка 1 мкм. Данные о МП в малых частицах (см., например, [33 – 36]) показывают, что в частицах с диаметрами, заметно превышающими 1 мкм, МП происходит не во всех частицах одинаковых размеров, а только в тех, где имеются благоприятные места для зарождения, что подтверждает гетерогенный характер зарождения [33]. По-видимому, частицы, с размером, заметно меньшим критического диаметра, способны превращаться как единое целое, испытывая бейновскую деформацию. В этом случае исходные монокристаллические сферические частицы должны превращаться в трехосные монокристаллические эллипсоиды, что и наблюдалось в [35], хотя и не часто, на сферических частицах сплава Fe–27.4Ni с диаметром меньшим 100 нм. Последнее обстоятельство открывает возможность протекания бездиффузионной перестройки в нанокристаллическом состоянии, которая должна рассматриваться как самостоятельный вариант перестройки, не имеющий полного набора морфологических признаков характерных для МП, протекающих в объемах, превышающих критические размеры. Более подробно этот вариант будет обсуждаться в гл. 7.

Возвращаясь к вопросу о гетерогенном зарождении мартенситного кристалла в объемах, превышающих критические, можно утверждать, что уже отдельные дислокации могут выступать как центры зарождения. Этот вывод, конечно, не накладывает запрета на процесс зарождения в упругих полях ансамблей дефектов, в частности, в поле плоского скопления дислокаций, характеризуемого эффективным вектором Бюргерса, превышающим вектор Бюргерса единичной дислокации. Стандартной причиной возникновения концентраторов напряжений в монокристаллах, подвергнутых пластической деформации, является контактное взаимодействие дислокаций с пересекающимися плоскостями скольжения. Интересная возможность, обсуждавшаяся в [32, 37], состоит в возникновении решетки мезоконцентраторов с параметром  $L$  (средним расстоянием между соседними мезоконцентраторами). Допустим, что типичная длина локализованного сегмента мезоконцентратора близка к  $L$  и будем характеризовать сегмент эффективным вектором Бюргерса  $V_e \approx m \cdot b \approx m \cdot a$  (где  $1 < m < 10^2$ ). Тогда при величине  $(V_e/L) \sim 10^{-3}$  поперечный размер начального возбужденного состояния, согласно (10) и (11),

формально мог бы составлять  $10^{-2}L$  (не обязательно совпадающий с масштабом, типичным для зарождения в поле отдельной дислокации).

Стандартным стопором для дислокационных скоплений в поликристаллах являются границы зерен, приводящие к характерной корневой зависимости для результирующего напряжения  $\tau$ , создаваемого скоплением, от диаметра зерна  $D$  (зависимость Холла-Петча [38]):

$$\tau \sim \sqrt{D}. \quad (23)$$

Упругие поля ансамблей дефектов, в принципе, могут играть самостоятельную роль, либо способствовать (препятствовать) возбуждению УВП в упругом поле отдельной дислокации (локализованной в соседнем зерне), внося как поправки в стартовые условия при возбуждении, так и энергетический вклад в создание границы раздела фаз. В последнем случае поля скоплений по отношению к области зарождения играют роль внешнего поля, совершающего работу по созданию межфазной границы.

### 2.3. Время образования зародыша (начального возбужденного состояния), способного к быстрому росту

В картине волнового роста кристалла время образования возбужденного состояния в форме параллелепипеда оценивается как время  $t_N$ , необходимое для прохождения со скоростью  $v$  (порядка звуковой) расстояния порядка  $\varepsilon_B d_m \sim 0.1 d_m$ , то есть

$$t_N \sim \frac{0.1 d_m}{v}. \quad (24)$$

Тогда, например, для  $v \sim 10^3$  м/с и  $d_m \sim (10^{-2} \div 1)$  мкм получаем  $t_N \sim (10^{-12} - 10^{-10})$  с. Поскольку в развиваемой модели  $d_m$  сопоставляются полуволновые пучки, управляющие ростом кристалла, то величина  $t_N$  порядка четверти периода колебаний соответствующих управляющих волн. Учитывая, что  $d_m$ , задавая толщину мартенситного кристалла, существенно (по порядку величины) превышает параметр решетки, в [1, 4] время  $t_N$  названо временем образования макрозародыша. Напомним, что в случае превращений в переходных металлах и сплавах на их основе возможен механизм генерации управляющих волн неравновесными электронами. В этом случае время  $t_N$  должно коррелировать [1, 4] с временем существования градиента химического потенциала электронов в межфазной области, нивелировать который стремится процесс электронного переноса. Поэтому стартовый поперечный размер зародыша



(возбужденного состояния), запускающего автоволновой рост мартенситного кристалла, должен существенно превышать параметр решетки. Поскольку выше толщина пластинки мартенсита определена в качестве характерного мезомасштаба, во избежание терминологической неоднозначности, приставку “макро”, применительно к размерам  $d_m$  стартового возбужденного состояния, следовало бы заменить на “мезо” (в дальнейшем, упоминая поперечный размер зародыша, мы эти приставки будем просто опускать).

Дополнительного замечания заслуживает случай  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах на основе железа. Действительно, мартенсит является ферромагнитным, а аустенит, в зависимости от состава сплава, является либо парамагнитным (в большинстве случаев), либо ферромагнитным (например, для сплавов Fe-Ni при 30-33% Ni), но с меньшей намагниченностью, чем в мартенситной фазе. Тогда высвобождение энергии, достаточной для поддержания низких пороговых значений деформаций в УВП, по-видимому, возможно уже за счет магнитной подсистемы. Если переход в ферромагнитное состояние начинается с заметно меньших, по сравнению с бейновской, деформаций, то и время  $t'_N$ , в соответствии с (24), окажется меньше  $t_N$ . Таким образом, существует диапазон значений  $t_N$ , обусловленный особенностями исходного состояния системы.

#### 2.4. Энергетические масштабы, характеризующие процесс зарождения мартенситного кристалла

В обсуждаемой модели образования зародыша (начального возбужденного состояния), неустойчивого к процессу быстрого роста, большое переохлаждение  $T_0 - M_s$ , где  $T_0$  – температура равновесия фаз, естественно интерпретируется [1, 4] как необходимое условие для возбуждения колебаний с конечными амплитудами и частотами, позволяющими реализовать уровень деформаций, сравнимый с пределом упругости. Возбуждение колебаний носит нерезонансный характер, в конечном итоге их кинетическая энергия соответствует наблюдаемому тепловому эффекту  $Q$  (в дальнейшем  $Q$  считается отнесенным к единице объема). Для относительно низкочастотных и, следовательно, долгоживущих колебаний, задающих мезомасштаб (толщину кристалла), в качестве масштаба плотности энергий, существенных для преодоления межфазного барьера, естественно принять

$$E_{th} \approx \frac{A \varepsilon_{th}^2}{2}, \quad (25)$$

где  $A$  – упругий модуль второго порядка, а  $\varepsilon_{th}$  – пороговая деформация. В качестве типичного значения для сплавов на основе железа можно принять

$A=2 \cdot 10^{11}$  Дж/м<sup>3</sup>. Заметим, что  $E_{th}$  составляет лишь малую долю теплового эффекта. Разумеется, в случае рассмотрения двойников превращения спектр частот, включаемых в кинетическую энергию, должен обогащаться высокочастотными (коротковолновыми) компонентами, порождающими волны смещений, действующие согласованно с длинноволновыми смещениями [2, 5, 39]. Тогда вклад (25) может быть кратно увеличен (но не более чем в  $d_m/a$  раз). В общем энергетическом балансе плотность разности химических свободных энергий фаз  $\Delta f = \Delta F/V$  ( $V$  – объем) должна включать (наряду с  $E_{th}$ ) плотность поверхностной энергии  $\Delta f_s = E_s S/V$ , связанную с границей раздела фаз ( $E_s$  – удельная поверхностная энергия,  $S$  – площадь поверхности), и плотность энергии колебаний решетки  $Q'$  с частотами вне диапазона частот, связанных с энергией  $E_{th}$ . В аналогичном (25) виде представляется и вклад энергии упругой деформации  $E_{el}$ , учитываемой в энергетическом балансе при квазистатическом равновесии сосуществующих фаз. Поэтому на этапе возникновения начального возбужденного состояния можно считать

$$\Delta f \approx Q' + E_{th} + E_{el} + E_s S/V, \quad (26)$$

где  $Q'$  связана, в основном, с коротковолновыми фононами.

---

---

## Глава 3

### Зависимость температуры $M_s$ от диаметра зерна. Качественные трактовки

Вначале мы сформулируем и кратко обсудим трактовки, базирующиеся на термодинамических соотношениях и некоторых дополнительных допущениях, предполагающих различные механизмы динамической реализации мартенситного превращения, а затем обсудим вариант, непосредственно связанный с существованием температуры, оптимальной для генерации управляющих волн неравновесными электронами.

#### 3.1. Трактовки, базирующиеся на термодинамических соотношениях

Полагая, что в (13)  $1/d_{1,2} \gg 1/\ell$  и  $d_{1,2} \approx d_m \approx 10^{-2}D$  (см. (16)), и учитывая, что энергии  $E_{th}$  и  $E_{el}$  квадратичны по деформации  $\varepsilon$  (в свою очередь,  $\varepsilon \sim 2u/d_m$ , где  $u$  – амплитуда колебаний), представим (26) в виде, явно включающем диаметр зерна  $D$ :

$$\Delta f \approx Q' + \frac{2 \cdot 10^4 A u^2}{D^2} + \frac{10^2 E_s}{D}. \quad (27)$$

С другой стороны,  $\Delta f$  можно приближенно представить с помощью соотношения:

$$\Delta f \approx Q (T_0 - M_s) / T_0, \quad (28)$$

где  $T_0$  – температура равновесия фаз, а  $Q / T_0$  соответствует скачку энтропии. Из (27) и (28) следует

$$M_s(D) = M_{S\infty} - B/D - C/D^2, \quad M_{S\infty} = M_s(\infty) = (Q - Q') \cdot T_0 / Q, \quad (29)$$

где  $V=10^2 E_S \cdot T_0/Q$ ,  $C=2 \cdot 10^4 \cdot A \cdot u^2 T_0/Q$ .

Легко убедиться, что при  $\varepsilon_{th} \sim 10^{-5}$  и  $d_m \approx 1 \mu\text{км}$  смещение  $u \sim 10^{-11} \text{м}$ , и без увеличения порядка величины  $E_{th}$  (за счет включения коротковолновых компонент) вкладом последнего слагаемого в (29) можно пренебречь за исключением области значений  $D$  меньших или порядка  $1 \mu\text{км}$ . Отбрасывая последнее слагаемое в (29), представим (29) в наиболее простом виде:

$$M_S(D) = M_{S\infty}(1 - D_c/D), \quad D_c = V/M_{S\infty} = 10^2 E_S T_0 / M_{S\infty} Q. \quad (30)$$

Из (30) следует, что при  $D = D_c$  температура  $M_S(D) = 0$ , то есть при  $D \leq D_c$  исчерпывается возможность образования мартенсита охлаждения (с традиционным для массивных образцов набором морфологических признаков).

Отметим еще один важный предельный случай:  $D_c \rightarrow \infty$  при  $M_{S\infty} \rightarrow 0$ . Согласно (29),  $M_{S\infty} \rightarrow 0$  либо при  $(Q - Q') \rightarrow 0$  (что соответствует  $E_{th} \rightarrow 0$ , т.е. исчезновению межфазного энергетического барьера), либо при  $T_0 \rightarrow 0$  (в этом случае барьер может оставаться конечным,  $\Delta f = 0$ , выделение энергии невозможно, и исходная фаза стабилизируется). В принципе допустим и вариант одновременного обращения в нуль  $(Q - Q')$  и  $T_0$ . Как следует из (29) и (30), критический размер  $D_c = 10^2 E_S / (Q - Q')$  от  $T_0$  не зависит. Поскольку величина  $E_S$  конечна, то предельный случай  $D_c \rightarrow \infty$ ,  $M_{S\infty} \rightarrow 0$  соответствует варианту  $(Q - Q') \rightarrow 0$ . Напомним, что в сплавах  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$  мартенситное  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращение протекает при  $0 < x < 0.35$ , причем  $M_S$  снижается при увеличении  $x$ , а при  $0.35 < x \leq 1$  аустенит стабилен при любых температурах.

Формула (30) удобна для первичного анализа экспериментальных результатов, поскольку содержит всего два параметра, один из которых  $M_{S\infty}$  (температура начала мартенситного превращения в монокристаллическом образце) легко измеряется (или берется из литературных данных для сплавов известного состава). Корректировка  $D_c$ , с учетом (29), следует из требования  $M_S(D_c) = 0$ :

$$D'_c = \frac{D_c}{2} + \sqrt{\left(\frac{D_c}{2}\right)^2 + \frac{C}{M_{S\infty}}}. \quad (31)$$

Следует отметить, что экспериментальные данные для зависимостей  $M_S(D)$  характеризуются заметным разбросом, а их аналитическую обработку ведут, как правило, используя зависимость вида

$$M_S(D) = M_{S\infty} - \frac{K}{\sqrt{D}}. \quad (32)$$

Очевидно, что формулу (32) можно переписать в форме

$$M_S(D) = M_{S\infty} (1 - \sqrt{D_c/D}), \text{ где } D_c = (K/M_{S\infty})^2.$$

Появление зависимости (32) обычно обосновывается (см., например, [26], [28], [40]) применительно к процессу автокаталитического зарождения и базируется, наряду с (28), на следующих допущениях: 1)  $\Delta f$  пропорционально величине напряжения сдвига  $\tau_{tr}$  при превращении [41]; 2) напряжение  $\tau$  в аустенитном зерне, обусловленное возникновением в соседнем зерне мартенситных кристаллов (или даже единственного кристалла), подобно напряжению от скопления дислокаций [42], [43]. В используемой в настоящее время трактовке второе допущение означает, что выполняется соотношение типа (23), то есть

$$\tau \sim \tau_i \sqrt{D}, \quad \tau_i = \tau_{tr} - \tau_0, \quad (33)$$

где  $\tau_i$  – “термодинамическое напряжение” (меньшее  $\tau_{tr}$  на величину  $\tau_0$  напряжения Пайерлса – Набарро сопротивления движению дислокаций).

Подстановка  $\tau_{tr}$  из (33) в (28) с учетом  $\Delta f \sim \tau_{tr} \sim \frac{\tau_i + \tau_0}{\sqrt{D}}$  и приводит к (32),

причем отклонение  $M_{S\infty}$  от  $T_0$  пропорционально  $\tau_0$ .

Оба допущения представляются не совсем корректными при интерпретации явлений, связанных со спонтанными (при охлаждении или нагреве) реконструктивными мартенситными превращениями. Прокомментируем первое допущение. В связи с обсуждением природы энергетических вкладов в (26) уже акцентировалось внимание на необходимости учета кинетической энергии (слагаемые  $Q'$  и  $E_{th}$ ). Поскольку в сплавах, обнаруживающих автокаталитический характер превращения, отклонение  $M_S$  от температуры равновесия фаз  $T_0$  достигает сотен градусов, превращение идет в неравновесных условиях, и процессы носят необратимый характер. Поэтому изменение свободной энергии строго превышает (и намного) совершаемую работу (равенство имеет место только для обратимых изотермических процессов). Значит, полагать  $\Delta f$  пропорциональной  $\tau_{tr}$  нельзя. Ясно, что учет теплового эффекта  $Q'$  приведет к дополнительному снижению  $M_{S\infty}$  (увеличению отклонения от температуры  $T_0$ ).

Прокомментируем второе допущение. Как отмечалось в [26], напряжение автокаталитического зарождения  $\tau$  считается превышающим (на несколько порядков) величину  $\tau_i$ , причем значения  $\tau_i$  и  $\tau_{tr}$  лежат в упругой области. На наш взгляд, требование

$$\tau \gg \tau_{tr}, \quad (34)$$

верное само по себе, носит искусственный и избыточный характер, так как базируется на дислокационных моделях зарождения и роста, в которых предполагается возможность создания и существования равновесного зародыша (например, в форме сфероида, обрамленного системой дислокационных петель). Активация или создание (что еще более затруднительно) подобного зародыша, как раз и требуют высоких напряжений. Разумеется, все разновидности подобных моделей не в состоянии объяснить и высокую (сверхзвуковую) скорость роста кристаллов мартенсита охлаждения. Напомним также, что термодинамические соображения, направленные на интерпретацию закономерностей формирования ансамблей мартенситных кристаллов нацелены на трактовку таких ансамблей как самоаккомодированных конгломератов, обеспечивающих минимизацию энергии упругих искажений. Упругим считается и  $\tau_{tr}$ , таким образом, необходимость выполнения сильного неравенства (34) для запуска автокаталитической реакции маловероятна. Скорее всего, речь идет о соотношении  $\tau \sim \tau_{tr}$ . Тем не менее, налагающиеся упругие поля ансамблей кристаллов в превратившемся зерне могут создавать упругие напряжения в соседних зернах (в том числе и вида  $\tau \sim \tau_{tr} \sqrt{D}$ ), стимулируя появление кристаллов мартенсита напряжения, обладающих тем же, что и кристаллы мартенсита охлаждения, механизмом управления ростом (о реалистических сценариях автокаталитической реакции в динамической теории см. ниже п. 3.2).

Кроме того, выполнение сильного неравенства (34) означало бы, что первый кристалл мартенсита охлаждения (возникший спонтанно) способен создать условия для формирования мартенсита деформации не только в собственном, но и в соседнем зерне. В условиях автокаталитического “взрыва”, когда из-за теплового эффекта локальные температуры могут существенно превысить  $M_s$ , а предполагаемый в (34) уровень напряжений превышает предел текучести, на первый взгляд, имеются основания утверждать, что в автокаталитической реакции создается такая потенциальная возможность. Однако эта возможность базируется на квазистатической картине внутренних полей напряжений, оказывающейся, скорее всего, физически не востребованной благодаря реализации высокоскоростных волновых сценариев роста кристаллов. В соответствии с принципом причинности и концепцией близкодействия влияние превращения в одном зерне может проявиться в соседних зернах не раньше, чем туда придет волновой процесс.

Ниже, в п. 3.5, будет показано, что второе допущение, использованное при выводе (32), имеет вполне естественное объяснение в рамках динамической теории. Учитывая, однако, принципиальный характер всех понятий, связанных с процессом зарождения новой фазы, мы сознательно стараемся акцентировать внимание, как на слабых, так и на сильных сторонах сложившихся представлений.

### 3.2. Сценарии эстафетного превращения в зернах с позиций волновой теории роста мартенсита

С позиций волновой теории роста мартенситного кристалла автокаталитический механизм формирования ансамбля кристаллов внутри монокристаллов или крупных зерен [44 - 47] обусловлен либо трансформацией УВП при взаимодействии с препятствиями, либо появлением новых дислокационных центров зарождения вблизи образующихся кристаллов мартенсита при релаксации решетки, потерявшей устойчивость и испытывающей деформацию превращения. Напомним, что значения деформации превращения относятся к диапазону пластических деформаций. Возбужденные состояния, стимулирующие быстрый рост кристаллов, возникают, как уже говорилось выше, в упругих полях этих отдельных дислокаций. При автокаталитическом запуске роста в соседних зернах представляются естественными, по крайней мере, три сценария. Во-первых, в результате преломления на границе зерна, имеющего благоприятную для продолжения распространения УВП разориентировку решетки, УВП продолжает распространение, стимулируя рост кристалла в контактирующем зерне (сценарий 1). Соответствующая схема представлена на рис. 4.

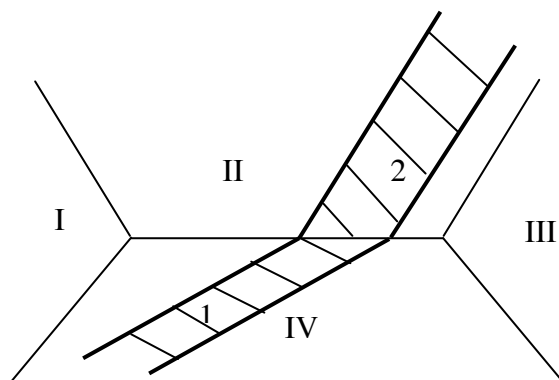


Рис. 4. Сценарий 1 эстафетного роста: УВП преломляется на границе между зернами II и IV, инициируя рост кристалла 2

Ясно, что это наибо́льший вариант запуска эстафетного роста кристалла в соседнем зерне. Во-вторых, при неблагоприятной для продолжения распространения УВП разориентировке решеток соседних зерен, волны, испытавшие рассеяние на границе, могут стимулировать (см. рис. 5) запуск роста кристаллов в окрестностях имеющих в зерне дислокационных центров зарождения (их можно назвать собственными).

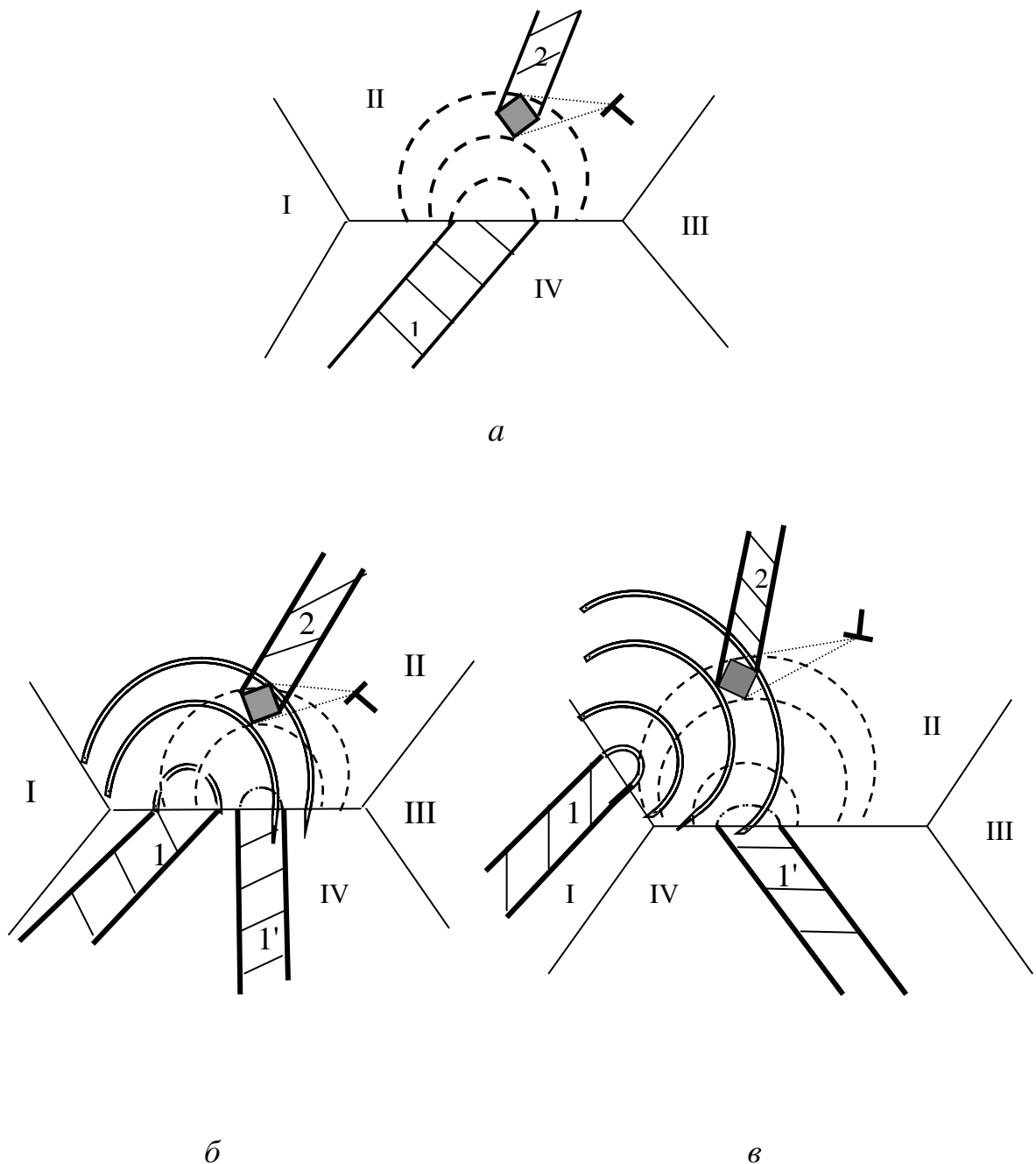


Рис. 5. Схемы эстафетного роста по сценарию 2. Начальное возбужденное состояние для старта роста кристалла 2 в упругом поле дислокации инициируется волнами, приходящими от границ зерна: *a* - инициация одной волной; *б* и *в* – инициация двумя волнами

При этом возможен вариант возбуждения, обусловленный УВП отдельного мартенситного кристалла, рост которого остановлен границей зерна (рис. 5а), а также разнообразные варианты наложения волновых пучков, порожденных мартенситными кристаллами, остановленными участком границы с одним и тем же зерном (рис. 5б) или участками



границы с разными зернами (рис. 5в). Этот сценарий (сценарий 2) соответствует наиболее быстрой динамической реализации эстафетного запуска мартенсита напряжения, поскольку сверхзвуковая скорость роста кристаллов приводит к тому, что именно УВП и несет информацию об изменяющемся упругом поле. В-третьих, в прилегающих к границе областях при взаимодействии мартенситного кристалла с границей могут рождаться дислокации, становящиеся центрами зарождения новых мартенситных кристаллов (см. рис. 6).

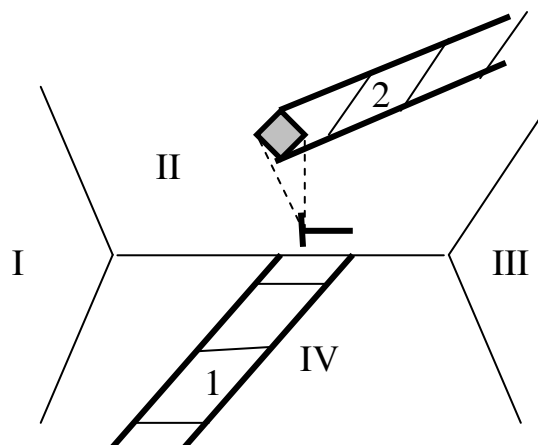


Рис. 6. Схема эстафетного роста по сценарию 3. Взаимодействие кристалла 1 с границей между зернами IV и II приводит к рождению в зерне II дислокационного центра зарождения для запуска роста кристалла 2

Количественные аргументы, в пользу реализации первого сценария, могут быть получены при комплексном морфологическом анализе пары состыкованных на границе зерна мартенситных кристаллов с близкими профилями сечения в области сопряжения. Дополнительно должны быть установлены: кристаллографические ориентировки габитусов кристаллов и границы зерна; разориентировки решеток контактирующих зерен; структурная модель границы, а также упругие модули решетки исходной фазы. Аналогичная информация, дополненная данными о собственных дислокационных центрах зарождения в контактирующих зернах, позволит идентифицировать и другие сценарии.

Разнообразие сценариев реализации эстафетного межзеренного превращения (с вполне возможными их комбинациями без жестко детерминированной последовательности) может сопровождаться (и сопровождается) заметным разбросом экспериментальных точек начала мартенситного превращения в поликристаллических образцах. Действительно, достаточно сложно изготовить необходимый представительный ансамбль образцов: с однородным по образцу размером

зерна; однородным распределением дислокационных центров зарождения в зернах; без флуктуаций состава; с воспроизведением одних и тех же значений температуры  $M_S$ . Поэтому для поликристаллических образцов, изготовленных, казалось бы, с помощью одной и той же последовательности одних и тех же операций, невозможно избавиться от разброса значений даже в дифференциальной методике, предполагающей единственный (первый) акт регистрации  $M_S$  на каждом из серии “идентичных” образцов ансамбля. Невозможно в связи с этим ожидать и одинакового уровня интенсивности первого регистрируемого сигнала от “идентичных” образцов, складывающегося из сигналов от кристаллов в зернах, испытывающих превращение. Поэтому близкий разброс значений можно ожидать и при фиксации нескольких последовательных автокаталитических “микровзрывов” на одном и том же образце. Методика регистрации  $M_S$  по сигналам от “микровзрывов” примыкает к дифференциальной, имея дело с более высоким уровнем сигнала и отражая зависимость  $M_S$  от значимых физических параметров системы в рамках общего термодинамического ограничения  $M_S < T_0$ . В случае интегральных методик, так или иначе связанных с регистрацией “макровзрыва”, значительную роль играет механизм автокаталитической реакции. Напомним, что после “макровзрыва”, сопровождающегося превращением десятков процентов исходного объема аустенита, последующее подрастание превратившегося объема требует заметного переохлаждения по отношению к стартовому значению  $M_S$ . В свете обсуждаемого эффекта влияния размеров зерна на  $M_S$  этот факт качественно легко объясняется сокращением размера  $L_{min}$  областей аустенита свободных от дефектов, так как практически в каждом зерне имеются мартенситные кристаллы, делящие остаточный аустенит на сегменты с размерами  $L_{min} < D$  (разумеется, сказывается и уровень возникших упругих напряжений). Представляется естественным связать существование конечной температуры  $M_f$ , переохлаждение ниже которой не сопровождается дальнейшим приращением мартенсита (при сохранении заметной доли непревратившегося объема), достижением критического (малого) размера фрагментами остаточного аустенита между возникшими мартенситными кристаллами.

В результате для атермической макрокинетики превращения, когда быстро возникают ансамбли кристаллов, обладающие статистическим подобием в разных поколениях, можно предложить простой алгоритм оценки доли образуемого мартенсита, обсуждаемый в главе 6.

### 3.3. Пример обработки экспериментальных данных с помощью зависимостей, включающих критический размер зерна

На рис. 7 и рис. 8, взятых из [25], приведены данные измерений температур начала мартенситных превращений для сплавов двух составов Fe–31Ni и Fe–31Ni–0.28C.

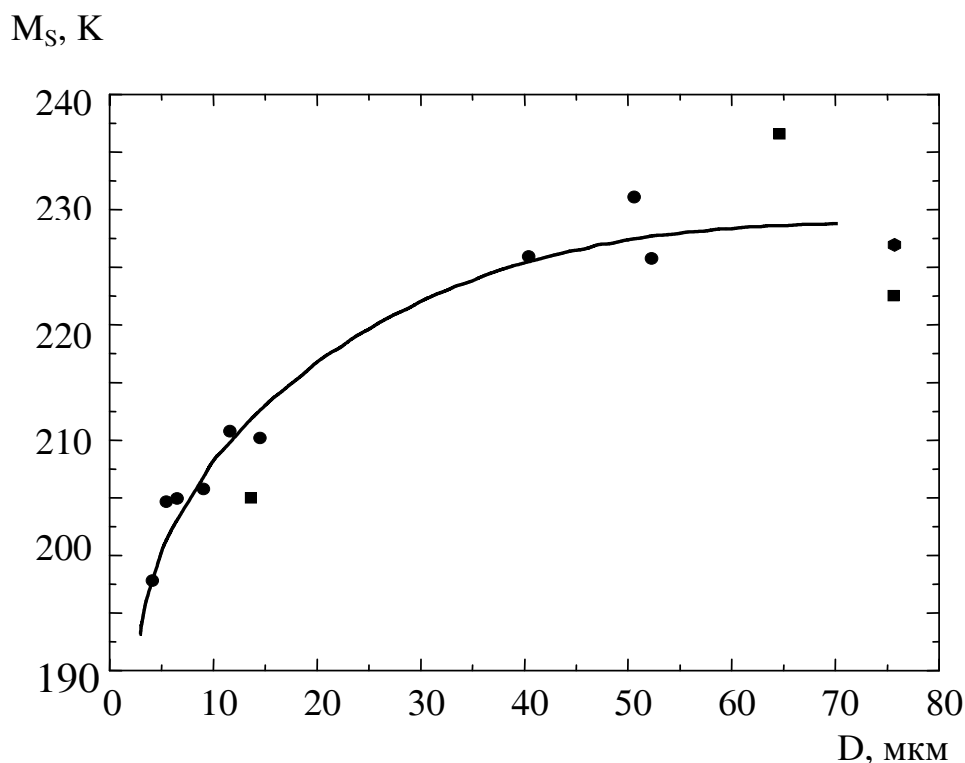


Рис. 7. Наблюдаемая [25] зависимость  $M_S(D)$  для Fe–31Ni при  $M_{S(\infty)} \approx 230\text{K}$

Хорошо виден заметный разброс данных, полученных авторами исследования. Кроме того, видны и отличия их результатов от значений, полученных другими исследователями (даже при измерении температуры  $M_S$  в крупных зернах и монокристаллах – температуры  $M_{S\infty}$  в наших обозначениях). Поэтому представляется целесообразной обработка данных с помощью серии кривых, покрывающих все множество наблюдаемых точек.

Для иллюстрации на рис. 9 и рис. 10 на фоне тех же, что и на рис.7 и рис. 8, экспериментальных точек приведены зависимости (30) и (32), к которым для сравнения добавлена зависимость:  $M_S(D) = M_{S\infty} \sqrt{1 - D_c/D}$ , обсуждаемая в гл.4.

На рис. 9 кривые соответствуют трем значениям параметра  $M_{S\infty}$  (225, 230, 235)К при трех значениях параметра  $D_{c1}$  (0.7, 1, 1.5)мкм. На рис. 10, соответственно,  $M_{S\infty}$  имеет значения (155, 165, 175)К, а  $D_{c2}$  –

(7, 10, 15) мкм. Как и следовало ожидать, экспериментальные точки укладываются в области, ограниченные крайними линиями семейств кривых.

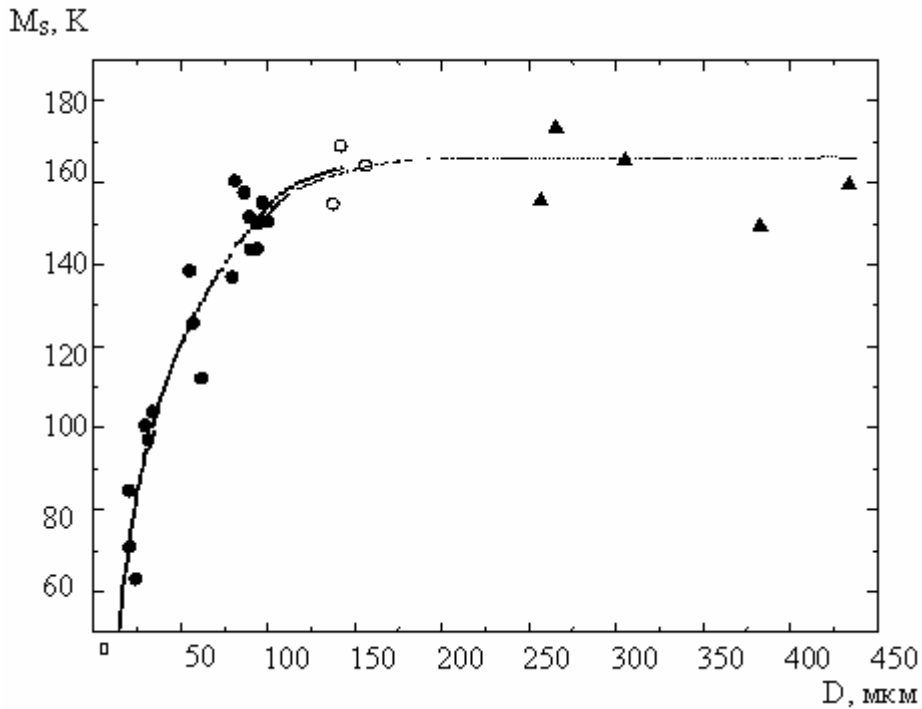


Рис. 8. Наблюдаемая [25] зависимость  $M_S(D)$  для Fe-31Ni-0.28C при  $M_{S(\infty)} \approx 165\text{K}$

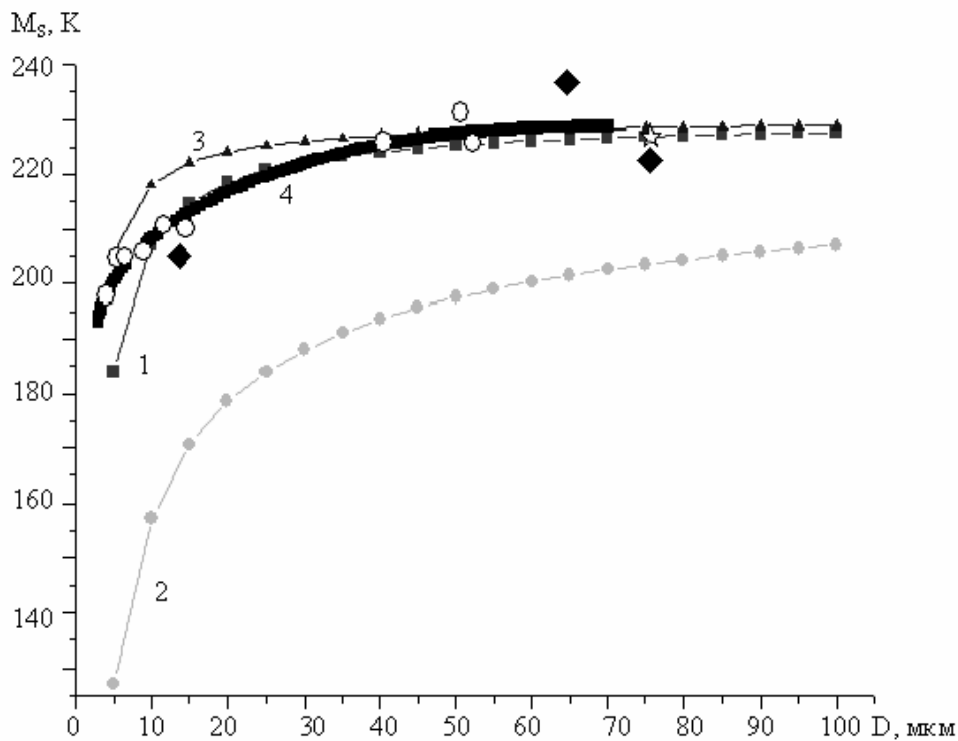


Рис. 9. Графики зависимости  $M_S(D)$  для Fe-31Ni при  $M_S(\infty) = 230\text{K}$  и  $D_C = 1\text{мкм}$ : 1)  $M_S(D) = M_{S\infty}(1 - D_C/D)$ ; 2)  $M_S(D) = M_{S\infty}(1 - \sqrt{D_C/D})$ ; 3)  $M_S(D) = M_{S\infty}\sqrt{1 - D_C/D}$ ; 4) эксперимент [25]

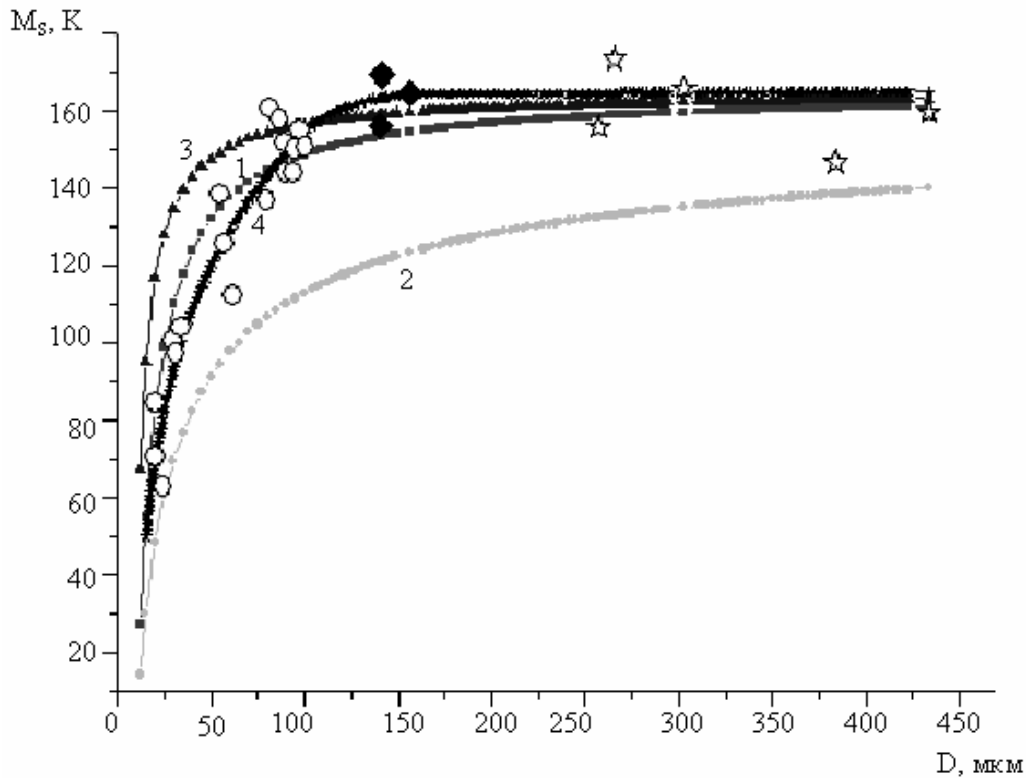


Рис. 10. Графики зависимости  $M_S(D)$  для Fe-31Ni-0.28C при  $M_{S(\infty)}=165\text{K}$  и  $D_c=10\text{ мкм}$ : 1)  $M_S(D) = M_{S\infty}(1 - D_c/D)$ ; 2)  $M_S(D) = M_{S\infty}(1 - \sqrt{D_c/D})$ ; 3)  $M_S(D) = M_{S\infty}\sqrt{1 - D_c/D}$ ; 4) эксперимент

Интересно, что при одних и тех же значениях  $D_c$  в области  $D \rightarrow D_c$  вид кривых, соответствующих всем трем зависимостям, практически совпадает. Различия проявляются, главным образом, при подходе к области критических значений, причем зависимость (32) в наибольшей степени отклоняется от предложенной в [25] экспериментальной кривой. Разумеется, возникает вопрос о физической природе влияния изменения состава сплава на резкое изменение величины  $D_c$  (значения  $D_{c1}$  и  $D_{c2}$  отличаются на порядок). Не менее интересен и вопрос о возможности построения теории, способной не только дать асимптотические оценки, но и воспроизвести форму кривых, предложенных в [25].

### 3.4. Интерпретация зависимости $M_S(D) \sim (1 - \sqrt{D_c/D})$ при учете поля дислокационного скопления и предварительное обсуждение результатов

Продолжая анализ, начатый в п. 3.1, заметим, что обоснование зависимости (32) исключительно межзеренным эстафетным характером мартенситной реакции ведет к внутреннему противоречию приведенной в п. 3.1 аргументации. Действительно, если единственный кристалл

способен породить автокаталитическую реакцию (а это вполне вероятно, благодаря сценариям волнового эстафетного роста), то причинно следственная связь требует, чтобы именно зависимость от размера зерна условий зарождения первого кристалла определяла зависимость  $M_S$  ( $D$ ).

Интересно, что, используя соотношение масштабов (16), можно дать трактовку с энергетических позиций не только зависимости (30), но и (32). Допустим, что отдельные зерна поликристаллических образцов, содержат, в силу предыстории изготовления, скопления дислокаций. Тогда (в соответствии с замечанием, завершающим п. 3.1) поля скоплений по отношению к областям зарождения в соседних зернах (область зарождения в зерне выделяется, как обсуждалось в п. 3.1, упругим полем собственного центра зарождения) играют роль внешнего поля, способного совершать работу по созданию межфазной границы. Значит, удельная (на единицу объема) поверхностная энергия, связанная с образованием цилиндрического зародыша, может оцениваться по формуле

$$\Delta f_s \approx \frac{\tau S}{V}. \quad (35)$$

Подставляя в (35)  $\tau \sim \sqrt{D}$  (согласно (23)),  $S/V \sim 1/d_m$  (согласно (13)) и учитывая, что  $d_m \sim 10^{-2}D$  (согласно (16)), получаем

$$\Delta f_s \sim \frac{1}{\sqrt{D}}. \quad (36)$$

Подстановка (36) в (26) вместо слагаемого  $E_S S/V$  позволяет вместо зависимости (30) получить (32). При этом формально все сводится к замене параметра  $E_S$  в соотношениях (26, 27), (29 - 31) величиной  $\tau$  (23), и отпадает надобность в использовании аналогии между упругим полем ансамбля мартенситных кристаллов и реальным полем плоского скопления дислокаций, запертых в зерне. Соответственно, закономерность Холла-Петча проявляется как непосредственное следствие существования дислокационных скоплений. Таким образом, вывод зависимости (32) совсем не обязательно связывать с механизмом эстафетного межзеренного роста.

Следовательно, обе зависимости (30) и (32), могут быть связаны с классическим для всех фазовых переходов первого рода обстоятельством – необходимостью затрат энергии на создание границы раздела фаз. Появление же размера зерна связано со специфическим для реализации начальной стадии мартенситного превращения соотношением масштабов (16), являющимся частным случаем соотношения (12). Именно при таком (по порядку величины) соотношении масштабов оптимизируется динамика

зарождения в упругом поле дислокации. Различие же зависимостей обусловлено особенностями возникновения начального возбужденного состояния в упругом поле дислокационного центра зарождения в отдельном зерне в отсутствие вклада в  $\Delta f_s$  поля скопления дислокаций (зависимость (30)) и с решающим вкладом такого поля в плотность поверхностной энергии (зависимость (32)). В случае, если при процедуре получения образцов использовалась интенсивная пластическая деформация, можно ожидать преимущественно проявления зависимости (32), так как и температура старта превращения и амплитуды колебаний в области появления возбужденного состояния должны быть выше именно в тех зернах, где имеется дополнительное снижение энергетического барьера за счет поля дислокационного скопления. В большинстве экспериментальных работ обработка данных признается удовлетворительно согласующейся с соотношением (32). Так, например, данные [28, 29], полученные на образцах, приготовленных по методу “деформация – отжиг” при рентгенографической регистрации объемной доли мартенсита  $V_m$  (с построением гистограмм распределения  $V_m$  по размерам зерен) подтвердили, по утверждению авторов, зависимость  $V_m \sim \frac{1}{\sqrt{d_{cp}}}$ , где  $d_{cp}$  – средний размер зерна. Делается вывод о том, что

именно средний размер зерен соответствует эффекту “запирания мартенситного превращения”. Вывод обосновывается наличием заметной доли непревратившихся зерен, размер которых превышает  $D_{cp}$  (гипотетически ожидалось, что превращение должно в первую очередь начинаться в наиболее крупных зернах). Однако возможны иные объяснения: либо внутри этих зерен нет подходящего собственного центра зарождения; либо они не попали в звено превращающейся эстафетной цепочки зерен; либо в окрестности этих зерен нет зерен со скоплением дислокаций. Но самое парадоксальное объяснение (с точки зрения традиционного подхода) может состоять в том, что именно в непревратившемся крупном зерне сохранилось (несмотря на отжиг) скопление дислокаций, препятствующее, в соответствии с критерием (12), зарождению в зерне, где скопление локализовано, и стимулирующее зарождение в соседних зернах, пусть и меньшего размера. Поскольку крупные зерна - наиболее вероятные места локализации самых “мощных” скоплений (в зернах “мощность” скопления может исчерпываться несколькими дислокациями), именно дефектную структуру крупных непревратившихся зерен необходимо наиболее тщательно исследовать, причем, в первую очередь тех крупных зерен, которые можно предположительно рассматривать как центры запуска превращения в прилегающем подмножестве зерен. Возможно, эти версии были проверены авторами и просто не отражены в тексте [28, 29]. Тем не менее, полезно

иметь в виду, что результаты [28, 29] допускают интерпретацию в рамках динамической теории зарождения в упругом поле отдельного дефекта, как причины наблюдаемой зависимости  $M_s(D)$  (более подробно см. в п. 3.5).

Возможно и объяснение, сохраняющее гипотезу о подобии полей запертых в зернах скоплений дислокаций и ансамблей кристаллов (недостаточно релаксированных в виду ограниченного объема зерна). Действительно, допустим, что зерна со скоплениями дислокаций отсутствуют, а чувствительность метода регистрации не позволяет фиксировать сигнал ни от первого образовавшегося кристалла (зарождающегося при температуре, соответствующей (30)), ни от ансамбля мартенситных кристаллов, образующихся в том же зерне. Если уровень выделившейся энергии недостаточен, а структура границ и разориентации решеток с соседними зернами неблагоприятны для развития сценариев межзеренного эстафетного волнового роста, то, допуская справедливость гипотезы о подобии полей, превратившееся зерно можно рассматривать как источник поля напряжений вида (23). Это поле будет способствовать формированию границы раздела фаз при зарождении в соседних зернах в упругих полях собственных дефектов зерен, повышая уровень амплитуд возбуждающихся колебаний. Тогда интенсивности управляющего волнового процесса становится достаточно для запуска эстафетных сценариев роста, что приводит к возрастанию сигнала над порогом чувствительности, и при регистрации обнаруживается зависимость (32). Подчеркнем, в этом случае, хотя и сохраняется гипотеза подобия, зависимость (32) связана снова с видом зависимости (36) поверхностной энергии, который соответствует классическому представлению о роли границы раздела фаз и существованию соотношения масштабов (16), входящему в аксиоматику динамической теории зарождения и роста мартенситного кристалла.

### **3.5. Интерпретация зависимости $M_s(D) \sim (1 - \sqrt{D_c/D})$ с позиций динамической теории и выводы относительно специфики механизма зарождения в зерне поликристалла**

Волновой аспект взаимодействия УВП с границей зерна в первом приближении естественно рассматривать, полагая, что элементы границы способны играть роль излучателей волн смещений. Очевидно, что в случае дислокационной модели границы дислокации и являются излучателями.

Однако даже для простейшей модели в виде стенки параллельных дислокаций сразу же возникают вопросы о некоторой детализации модели. Прежде всего, вопрос о величине сегмента между точками закрепления, задающего, согласно струнной модели [48, 49], характерную собственную частоту, поскольку интенсивность механизма переизлучения падающих на границу волн будет зависеть от соотношения частот падающего излучения



и собственного резонансного излучения дислокационного сегмента. Кроме того, подобная граница будет обладать выраженной избирательностью по отношению к направлению, задающему ориентацию наибольшего размера волнового фронта (коллинеарную векторному произведению скоростей  $v_1$  и  $v_2$ ). Разумеется, рассмотрение подобной модели, интересной, как в физическом плане, так и в методическом отношении, должно быть дополнено другими моделями, поскольку стенка параллельных дислокаций вряд ли обладает достаточной прочностью для запираения мартенситных кристаллов. Большой прочностью обладают границы в виде дислокационных сеток. Представляет интерес рассмотрение возбуждения колебаний границы как целого при взаимодействии с ней фронта УВП, один из размеров которого существенно меньше размера границы, соизмеримого с  $D$ . Объем зерна, прилегающего к границе, оказывается тогда в ближней волновой зоне колеблющейся границы и должен испытывать напряжения, спадающие медленнее, чем  $\frac{1}{r}$ , где  $r$  – расстояние от границы зерна.

Ясно, что перечисленные в сжатой форме варианты постановок задач представляют самостоятельный интерес, выходящий за рамки обсуждаемого вопроса о волновом механизме реализации межзеренного эстафетного роста и, в частности, зависимости (32). Для получения ответа на него в рамках динамической теории, достаточно весьма общих соображений, включая соотношение масштабов (16). Действительно, будем считать, что участок границы, с которым взаимодействует фронт УВП, представляет собой несколько параллельных дислокационных линий, накрываемых фронтом в форме вытянутого прямоугольника (одна из граней прямоугольного параллелепипеда на рис. 1). Падение фронта волны отклоняет дислокации от положений равновесия на некоторую величину, задающую начальные амплитуды колебаний  $u_0 \equiv u(t_0)$ . Колебания дислокаций сопровождаются излучением цилиндрических волн. Применяя закон сохранения испущенной энергии к расширяющейся цилиндрической волне с начальным радиусом  $r_0 \equiv r(t_0)$  кривизны волнового фронта в два различных момента времени  $t_0$  и  $t > t_0$ , получаем

$$u_0^2 r_0 = u^2 r, \quad u \equiv u(t), \quad r \equiv r(t). \quad (37)$$

Отсюда следует, что

$$u(t) = u_0 \sqrt{r_0 / r(t)}. \quad (38)$$

В соответствии с исходным утверждением о причине возбуждения цилиндрических волн следует принять  $r_0 \approx d_m/2$ . Тогда, учитывая (16), из (38) находим:

$$u(t) \sim 0.1u_0 \sqrt{\frac{D}{r(t)}}. \quad (39)$$

Соотношение (39) дает корневую зависимость амплитуды волны от размера зерна. Напомним, что закон  $\sqrt{D}$  фиксируется в соотношении Холла-Петча (23) для напряжений, создаваемых скоплениями дислокаций. Собственно, соотношение аналогичное (23) и возникает после деления амплитуды на характерный пространственный масштаб (порядка  $\lambda/2$  - половины длины волны) и применения закона Гука, если  $\lambda/2$  не зависит от размера зерна. Однако в случае возникновения начального возбужденного состояния в упругом поле отдельной дислокации, локализованной в зерне, масштаб  $\lambda/2$  зависит от  $D$ :

$$d_m \sim \lambda/2 \sim 10^{-2} D. \quad (40)$$

Тогда из (39) и (40) для деформации  $\varepsilon(t)$  следует:

$$\varepsilon(t) \sim \frac{10u_0}{\sqrt{D \cdot r(t)}}. \quad (41)$$

Таким образом, если цилиндрическая волна после преломления не слишком далеко ушла от границы зерна, она способна активировать возбужденное состояние собственного дислокационного центра зарождения, реализуя один из перечисленных в п. 3.2 вариантов сценария 2. В комбинации с аналогичными волнами, приходящими от границ с соседними зернами, могут реализоваться и другие варианты сценария 2. Мы говорим о сценарии 2, поскольку в рассмотренном примере излучение цилиндрической волны границей соответствовало случаю нормального падения на границу только для одного из двух налагающихся волновых пучков (вектор  $\mathbf{v}_1$  перпендикулярен к границе), задающих структуру УВП. Второй же волновой пучок со скоростью  $\mathbf{v}_2$ , перпендикулярной к  $\mathbf{v}_1$ , распространяется параллельно границе и не испытывает преломления. Очевидно, что для реализации сценария 1, предполагающего равноправные возможности преломления для двух составляющих УВП, необходимо (но недостаточно), чтобы углы падения волновых пучков (углы между скоростями  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}_2$  и нормалью к границе зерна) были меньше  $\pi/2$ . Уместно отметить, что из-за разориентации решеток контактирующих зерен и упругой анизотропии решетки показатели преломления для пучков с ортогональными скоростями  $\mathbf{v}_1$  и  $\mathbf{v}_2$  будут разными. Поэтому сохранение

строгой ортогональности скоростей волн  $\mathbf{v}'_1$  и  $\mathbf{v}'_2$  после преломления возможно лишь при определенных углах падения и разориентировках решеток зерен. Заметим, что запрет на преломление волнового пучка со скоростью  $\mathbf{v}_2$  параллельной границе базируется на представлении пучка плоскими волнами. Ясно, однако, что при реализации возбужденного состояния в виде колеблющегося вытянутого параллелепипеда это представление является приближенным. Так что запрет не носит абсолютного характера.

Вид пороговой деформации (41) позволяет объяснить (по крайней мере, для вариантов сценария 2) зависимость (32) естественным образом, не привлекая внутренне противоречивых построений и не прибегая к неоправданно завышенным требованиям (34).

С позиций волновой теории зависимость (32) может рассматриваться как частный вариант общего требования превышения деформациями управляющего волнового процесса пороговых значений, сопровождающегося нарушением устойчивости решетки исходной фазы, с учетом специфики, связанной с влиянием границы зерна. В свете проведенного рассмотрения следует отметить, что наблюдаемая картина локализации зарождения вблизи границ зерен в отоженных поликристаллических образцах представляется совершенно естественной. Действительно, вблизи границы возникают условия своеобразного резонансного отклика флуктуирующего упругого поля собственного дислокационного центра зарождения на возбуждение колебаний в границе, причинами которого могут быть как внутризеренная так и внешняя (в соседнем зерне) флуктуации. Говоря о внутризеренной флуктуации, мы, прежде всего, имеем в виду возникновение в поле дислокации возбуждений с пространственной конфигурацией и фазировкой смещений, характерной для начала роста мартенситного кристалла. Распространение подобного возмущения к близко расположенным границам зерна, переизлучение его границами и возвращение к стартовой окрестности флуктуирующего поля дефекта может сопровождаться (при благоприятной фазировке налагаемых смещений) нарастанием амплитуд колебаний. То есть речь идет о формировании специфических для данных условий объемных стоячих волн, проверяющих на устойчивость исходную решетку. Следует иметь в виду, что волновые пучки, излучаемые колеблющимся вытянутым параллелепипедом, могут в ходе распространения трансформироваться, уподобляясь цилиндрическим волнам, несущим деформацию (41).

Значит, зависимость (32) может быть следствием конкретного варианта зарождения мартенситного кристалла внутри зерна в упругом поле собственного ДЦЗ, динамически взаимодействующего с границей зерна, а не межзеренной эстафеты (пусть и по скоростным волновым сценариям).

Предложенная качественная картина специфики зарождения в зернах существенным образом дополняет известные аргументы о границе как источнике дислокаций [30] и смягчении частот колебаний вблизи плоского дефекта [50]. К этим аргументам примыкает и мысль о том, что вблизи границы может максимально проявить себя упругое поле дефектов, локализованных в соседнем зерне, облегчая процесс зарождения.

О важной роли именно дислокационной границы, по-видимому, свидетельствует и наблюдаемое смещение области зарождения в центр кристаллита, окруженного аморфной матрицей [51], [52]. Существенную роль, наверное, играет и округлая форма кристаллита. Ясно, например, что для возникновения начального возбужденного состояния в форме вытянутого параллелепипеда максимальный размер задается диаметром округлого зерна, проходящим через центр кристаллита. Отметим, наконец, что определяющий вклад в потерю устойчивости исходной фазы в этом случае может дать возбуждение низкочастотных мод собственных колебаний кристаллита, как целого, поскольку максимальная деформация при таких колебаниях достигается в его центральной части. Поэтому, на наш взгляд, наблюдаемое смещение области зарождения имеет, главным образом, динамическую природу.

В общем случае не исключено, что для детального описания механизма формирования автолокализованных состояний с повышенным уровнем амплитуд смещений (а главное, с повышенным уровнем деформаций в выделяемом объеме), как и для получения результирующего суперпозиционного поля колеблющейся границы, потребуется учесть ее фрактальную структуру.

Заметим, что использование методики, с огрубленным порогом регистрации (см. обсуждение в конце п. 3.4) представляет самостоятельный интерес, поскольку гарантирует регистрацию именно актов появления автокаталитических ансамблей, охватывающих цепочки зерен. В связи с предложенной волновой интерпретацией понятно, что для активации возбужденных состояний в соседнем зерне выгодно синхронное динамическое взаимодействие с границей ансамбля кристаллов, возникающих в отдельном зерне при автокаталитическом росте (типичный пример - зигзагообразные ансамбли). Помимо возможного кумулятивного эффекта (для возбуждения колебания границы как целого) основную роль, на наш взгляд, играет увеличение числа вариантов преломления УВП, увеличивающих вероятность активации возбужденных состояний в соседних зернах, благоприятных для роста мартенситных кристаллов.

### 3.6. Дополнительная экспериментальная информация, существенная для постановки задачи

Напомним, что в [25], как и в [28, 29], наблюдались размерные эффекты, зависящие от химического состава сплава.

В [28, 29] закалка всех поликристаллических образцов осуществлялась при температуре кипения жидкого азота (77К). Температура  $M_s$  не измерялась, а доля  $V_M$  превратившегося объема определялась путем сравнения ширин линий рентгеновских спектров от характерных плоскостей  $\gamma$  и  $\alpha$  фаз. В данном варианте интегральной методики фактически изучается продукт “взрывной” автокаталитической реакции. Как отмечалось в [53, 54], для формирования границы раздела фаз достаточно степени переохлаждения в несколько десятков градусов, а реальное переохлаждение превышает эту величину в пять и более раз. Выделяющееся тепло, поднимает локальную температуру, приближая систему к точке  $T_0$  равновесия фаз. В этих условиях идет обрастание тонкопластинчатой центральной двойникованной зоны (мидриба) массивной линзовидной “шубой”, дающей основной вклад в фиксируемую долю объема, испытавшего превращение. Именно такой картине соответствует регистрация значений  $d_{cp}$ , превышающих значение  $D_{cp}$ , при достижении которого подавляется мартенситное превращение. Напротив, в любой дифференциальной методике температура  $M_s$  (в идеале) соответствует акту быстрого формирования именно центральной зоны мартенситного кристалла. В силу сверхзвуковой скорости роста процесс практически является адиабатическим и соответствует истинной начальной температуре мартенситного превращения, далекой от точки  $T_0$ . Параметр  $D_c$  является предельным значением размера зерна, соответствующим обращению в нуль температуры  $M_s$ . Температуру, при которой  $V_M(D_{cp})=0$  следует рассматривать как одну из точек зависимости  $M_s(D)$  для фиксированного состава сплава, поскольку при понижении температуры и выполнении равенства  $D=D_{cp}$  доля превращающегося объема  $V_M(D)$  станет отличной от нуля. Обработка данных в п. 3.3 подтверждает эту трактовку, поэтому для заданного состава сплава можно ожидать уменьшения  $D_{cp}$  при приближении к абсолютному нулю температуры. Имея в виду данные [29] о  $D_{cp}$ , полученные при сравнительно низкой температуре  $M_s^*(D)=77K$ , можно ожидать близости  $D_c$  и  $D_{cp}$ , но при выполнении неравенства  $D_c < D_{cp}$ . Более точную информацию об отношении  $D_{cp}/D_c$  можно получить, найдя аналитическую зависимость для  $M_s(D)$ . Таким образом, возникает задача вывода аналитической зависимости  $M_s(D)$ , которая, в частности, позволяет для разных составов одной и той же температуре  $M_s^*(D)=77K$  сопоставить разные  $D_{cp}$ .

После сделанных разъяснений понятно, что следует различать “истинные” температуры  $M_{S\infty}^{tr}$  и  $M_S^{tr}(D)$ , и “эффективные”  $M_{S\infty}^{ef}$  и  $M_S^{ef}(D)$ . “Истинные” температуры фиксируются малоинерционными высокочувствительными дифференциальными методиками (например, измерение электросопротивления с использованием разрешения по времени на уровне  $10^{-8}$ с), они максимально удалены от  $T_0$ , за ними стоят зависимости условия оптимальной генерации управляющего волнового процесса. “Эффективные” температуры связаны с появлением значительных объемов новой фазы. Они регистрируются интегральными методиками. Интерпретация этих температур имеет прямое отношение, с одной стороны, к огрубленным термодинамическим оценкам, а с другой стороны, открывает возможность вывода формул для наблюдаемых макровеличин (например, доли превратившегося объема) на основе динамических моделей формирования ансамблей мартенситных кристаллов. Очевидно, что, при верном понимании, полезной (и взаимно дополнительной) является информация, полученная разными методиками.

В табл.1 приведены данные с указанием интервалов значений размеров зерен  $d_{cp}$  (по графическим значениям в [29]), использовавшиеся для определения  $D_{cp}$ . Аббревиатуры ДО и ЗР: “деформация-отжиг” и “закалка из расплава”- соответствуют способам приготовления образцов. Обработка велась в предположении, что выполняется зависимость (32). Уточним, на графике в [29]  $D_{cp} \approx 1.2$  мкм соответствует 30.5%Ni.

По существу, охватывался небольшой диапазон  $d_{cp}$  в области размеров зерен (для данного состава сплава), где становится заметным отклонение данных от картины типичной для крупных зерен. В этом отношении приведенные в [25] зависимости  $M_s(D)$ , охватывающие не менее двух порядков по масштабу (от единиц до сотен мкм), являются более представительными.

Таблица 1

## Информация об образцах, исследованных в [29]

состав	обработка	$D_{cp}$ , мкм	интервалы $d_{cp}$ , мкм	примечание
29%Ni	ДО	0.3	1.6 ÷ 6.2	экстраполяция графические данные
30%Ni	ДО	1.2	1.6 ÷ 6.2	
31%Ni	ДО	1.8		
32%Ni	ДО	3.5	4 ÷ 6.3	
32%Ni	ЗР	0.07	0.7 ÷ 2.4	закалка из расплава

Данные двух последних строк показывают, что при неизменном химическом составе и одинаковых средних размерах зерен  $d_{cp}$  переход от зерен, прошедших операцию отжига, к зернам, полученным прямой

закалкой из расплава, сопровождается резким уменьшением запирающего значения  $D_{cp}$ . Экстраполяционная оценка для системы Fe–32%Ni, базирующаяся на интервале значений размеров зерен  $0.7 \text{ мкм} \leq d_{cp} \leq 2.4 \text{ мкм}$ , дает  $D_{cp} \approx 70 \text{ нм}$ . При этом наблюдается снижение температуры  $M_s$  примерно на (40–50)К. Таким образом, имеет место и структурная зависимость величины  $D_{cp}$ . Интересно, что в предыдущей работе тех же авторов [28] влияние размера зерен (на интервале  $2 \text{ мкм} \leq d_{cp} \leq 8 \text{ мкм}$ ), полученных закалкой из расплава, на блокирование мартенситного превращения не было обнаружено. В [29] отмечается несовершенство и неравновесность границ, практически не оказывающих сопротивления росту мартенситных кристаллов. Существенных изменений в морфологии возникающих кристаллов не наблюдалось, за исключением утолщения кристаллов, ведущего к увеличению плотности заполнения объема образца новой фазой. С позиций динамической теории это означает, что существенного изменения масштабного фактора (12) ((16)–частный случай (12)) для состояния, полученного закалкой из расплава, не произошло. Границы в состоянии ЗР не являются объектом, способным обеспечить повышение в объеме зерна предела упругости или локализацию растущего мартенситного кристалла. Это означает, что формально выполненная оценка  $D_{cp} \approx 70 \text{ нм}$  относится не к реальному размеру зерна, “запирающего” мартенситное превращение в состоянии ЗР, а возможно, к пространственному масштабу фрагментов аустенита, оставшихся между мартенситными кристаллами после макроскопического автокаталитического “взрыва” (в конце п. 3.2 этот вопрос уже затрагивался в связи с существованием температуры  $M_f$ , см. также окончание п. 5.3).

Разумеется, при ориентировочных термодинамических оценках можно делать некоторые качественные выводы. Например, согласно (30), отношение

$$\frac{D_{c2}}{D_{c1}} = \frac{E_{s2} T_{02} M_{s\infty 1} Q_1}{E_{s1} T_{01} M_{s\infty 2} Q_2} \approx \frac{E_{s2} Q_1}{E_{s1} Q_2}. \quad (42)$$

При известном соотношении критических размеров зерен, измеряя тепловые эффекты, с помощью (42) можно оценить отношение поверхностных энергий. В любом случае, подобные соотношения сужают степень неопределенности значений рассматриваемых макропараметров. Пусть  $D_{c2}/D_{c1}$  близко к 10, как для систем Fe–31Ni ( $D_{c1} \approx 1 \text{ мкм}$ ) и Fe–31Ni - 0.28C ( $D_{c2} \approx 10 \text{ мкм}$ ). Добавление углерода, как известно [14, 55], существенно стабилизирует исходную ГЦК фазу, так что выполнение неравенства  $E_{s2} > E_{s1}$  в качественном отношении не вызывает сомнений. Однако утверждать, что отношение удельных поверхностных энергий дает основной вклад в величину  $D_{c2}/D_{c1}$  вряд ли возможно, тогда как

неравенство  $0.1 < Q_2/Q_1 < 1$  представляется корректным. Конечно, это недостаточно информативные и не слишком надежные оценки применительно к реконструктивным превращениям, протекающим в существенно неравновесных условиях. Поэтому ниже мы сосредоточим внимание на динамической теории, обладающей гораздо более широким спектром возможностей и адекватно отражающей основные особенности роста кристаллов в сплавах на основе железа.

В максималистской постановке задачи речь может идти о выводе (на основе аксиоматики динамической теории) формулы для  $M_s^{tr}(D)$ , из которой в качестве следствия получается формула для  $D_c$ , способная объяснить (качественно и количественно) наблюдаемые особенности влияния химического состава и структуры на критический размер зерна.



---

---

## Глава 4

### **Зависимость температуры, оптимальной для генерации управляющих волн неравновесными электронами, от диаметра зерна**

Поскольку в обсуждавшихся выше системах Fe–Ni и Fe–31Ni–0.28C, по нашему мнению, управляющий волновой процесс поддерживается неравновесной электронной подсистемой, имеется возможность дать интерпретацию наблюдаемых особенностей зависимостей  $M_S(D)$  с иной (микроскопической) точки зрения, используя выводы теоретического анализа [1, 4]. Это представляется существенным, так как при макроскопической термодинамической трактовке невозможно понять особенности поведения системы, теряющей устойчивость и находящейся в сильно неравновесных условиях. Равновесная термодинамика (квазитермостатика), задавая рамки соотношений двух форм изменения энергии (теплота и работа), не отслеживает особенностей распределения энергии по степеням свободы в ходе установления равновесия. Поэтому именно кинетические факторы и механизмы распределения энергии выступают на передний план в случае быстропротекающих процессов, обеспечивающих достижение хотя бы метастабильных состояний. Во избежание недоразумений, уточним, что введение, даже для качественных рассуждений, понятия внутренних напряжений означает отход от чисто равновесной термодинамики, оперирующей только внешними термодинамическими параметрами макросостояния, поэтому приведенные выше рассуждения, касающиеся автокаталитического роста, выходят за рамки термостатики.

Для удобства читателей вначале кратко приводится постановка задачи о генерации волн смещений неравновесными электронами. Затем излагается идея, позволяющая ввести область изменения параметров (температуры и концентрации компонентов сплава), оптимальную для поддержания условий генерации (для поддержания высокого уровня

инверсной разности населенностей пар электронных состояний). В заключение показывается, что уменьшение размеров зерна сказывается на снижении температуры, оптимальной для генерации волн смещений, и проводится обработка экспериментальных данных с помощью найденных аналитических формул для  $D_c$  и оптимальной температуры генерации.

#### **4.1. Постановка задачи о генерации волн смещений неравновесными электронами**

Наиболее интересным в физическом отношении является построение теории МП в материалах, обладающих подсистемой, позволяющей реализовать механизм трансформации выделяющейся в ходе превращения энергии для поддержания УВП. Тогда рост кристалла мартенсита имеет непрерывный характер, а наибольший размер лимитируется лишь размерами объема, свободного от дефектов, способных нарушить исходную динамическую организацию управляющего волнового процесса (границы образца, границы зерен).

Заметим, что в металлах на стадии быстрого роста в межфазной области существует интенсивный поток электронов, обусловленный межфазной разностью химических потенциалов электронов, порождаемой, в свою очередь, разностью удельных объемов фаз, поскольку химический потенциал зависит от электронной концентрации. Оценки [1, 4] порядка величины градиента химического потенциала  $\nabla\mu$  даются отношением разности потенциалов фаз  $\Delta\mu$  (порядка 0,1 эВ) к ширине переходной области, порядка (0.1–1) мкм, и существенно превышают градиенты температур (при пересчете температур в энергетическую шкалу), обусловленные тепловым эффектом превращения.

Часть кинетической энергии потока электронов преобразуется в энергию волновых пучков, благодаря действию механизма генерации волн неравновесными электронами. Действительно, при наличии разности потенциалов, преобладают электроны, движущиеся в направлении убывания потенциала, и в потоковом состоянии имеются пары состояний электронов, переходы между которыми ведут преимущественно к излучению волн. В таких парах состояния с большей энергией имеют большую населенность, то есть среда становится активной.

Исследование возможности генерации упругих волн неравновесными электронами удобно проводить, полагая, что  $\nabla\mu$  в кристаллической среде задает единственное направление пространственной неоднородности. Тогда в пространстве квазиимпульсов пары инверсно населенных электронных состояний (ИНЭС), имеющие в потоковом режиме разные знаки неравновесных добавок к фермиевской функции распределения, разделяют s-поверхности (в общем случае

многолистные), задаваемые условием обращения в нуль проекции групповой скорости  $\mathbf{v}_k$  электронов на направление  $\nabla\mu$ :

$$(\mathbf{v}_k, \nabla\mu) = 0, \quad (43)$$

где  $(\ , \ )$  – символ скалярного произведения векторов. Ясно, что сами электронные состояния должны быть заселены, то есть находиться в приемлемом энергетическом интервале  $\Delta$  в окрестности уровня Ферми (как уже отмечалось в п. 1.1):

$$|\varepsilon_d - \mu| \approx |\varepsilon_t - \mu| \leq \Delta, \quad (44)$$

где  $\varepsilon_d$  – энергия d – электронов, имеющих энергии в области, прилегающей к энергии  $\varepsilon_t$  пика плотности состояний. Число  $R_{\text{eff}}$  пар ИНЭС, удовлетворяющих (44), пропорционально площади  $\Delta S_{\text{eff}}$  областей листов s-поверхности, заключенных между изоэнергетическими поверхностями с энергиями  $\mu \pm \Delta$ . Анализ показывает, что условие генерации имеет вид:

$$\sigma_0 > \sigma_{\text{th}}, \quad \sigma_{\text{th}} = \hbar^2 \Gamma \varkappa / (W^2 R_{\text{eff}}), \quad (45)$$

где  $\sigma_0$  – начальная инверсная населенность, пропорциональная  $\nabla\mu$ , а  $\sigma_{\text{th}}$  – пороговое значение инверсной разности населенностей,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $\Gamma$  и  $\varkappa$  – соответственно затухания электронов и фононов (измеряемые в  $\text{рад}\cdot\text{с}^{-1}$ ),  $W$  – матричный элемент электрон - фононного взаимодействия. Реалистические оценки параметров, приведенные в [1, 4], показывают, что выполнение (44) в сплавах железа возможно при  $\Delta \approx 0,2$  эВ в широком диапазоне температур и концентраций легирующих элементов, если величина  $\Delta S_{\text{eff}}$  велика (сопоставима с площадью поверхности первой зоны Бриллюэна). В [1, 4] и [56 – 58] существование обширных s-поверхностей продемонстрировано на примере простейших электронных спектров в приближении сильной связи для идеальных ГЦК и ОЦК решеток. Использование этих спектров удобно, поскольку, во-первых, позволяет получить аналитический вид поля групповых скоростей  $\mathbf{v}_k$ , необходимый, согласно (43), для отыскания s-поверхности, а во-вторых, этот спектр обладает единственным пиком плотности состояний. В результате, определив энергию пика  $\varepsilon_t$ , можно выбирать положение уровня  $\mu$  в соответствии с неравенством (44). При наличии обширных участков s-поверхностей величина  $\sigma_{\text{th}}$  оказывается порядка  $10^{-3}$ , поэтому генерация возможна при уровнях  $\sigma_0 > 10^{-3}$ .

#### 4.2. Область согласованного изменения температуры и состава сплавов, благоприятная для поддержания высокого уровня $\sigma_0$

В приближении времени релаксации, стационарная неравновесная добавка к равновесной фермиевской функции распределения  $f_{\mathbf{k}}^0$  (см., например, [59]) имеет вид:

$$f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^0 \approx \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial y_{\mathbf{k}}} \frac{y_{\mathbf{k}} \tau}{T} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}}, \nabla T), \quad (46)$$

$$f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^0 \approx \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial y_{\mathbf{k}}} \frac{\tau}{k_B T} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}}, \nabla \mu), \quad (47)$$

где  $f_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{e^{y_{\mathbf{k}}} + 1}$ ,  $y_{\mathbf{k}} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}$ ,  $k_B$  – константа Больцмана,  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  – энергия

электрона с квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ . Считая для простоты  $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \approx -\mathbf{v}_{\mathbf{k}'}$ , начальную инверсную разность населенностей представим в виде:

$$\sigma_0(\nabla \mu) = f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'} \approx \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial y_{\mathbf{k}}} \frac{2\tau}{k_B T} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}}, \nabla \mu). \quad (48)$$

Выполнение порогового условия  $\sigma_0 > \sigma_{th}$  в широком диапазоне концентраций  $C_{Le}$  легирующих элементов можно обосновать в рамках двухзонной модели, полагая, что затухание подвижных s-электронов  $\Gamma_s$  сравнимо с величиной  $(\varepsilon_d - \mu)\hbar^{-1}$  и во много раз превышает  $\Gamma_d$  – затухание 3d-электронов, активных в генерации фононов (типичному для 3d-металлов времени жизни s-электронов  $\tau_s \sim 10^{-15}$  с отвечает  $\hbar\Gamma_s \sim 0,6$  эВ). Действительно, населенность состояний с энергией  $\varepsilon_d > \mu$  может поддерживаться на достаточно высоком уровне  $f_d^0 \geq 0,1$  за счет эффективного механизма рассеяния в d-состояния s-электронов с энергиями  $\varepsilon_s$  удовлетворяющими условию:

$$\varepsilon_d - \mu - \frac{\hbar\Gamma_s}{2} < \varepsilon_s - \mu - \hbar\omega < \varepsilon_d - \mu + \frac{\hbar\Gamma_s}{2}, \quad (49)$$

где  $\hbar\omega$  – энергия коротковолнового фонона, участие которого необходимо для выполнения закона сохранения импульса, если неопределенность импульса s-электронов мала (мы пренебрегли в (44) величиной  $\hbar\Gamma_d$  по сравнению с  $\hbar\Gamma_s$ ). Поэтому для больших  $\Gamma_s$  уровень теплового

возбуждения  $k_B T \sim (\epsilon_s - \mu)$  может быть значительно меньше  $\epsilon_d - \mu$  без уменьшения населенности d-состояний. Аналогично для состояний  $\epsilon_d$  под уровнем Ферми при  $\mu - \epsilon_d > k_B T$  механизм d-s рассеяния обеспечивает дополнительное к уровню теплового возбуждения размытие распределения d-электронов, приводящее к отличию населенностей d-состояний от единицы. Образно говоря, s-состояния играют для d – электронов роль “энергетического лифта”, позволяющего d-электронам из-под уровня Ферми заселять d-состояния над уровнем Ферми. Механизм d-s-d рассеяния иллюстрирует рис. 11.

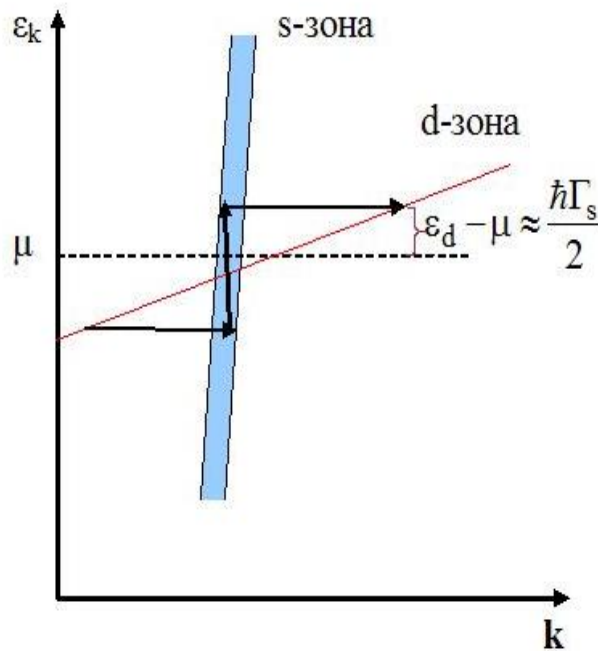


Рис. 11. Заселение d – состояний за счет механизма d-s-d рассеяния

Отсюда ясно, что рост концентрации  $C$  легирующей добавки ( $C < 1/2$ ), приводящий к быстрому росту вклада  $\Gamma_s(C) \sim C(1-C)$  примесного рассеяния в  $\Gamma_s$ , согласуется с уменьшением температуры условием:

$$\hbar\omega + k_B T + \frac{\hbar\Gamma_s(C, T)}{2} \sim |\epsilon_d - \mu|. \quad (50)$$

Отметим, что существование зависящего от температуры вклада  $\Gamma_s(T)$ , связанного с рассеянием на термически активируемых неоднородностях (вакансии, фононы, магноны и т.п.) и убывающего при

снижении  $T$ , должно сглаживать поведение  $\Gamma_s(C, T)$ , стабилизируя уровень размытия распределения  $d$ -электронов в широком диапазоне  $T$  и  $C$ . Следовательно, в первую очередь, необходимо модифицировать вид равновесной функции распределения  $f^0 \Rightarrow \tilde{f}^0$  так, чтобы  $\tilde{f}^0$  одновременно учитывала размытие распределения, обусловленное факторами  $T$  и  $\Gamma_s$ , а затем исследовать поведение производных  $\partial \tilde{f}^0 / \partial \mu$ , определяющих, наряду со значениями градиента  $\nabla \mu$ , величину разности населенностей  $\sigma_0$ . По существу, необходимо найти область переменных  $T$  и  $\Gamma_s$ , для которой величина  $\sigma_0$  при фиксированном  $|\varepsilon_d - \mu|$  достигает максимальных значений, достаточно слабо изменяющихся при одновременном изменении  $T$  и  $\Gamma$ . Температуру  $T$  из этой области естественно определить как оптимальную  $\tilde{T}$  для протекания мартенситного превращения. Затем, если известны электронные конфигурации атомов матрицы и легирующего элемента, можно найти зависимость  $\tilde{T}(C)$ , вычисляя  $\Gamma_s(C)$  и устанавливая связь  $\tilde{T}$  с  $\Gamma_s(C, \tilde{T})$ , и сравнить концентрационные зависимости  $\tilde{T}(C)$  и  $M_s(C)$ . Можно решать и обратную задачу: требуя близости зависимостей  $\tilde{T}(C)$  и  $M_s(C)$  и выбирая в качестве реперной электронную конфигурацию одного из компонентов сплава, искать электронную конфигурацию атома другого компонента. Именно последняя постановка задачи, позволяющая извлекать дополнительную информацию, была использована (см. главу 4 в [1,4]) при сравнении зависимостей  $\tilde{T}(C)$  и  $M_s(C)$  для сплавов типа замещения (Fe–Ni, Fe–Co, Fe–Mn) и внедрения (Fe–C).

Интересующее нас модифицированное распределение электронов  $\tilde{f}^0$  дается выражением:

$$\tilde{f}_{\mathbf{k}}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ 1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) \right]^{-1} A(\varepsilon, \mathbf{k}) d\varepsilon, \quad (51)$$

где спектральная плотность  $A(\varepsilon, \mathbf{k})$  является средней (по конфигурациям) вероятностью обнаружить в сплаве электрон с энергией  $\varepsilon$  в состоянии с квазиимпульсом  $\hbar \mathbf{k}$ . Обычно спектральная плотность имеет лоренцеву форму:

$$A(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{1}{2} \hbar \Gamma_{\mathbf{k}}}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + \left(\frac{1}{2} \hbar \Gamma_{\mathbf{k}}\right)^2}, \quad (52)$$

где  $\Gamma_{\mathbf{k}}$  – затухание электрона в состоянии с энергией  $\epsilon_{\mathbf{k}}$ , совпадающее с шириной на половине высоты функции  $A(\epsilon, \mathbf{k})$ . Кроме того, выполняется условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(\epsilon, \mathbf{k}) d\epsilon = 1. \quad (53)$$

Из (53), (52) очевидно, что при  $\Gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$  спектральная плотность переходит в  $\delta$ -функцию:

$$\lim_{\Gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} A(\epsilon, \mathbf{k}) = \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (54)$$

а распределение (51) – в распределение Ферми-Дирака

$$\lim_{\Gamma_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \tilde{f}^0 = f_{\mathbf{k}}^0 = \left[ 1 + \exp\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}\right) \right]^{-1}. \quad (55)$$

Введем безразмерный химический потенциал  $\mu' = \mu / |\epsilon_d - \mu|$  и переменные

$$\Gamma' = \frac{\hbar \Gamma}{2(\epsilon_{\mathbf{k}d} - \mu)}, \quad T' = \frac{k_B T}{\epsilon_{\mathbf{k}d} - \mu}. \quad (56)$$

Полагая далее, что при  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}d}$  в качестве  $\tilde{f}_d^0$  можно (из-за сильного s-d рассеяния) использовать  $\tilde{f}_s^0$  (51), будем далее опускать индексы d, нуль и тильду у функции  $\tilde{f}_d^0 \rightarrow f$ . Далее будем также считать, что  $\epsilon_d$  играет роль средней энергии  $\bar{\epsilon}_d$  актуального интервала энергий вблизи  $\mu$ . Тогда, фиксируя значения  $|\epsilon_d - \mu|$  и  $(\tau \mathbf{v} \nabla \mu)$ , для поиска оптимальной области изменения переменных  $T'$  и  $\Gamma'$  достаточно исследовать поведение производной  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}$ . На рис. 12 представлены результаты расчета  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}$ .

Семейства тонких линий – это линии постоянного уровня, на которых функция  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}$  принимает постоянные (отмеченные на линиях) значения, а штриховые линии 1 и 2 определяются соответственно условиями

$$\left. \frac{\partial}{\partial T'} \left( \frac{\partial f}{\partial \mu'} \right) \right|_{\Gamma'} = 0, \quad \left. \frac{\partial}{\partial \Gamma'} \left( \frac{\partial f}{\partial \mu'} \right) \right|_{T'} = 0. \quad (57)$$

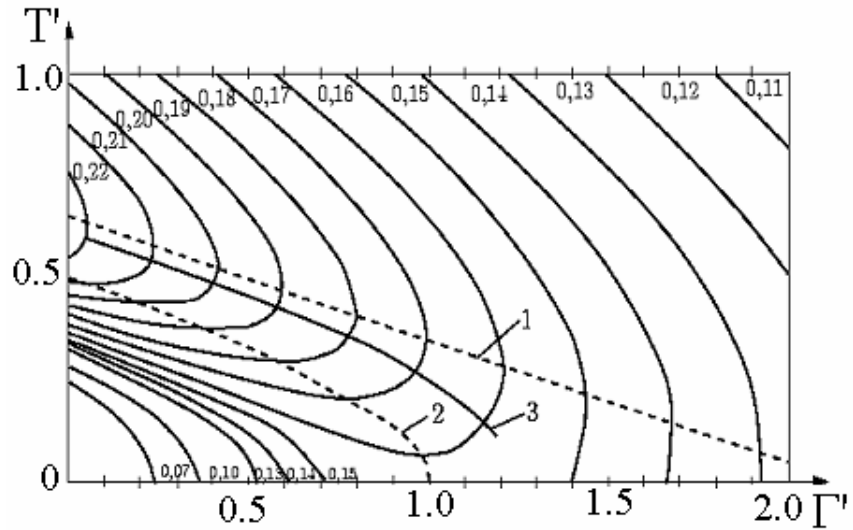


Рис. 12. Результаты расчета  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}(T', \Gamma')$  в случае лоренцевой формы спектральной плотности

Эти линии отвечают максимумам функции  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}$  по переменным  $T', \Gamma'$  и проходят через точки, в которых прямые линии, параллельные соответственно вертикальной и горизонтальной осям координат, касаются линий постоянного уровня. Сплошная линия 3 на рис. 12 – проекция на плоскость  $(\Gamma', T')$  "гребня" на рельефе функции  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}$ .

Область между линиями 1 и 2 представляет собой область значений параметров  $T'$  и  $\Gamma'$ , для которых инверсная разность населенностей  $\sigma_0(\nabla \mu)$  достигает максимальных слабо изменяющихся (при изменении  $T$  и  $\Gamma$ ) значений. Очевидно, что задавая точку, отвечающую чистому железу внутри этой области, можно ввести оптимальную температуру для генерации фононов, убывающую с ростом затухания  $\Gamma$  (именно таковы зависимости  $T'(\Gamma')$  для линий 1, 2, 3). Таким образом, поведение производной  $\frac{\partial f}{\partial \mu'}$  указывает на возможность введения оптимальной



температуры  $\tilde{T}_1$ , для которой производная  $\frac{\partial \tilde{T}_1}{\partial C} < 0$ , где  $C = C_{Le}$  – концентрация легирующего элемента.

Как показывают эксперименты по скоростному охлаждению [60 - 64], в чистом железе наблюдаются четыре температурные точки начала мартенситного превращения (в градусах Цельсия):  $M_s^I = 820$ ,  $M_s^{II} = 720$ ,  $M_s^{III} = 540$ ,  $M_s^{IV} = 430$ . Соответственно в сплавах имеется четыре ветви концентрационных зависимостей  $M_s^i(C)$ . В [1, 4, 65] показано, что сопоставление на плоскости ( $\Gamma'$ ,  $\Gamma$ ) точки с координатами  $\Gamma_0' \approx 0,4$ ,  $\Gamma_0 \approx 0,4$  температуре  $M_s^I$  первой (высокотемпературной) из четырех точек  $M_s^i$  для чистого железа приводит к разумным электронным конфигурациям для компонентов сплавов при отображении наблюдаемых концентрационных зависимостей  $M_s^i(C_{Le})$  в область, тяготеющую к окрестности линии 2 на рис. 12. При этом начальным точкам ветвей сопоставляются точки

$$\begin{aligned} \tilde{M}_s^i \rightarrow (\Gamma_0', \Gamma_0)^i: \quad \tilde{M}_s^I \rightarrow (0.397, 0.417)^I, \quad \tilde{M}_s^{II} \rightarrow (0.361, 0.379)^{II}, \\ \tilde{M}_s^{III} \rightarrow (0.296, 0.310)^{III}, \quad \tilde{M}_s^{IV} \rightarrow (0.256, 0.268)^{IV}. \end{aligned} \quad (58)$$

Затухание электронов представлялось в виде

$$\Gamma(T, C) = \Gamma(T) + \Gamma(C), \quad (59)$$

причем температурная зависимость выбиралась линейной

$$\hbar \Gamma(T) = a_0 k_B T. \quad (60)$$

В (60)  $a_0$  – безразмерный параметр. В области температур больше или порядка температуры Дебая  $T_D$  удовлетворительное описание затухание  $\Gamma(T)$  достигалось при выборе  $a_0 \approx 2.1$ . Сохраняя для простоты вид (60), будем иметь в виду, что в области температур, существенно меньших не только  $T_D$ , но и комнатной температуры, имеется несколько вкладов в затухание  $\Gamma(T)$  с разными показателями степеней  $p$  ( $p = 1, 2, 3, 4, 5$ , причем часто преобладают вклады, пропорциональные  $T^5$  и  $T^2$ ), поэтому коэффициент  $a_0$  следует считать зависящим от  $T$  параметром, и, значит, можно изменять (уменьшать при снижении температуры или вообще полагать равным нулю) при обработке экспериментальных данных. В

качестве стартового (максимального) значения для указанной области температур, как показывают данные измерений удельного электросопротивления  $\rho$  железа [66] (см. также §3 гл.25 в [67]), можно принять  $a_0 \approx 1$ .

При анализе вклада  $\Gamma(C)$  в [1, 4] был сделан вывод о том, что предпочтение следует отдать конфигурациям близким к  $3d^{8.6}4s^{1.4}$  для атомов Ni и близким к  $3d^7 4s^1$  для атомов Fe. Причем перераспределения электронов между s- и d- состояниями в пределах 0.05 электрона (например, при переходе к конфигурации  $3d^{6.95}4s^{1.05}$  для атомов Fe) достаточно для смещения отображающей точки с линии 2 на линию 3 (при фиксированном значении  $T'$ ). На таком перераспределении сказывается изменение параметра решетки аустенита (при изменении температуры), изменение ширины зоны и, в конечном итоге, изменение степени гибридизации s- и d- состояний. В частности, как показал анализ, значение параметра  $a_0 \approx 2.1$  естественно сопоставляется с гибридизованными электронными состояниями. Изменение степени гибридизации должно сопровождаться изменением эффективных плотностей состояний и эффективных масс электронов.

Заметим, кроме того, что и параметр  $|\epsilon_d - \mu|$  изменяется при изменении параметра решетки. В частности, при высоких температурах (и низких концентрациях Ni) выбиралось значение  $|\epsilon_d - \mu| \approx 0.237 \text{ эВ}$  (2750K по температурной шкале), использованное, наряду с  $a_0 \approx 2.1$ , при отображении (58). Однако в случае концентрированных сплавов ( $> 27\%$  Ni) температура ферромагнитного упорядочения в ГЦК фазе начинает превышать температуру  $M_s$ . Величина  $|\epsilon_d - \mu|$  сопоставляется со спин-поляризованным состоянием электронов и может изменяться на десятки процентов.

#### 4.3. Пример параболической аппроксимации отображения зависимости $M_s(C)$ на плоскость переменных $(\Gamma', T')$

Для исследования возможности адекватного аналитического описания влияния размера зерна на температуру  $M_s$  удобно задавать аналитические аппроксимации на плоскости переменных  $(\Gamma', T')$  “траекторий”, соединяющих начальную точку  $\tilde{M}_s^i$   $i$ -ой ветви с конечной точкой отображения  $i$ -ой концентрационной зависимости. Вообще говоря, имеется несколько вариантов изменения параметров  $(\Gamma', T')$  (выгодных с точки зрения поддержания высоких значений инверсной населенности электронных состояний), совместимых с условием больших отклонений от термодинамического равновесия (см. заключение к гл. 4 в [1, 4]).

Удобно начать рассмотрение с параболической аппроксимации. Заметим, что кривая 2 на рис. 12, проходящая через точки  $(\Gamma'=1, T'=0)$  и  $(\Gamma'=0, T'=0.5)$ , хорошо аппроксимируется параболой:

$$1-\Gamma'=4\Gamma'^2. \quad (61)$$

Из (61) очевидно, что температура  $\Gamma'$  быстро стремится к абсолютному нулю при стремлении  $\Gamma'$  к 1. Поскольку в процессе изменения температуры и концентрации изменяются и параметры  $a_0$ ,  $|\epsilon_d-\mu|$ , для описания концентрационной зависимости  $M_s$  (снижение при росте концентрации) в области между кривыми 2 и 3 можно использовать набор траекторий параболического типа

$$A-\Gamma'=B\Gamma'^2, \quad 1 \leq A \leq 1.25. \quad (62)$$

Например, полагая, для определенности, что все траектории проходят через точку  $\tilde{M}_s^I$  в (58), получаем диапазон изменения параметра  $B$ :  $3.625 \leq B \leq 5.1875$ . Заметим, при согласованных таким образом значениях  $A$  и  $B$  линия 3 достигается лишь в нижней точке траектории ( $\Gamma'=1.25$ ,  $\Gamma'=0$ ) – вершине параболы  $1.25-\Gamma'=5.1875\Gamma'^2$ . Полезно иметь в виду, что вполне допустимо и изменение выбора начальной точки для случая чистого железа. Например, при выборе вместо (58) значений  $\Gamma' \approx 0.5$ ,  $\Gamma' \approx 0.5$  начальная точка практически попадает на линию 3, то есть формально можно было бы вести описание, используя, хотя бы на локальном участке, траектории близкие к  $1.25-\Gamma'=5.1875\Gamma'^2$ . При этом коэффициент  $a_0=2$ , а  $|\epsilon_d-\mu|$  снизится на 20%. Разумеется, слегка ухудшатся условия для генерации УВП в системе Fe-Co, связываемые в [1, 5] с неравновесностью, обусловленной градиентом температуры.

Добавим в (59), пока формально, слагаемое  $\Gamma(d_m)$  и запишем вместо (59)

$$\Gamma(T, C, d_m) = \Gamma(T) + \Gamma(C) + \Gamma(d_m). \quad (63)$$

Выделяя явно из затухания  $\Gamma'$  слагаемое (60), из (62) и (63) находим:

$$\tilde{T}' = [-a_0/(4B)] + \sqrt{(a_0/4B)^2 + A/B - \hbar(\Gamma(C) + \Gamma(d_m)) / 2B |\epsilon_d - \mu|}. \quad (64)$$

Мы отбросили второе решение, как приводящее к  $\tilde{T}' < 0$ .

Строго говоря, при учете истинных температурных зависимостей  $\Gamma'(T)$  будут получаться уравнения со степенями температуры выше второй. И это представляет несомненный интерес, поскольку может привести к нескольким физически реализуемым ветвям  $M_s(C)$ . Как уже отмечалось, выявляется до четырех таких ветвей. Однако особенно яркое проявление эффекта критической зависимости  $M_s$  от размера зерна наблюдается на сплавах, имеющих температуры  $M_s$  при температурах от комнатных и

вплоть до абсолютного нуля, то есть в диапазоне, где фактически остается только одна ветвь  $M_s^{IV}(C)$ . Поэтому в данной работе мы ограничимся упрощенным вариантом. Очевидно также, что при включении в  $\Gamma(T)$  слагаемого квадратичного по температуре, величина  $B$  изменилась бы, по сравнению со значением, найденным из требования прохождения параболы через заданную точку.

Из (59) непосредственно для оптимальной температуры генерации получаем:

$$\tilde{T} = \{[-a_0/(4B)] + \sqrt{(a_0/4B)^2 + A/B - \hbar(\Gamma(C) + \Gamma(d_m))/2B|\epsilon_d - \mu| |\epsilon_d - \mu|/k_B}\}. \quad (65)$$

Поскольку  $\tilde{T} \geq 0$ , то, как следует из (60), должно выполняться неравенство

$$\hbar(\Gamma(C) + \Gamma(d_m)) (2|\epsilon_d - \mu| A)^{-1} \leq 1, \quad (66)$$

где вклад  $\Gamma(d_m)$  требует конкретизации.

#### 4.4. Явный вид зависимости вклада $\Gamma(D)$ в затухание s-электронов

Ранее в [1, 4] не учитывалось влияние на затухание s-электронов неоднородности с характерным поперечным пространственным масштабом  $d_m$ , связанной с выделением энергии в области возникновения возбужденного состояния. Очевидно, однако, что этот вклад в затухание при малых  $d_m$  может стать сравнимым с  $\Gamma(C)$  и  $\Gamma(T)$ . Рассмотрим продолжим, полагая, что  $d_m$  является единственным характерным мезомасштабом. Это оправдано при описании мартенситных кристаллов, не обладающих внутренней двойникованной структурой, как это, например, имеет место для формирования пакетного мартенсита в системах Fe-Ni при концентрациях Ni меньших 29%. Тогда процесс генерации волновых пучков разыгрывается только в активной области с масштабом  $d_m$ .

Найдем вклад в затухание  $\Gamma(D)$ , связанный с масштабом  $d_m$ . Характерное время пересечения этой области s-электронами

$$\tau_s \approx d_m/v_s. \quad (67)$$

В соответствии с соотношением неопределенностей для энергии и времени величина

$$\hbar\Gamma(d_m) \approx \hbar/2\tau_s \approx \hbar v_s / 2d_m. \quad (68)$$

Благодаря соотношению масштабов (16) формулу (68) можно переписать в виде:

$$\hbar\Gamma(d_m)\equiv\hbar\Gamma(D)\approx n10^2\hbar v_s/2D, \quad (69)$$

явно включающем размер зерна.

#### 4.5. Зависимость оптимальной температуры генерации от размера зерна. Критический размер зерна

Проводя подстановку (69) в (65) и (66), вводим явную зависимость от размера зерна для оптимальной температуры генерации:

$$\tilde{T}=\left\{\frac{-a_0}{4B}+\sqrt{\left(\frac{a_0}{4B}\right)^2+A/B-\hbar(\Gamma(C)+n10^2v_s/2D)}/2B|\epsilon_d-\mu|\right\}|\epsilon_d-\mu|/k, \quad (70)$$

$$\hbar(\Gamma(C)+n10^2v_s/2D)(2|\epsilon_d-\mu|A)^{-1}\leq 1. \quad (71)$$

Полагаем, как и в п. 3.1, что при  $D = D_c$  температура  $\tilde{T}(D)=0$ . Тогда при  $D=D_c$  (71) переходит в равенство

$$\hbar(\Gamma(C)+n10^2v_s/2D_c)(2|\epsilon_d-\mu|A)^{-1}=1. \quad (72)$$

Заметим, что если можно пренебречь вкладом (60) в затухание, то из (70) при  $a_0=0$  для оптимальной температуры генерации находим:

$$\tilde{T}(D)=|\epsilon_d-\mu|\frac{1}{k_B\sqrt{B}}\sqrt{A-\Gamma'(C)-\frac{\hbar n10^2v_s}{4D|\epsilon_d-\mu|}}. \quad (73)$$

Из (72) и (73) очевидно, что критическое значение  $D_c$  задается выражением:

$$D_c=\frac{\hbar n10^2v_s}{4|\epsilon_d-\mu|(A-\Gamma'(C))}, \quad (74)$$

устанавливающим комбинацию физических параметров, определяющих критический размер зерна. После введения  $D_c$  формула (73) принимает простой вид:

$$\tilde{T}(D)=\tilde{T}_\infty\sqrt{1-D_c/D}, \quad \tilde{T}_\infty=\tilde{T}(\infty)=|\epsilon_d-\mu|\frac{1}{k_B}\sqrt{\frac{A-\Gamma'(C)}{B}}, \quad (75)$$

а (70) представляется в форме:

$$\tilde{T}(D) = \left\{ \frac{-a_0}{4B} + \sqrt{\left(\frac{a_0}{4B}\right)^2 + (A - \Gamma'(C)) \frac{[1 - D_c/D]}{B}} \right\} \frac{|\varepsilon_d - \mu|}{k_B}. \quad (76)$$

Из (74) видно, что при значениях  $\Gamma'(C)$ , приближающихся к  $A$ , критический размер  $D_c$  нарастает, обращаясь в бесконечность при  $\Gamma'(C)=A$ , при этом, согласно (73), (76),  $\tilde{T}_\infty$  обращается в нуль, то есть

$$\Gamma'(C) \rightarrow A, \quad D_c \rightarrow \infty, \quad \tilde{T}_\infty = \tilde{T}(\infty) \rightarrow 0. \quad (77)$$

Такая ситуация, по-видимому, имеет место для системы Fe–Ni при приближении концентрации Ni к  $C^*_{Ni}$  ( $33\% < C^*_{Ni} < 35\%$ ). Напомним, что наличие резкого спада на линии 2 при  $\Gamma'(C) \rightarrow 1$  (см. рис. 12 и формулу (61)) уже использовалось в [1, 4] в качестве аргумента при отображении экспериментальных зависимостей  $M_s(C)$  в область оптимальных значений переменных ( $\Gamma'$ ,  $\Gamma'$ ). Итак, формула (74) явным образом через изменение параметра  $\Gamma(C)$  отражает изменение химического состава сплава, причем вклад каждого компонента зависит от его электронной конфигурации, которая, вообще говоря, может испытывать вариации в зависимости от локального окружения в многокомпонентной системе.

Влияние структуры непосредственно представлено в (74) фактором  $10^2 n$ , за которым (в соответствии с (16), (11), (10)) стоит отношение масштабов  $L/d$ , то есть для явного отражения значимого структурного фактора формулу (74) можно использовать в виде:

$$D_c = \frac{\hbar (L/d) v_s}{2(|\varepsilon_d - \mu| 2A - \hbar \Gamma(C))}. \quad (78)$$

Отметим еще одну деталь: при записи (78) мы перешли от безразмерной переменной  $\Gamma'(C)$  к затуханию  $\Gamma(C)$ , чтобы еще один важный фактор  $|\varepsilon_d - \mu|$ , задающий  $\varepsilon_d$  - среднее значение энергии 3d-электронов (активных в генерации управляющих волн), фигурировал только явно. Как уже отмечалось выше и подробно обсуждалось в [1, 4], этот фактор зависит от параметра решетки и, значит, в неявной форме отслеживает изменение важнейшего структурного параметра. Конечно, значение  $|\varepsilon_d - \mu|$  должно зависеть и от концентрации компонентов сплава. Особенно радикальные изменения этого параметра должны наблюдаться для сплавов такого состава, при котором окрестность температуры Кюри ферромагнитного упорядочения в аустените близка к температуре  $M_s$ . Для спин-поляризованных состояний, становящихся основными участниками

процесса генерации (расположенными под уровнем  $\mu$ ), этот параметр может даже проходить через нулевое значение при расщеплении энергии неполяризованного (парамагнитного) состояния, имеющего энергию над уровнем  $\mu$ . На  $|\epsilon_d - \mu|$  может сказываться и процесс перераспределения s- и d-электронов при магнитном упорядочении. Однако вдали от точки Кюри его можно считать слабо зависящим от концентрации (по сравнению с вкладом  $\Gamma(C)$ ).

Коснемся, наконец, еще раз вопроса о выборе значения параметров A и B. Напомним, что они связаны между собой формальным требованием прохождения параболы через точку  $(T_0', \Gamma_0')$ , соответствующую на плоскости  $(T', \Gamma')$  основному компоненту сплава:

$$B = (A - \Gamma_0') (T_0')^{-2}. \quad (79)$$

Считая  $(T_0', \Gamma_0')$  известными для любого из химических элементов, находящихся в металлическом состоянии, остается привести аргументы для выбора единственного параметра A. Конечно, можно идти полуэмпирическим путем, обрабатывая известные экспериментальные зависимости, пользуясь, например, набором траекторий (62). Однако существование ярко выраженной особенности (77), позволяет отдать предпочтение нижней границе  $A=1$  интервала значений в (62).

Действительно, учтем, во-первых, что в концентрированном сплаве при низких температурах  $\hbar\Gamma_s \gg \hbar\omega, k_B T$ . Во-вторых, переходя к среднему значению  $\epsilon_d$  в актуальном интервале энергий, естественно заменить в (50) соответствие по порядку величины равенством. В-третьих, согласно (69), затухание  $\Gamma_s$  следует считать функцией не только концентрации C и температуры T, но и диаметра зерна D. Тогда (50) становится эквивалентным условию

$$\frac{\hbar\Gamma_s(C, T, D)}{2} = |\epsilon_d - \mu|. \quad (80)$$

Переходя, согласно (56), к безразмерным величинам, перепишем (80) в виде

$$\Gamma'(D, C, T) = \Gamma'(C) + \Gamma'(D) + \Gamma'(T) = 1, \quad (81)$$

где символ s для полного затухания s-электронов и отдельных вкладов опущен. Ясно, что  $\Gamma'(T) \rightarrow 0$  при  $T \rightarrow 0$  и  $\Gamma'(D) \rightarrow 0$  при  $D \rightarrow \infty$ , но тогда из (81) имеем  $\Gamma'(C) \rightarrow 1$ . Сравнение с равенством  $\Gamma'(C)=A$  приводит к значению

$$A = 1. \quad (82)$$

Значит, на плоскости переменных  $(T', \Gamma')$  (в рассматриваемой постановке задачи) доступна только область

$$\Gamma' \leq 1. \quad (83)$$

Ограничение (83) принципиально важно, так как позволяет понять причину существования жесткой верхней концентрационной границы составов сплавов для протекания мартенситной реакции. На рис. 13 ограничению (83) соответствует свободная от штриховки область переменных  $(T', \Gamma')$ .

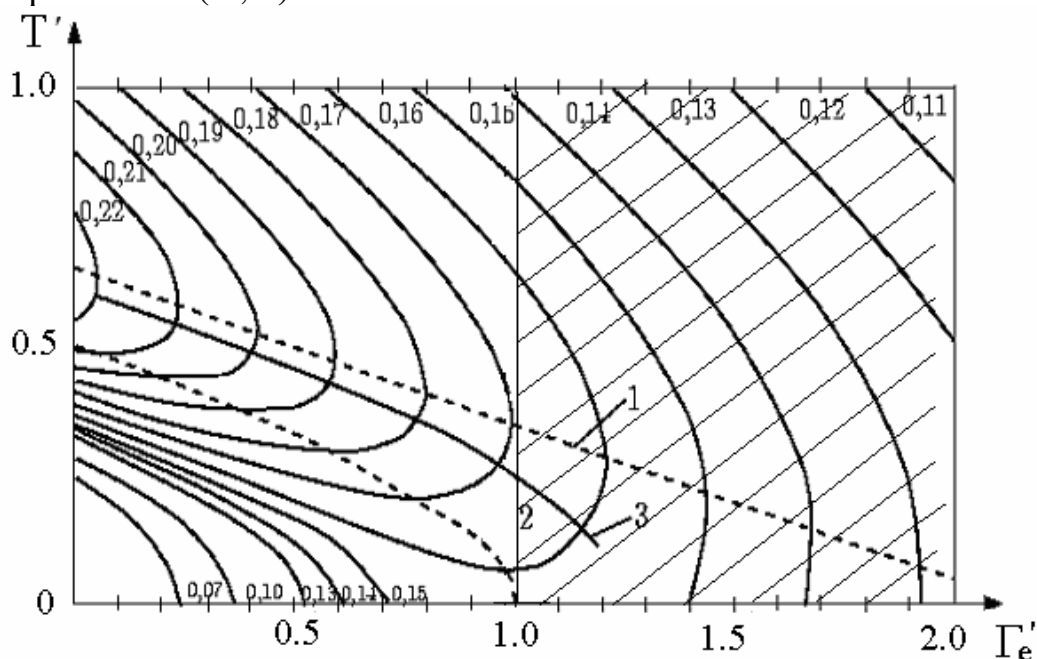


Рис. 13. Область переменных  $T'$ ,  $\Gamma'$  при  $\Gamma' \leq 1$ , для которой допустим режим генерации управляющих волн смещений неравновесными  $d$  – электронами

Фактически рис. 13 отражает кинетическую фазовую диаграмму реализации мартенситного превращения, управляемого волнами смещений, которые генерируются на стадии роста неравновесными  $d$ -электронами.

Предельный случай (77) при учете условия  $A=1$  получает простую интерпретацию. Вклад концентрационно зависящей компоненты в размытие энергии состояния  $s$ -электронов оказывается достаточным для заселения состояний с энергиями  $|\epsilon_d - \mu|$  над уровнем  $\mu$  (и появления вакантных состояний под уровнем  $\mu$ , что взаимосвязано, так как заселение



над уровнем  $\mu$  идет за счет “перекачивания” d-электронов из-под уровня  $\mu$ ). Поэтому никаких дополнительных вкладов (связанных с рассеянием на термически активируемых неоднородностях) в уширение энергетических уровней s-электронов для формирования d – состояний, способных получить неравновесные добавки, инвертирующие разности населенностей, больше не требуется.

Из рис. 12 видно, что параболические аппроксимации с вершинами парабол на оси  $\Gamma'=0$  могут использоваться и для описания линий постоянного уровня в области сравнительно малых значений ( $\Gamma', \Gamma'$ ) при  $A \leq 0.5$ . Интересен и вариант аппроксимации другого набора линий постоянного уровня семейством парабол, вершины которых лежат на линии 3 (как отмечалось выше, линия 3 сама может быть аппроксимирована параболой с вершиной на оси  $\Gamma'=0$ ). Формально смещение изображающих точек зависимостей  $M_s^{\text{II}}(C)$ ,  $M_s^{\text{III}}(C)$ ,  $M_s^{\text{IV}}(C)$  может осуществляться по вогнутым линиям постоянного уровня вплоть до линии 2, а затем вдоль линии 2 к точке ( $\Gamma'=0$ ,  $\Gamma'=1$ ), а может осуществляться по выпуклым ветвям сразу к точке ( $\Gamma'=0$ ,  $\Gamma'=1$ ). Существенно, что интересующая нас область концентрации системы Fe-Ni (30–34%Ni) лежит выше концентрации ( $\approx 30\%Ni$ ), при которой происходит пересечение ветвей  $M_s^{\text{I}}(C)$  и  $M_s^{\text{IV}}(C)$ . Это означает, что приближение к предельной точке ( $\Gamma'=0$ ,  $\Gamma'=1$ ) может рассматриваться либо как движение вдоль линии 2, либо как движение по аппроксимирующей выпуклой кривой вблизи линии 2 (что более вероятно), соединяющей точки ( $\Gamma'=0$ ,  $\Gamma'=1$ ) и точку пересечения ветвей  $\tilde{M}_s^{\text{I}}(C)$  и  $\tilde{M}_s^{\text{IV}}(C)$ . Заметим, что при аппроксимации ветви  $\tilde{M}_s^{\text{I}}(C)$  параболой, для реализации пересечения ветвей  $\tilde{M}_s^{\text{I}}(C)$  и  $\tilde{M}_s^{\text{IV}}(C)$  степенная аппроксимация ветви  $\tilde{M}_s^{\text{IV}}(C)$  должна иметь доминирующую степень выше второй.

Важно, что формула (74) для  $D_c$  не связана с конкретными вариантами аппроксимаций кривых на плоскости переменных ( $\Gamma', \Gamma'$ ), поскольку фактически базируется на соотношении неопределенностей (68) и соотношении масштабов (16). Например, без потери качественной сути выводов, можно проводить и линейную аппроксимацию, требуя, чтобы вместо параболы через точки ( $\Gamma_0'$ ,  $\Gamma_0'$ ) и ( $\Gamma'=0$ ,  $\Gamma'=1$ ) проходила аппроксимирующая прямая. Тогда при

$$\Gamma'(\Gamma')=1-[(1-\Gamma_0')\frac{\Gamma'}{\Gamma_0'}], \quad (84)$$

для  $\tilde{T}(D)$  легко получаем:

$$\tilde{T}(D)=\tilde{T}_\infty[1-D_c/D], \quad \tilde{T}_\infty=\tilde{T}(\infty)=2T_0(1-\Gamma'(C))[2(1-\Gamma_0')+a_0k_B T_0']^{-1}. \quad (85)$$

Интересно, что снова появилась зависимость вида (30), но с другой физической природой и структурой коэффициентов. Общей основой служит только соотношение масштабов (16). С другой стороны, сравнение (75) с (85) демонстрирует, что показатель степени у характерного множителя  $[1 - D_c/D]$  зависит от того, какую “траекторию” в пространстве параметров  $(T', \Gamma')$  выбирает неравновесная система. Подчеркнем, что при близости  $D$  к  $D_c$  выбор “траектории” проявляет себя и в случае учета температурного вклада в затухание. Так, ограничиваясь линейным по  $\sqrt{1 - D_c/D}$  разложением в (76), получим:

$$\tilde{T}(D) \approx (1 - \Gamma'(C)) |\epsilon_d - \mu| \frac{\sqrt{1 - D_c/D}}{a_0 k_B}. \quad (86)$$

Во избежание недоразумений отметим, что, в отличие от (76), в (86) нельзя выполнять предельный переход  $a_0 \rightarrow 0$ .

#### 4.6. Вклад $\Gamma(d_{tw})$ обусловленный дополнительным масштабом $d_{tw}$ , характерным для двойникованных кристаллов

Обсудим еще один фактор, сказывающийся на величине затухания  $\Gamma'$ . Заметим, что для системы Fe-Ni (30–34%Ni) характерно наличие тонкой структуры двойников превращения с толщиной двойниковых прослоек  $d_{tw}$  порядка нескольких десятков параметров решетки. Как показано в [2, 5, 39], динамическая теория двойникования сводится к согласованному распространению относительно длинноволновых смещений, задающих обсуждавшийся масштаб  $d_m$ , и относительно коротковолновых смещений, задающих масштаб  $d_{tw}$ . Важно, что масштаб  $d_{tw}$ , в отличие от  $d_m$ , не связан с масштабом  $D$ . Согласно [68], этот масштаб обусловлен, скорее всего, неоднородностью двух- и трехмерных полей конечных смещений (он проявляется при учете градиентов смещений). Поэтому вклад  $\Gamma(d_{tw})$  в затухание электронов в формулах (74) и (78) для  $D_c$ , обусловленный дополнительным масштабом  $d_{tw}$ , должен отражаться введением дополнительного к  $\Gamma'(C)$  (или к  $\Gamma(C)$ ) слагаемого. Вводя “эффективное” затухание  $\Gamma'_e = \Gamma'(C) + \Gamma'(d_{tw})$ , проводим в (74) и (78) замены  $\Gamma'(C) \rightarrow \Gamma'_e$ ,  $\Gamma(C) \rightarrow \Gamma_e$  и соответственно получаем:

$$D_c = \frac{\hbar n 10^2 v_s^2}{4 |\epsilon_d - \mu| (A - \Gamma_e)}, \quad (87)$$

$$D_c = \frac{\hbar (L/d) v_s}{2(|\epsilon_d - \mu| 2A - \hbar \Gamma_c)}. \quad (88)$$

Аналогичные замены следует провести и в формулах (75) и (76), тогда:

$$\tilde{T}(D) = \tilde{T}_\infty \sqrt{1 - D_c/D}, \quad \tilde{T}_\infty = \tilde{T}(\infty) = |\epsilon_d - \mu| \frac{1}{k_B} \sqrt{\frac{A - \Gamma_c'}{B}}, \quad (89)$$

$$\tilde{T} = \left\{ \frac{-a_0}{4B} + \sqrt{\left(\frac{a_0}{4B}\right)^2 + (A - \Gamma_c') \frac{[1 - D_c/D]}{B}} \right\} \frac{|\epsilon_d - \mu|}{k_B}. \quad (90)$$

Проводя в (68) замену  $d_m \rightarrow d_{tw}$ , получаем:

$$\hbar \Gamma(d_{tw}) \approx \hbar / 2\tau_s \approx \hbar v_s / 2d_{tw}. \quad (91)$$

Оценим величину  $\Gamma'(d_{tw})$ , полагая, для определенности,  $d_{tw} \approx 20a \approx 7 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 7 \text{ нм}$ ,  $v_s \approx 10^6 \text{ м/с}$ ,  $|\epsilon_d - \mu| \approx 0.237 \text{ эВ}$ ,  $\hbar \approx 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$ . Тогда из (91) и (56) находим  $\Gamma'(d_{tw}) \approx 0.0992 \approx 0.1$ . Следует подчеркнуть, что этот вклад весьма значителен, так как наибольший (для ветви  $\tilde{M}_s^{IV}$ ) диапазон изменения параметра  $\Gamma'$  (от чистого железа до сплава с особой концентрацией  $C^*$ ) ограничен неравенствами  $0.268 \leq \Gamma' \leq 1$ .

Возвращаясь к сплавам на основе железа, естественно считать, что для обсуждаемых сплавов в (87) - (90) выполняется точное равенство  $A=1$ . Фиксируя  $A=1$ , из (84) получаем  $B=(1-\Gamma_0')(T_0')^{-2}$ .

В общем случае каждую систему, вместе с выбором данных  $(T_0', \Gamma_0')$  для основного компонента сплава, следует характеризовать своим набором параметров  $(a_0, n, |\epsilon_d - \mu|, v_s, \Gamma'(C))$ . Из (87) и (88) видно, что  $D_c$  не зависит от параметров  $a_0$  и  $B$ , однако  $\tilde{T}(\infty)$ , как следует из (76), зависит и от  $a_0$ . Напомним,  $a_0$  нельзя считать параметром, не зависящим от  $T$ . Если считать  $a_0=0$ , то в области температур ниже  $T_D$  можно приближенно использовать (75), варьируя  $\Gamma'(C)$  (для согласования  $\tilde{T}(\infty)$  с экспериментальными значениями  $M_s(\infty)$ ).

---

---

## Глава 5

### Обработка экспериментальных данных для критического размера зерна $D_c$

Поскольку формула для  $D_c$  имеет фундаментальный характер и не зависит от конкретных вариантов аппроксимирующих кривых в пространстве переменных  $\Gamma'$ ,  $T'$ , ее можно использовать не только для объяснения наблюдаемых зависимостей  $D_c$  от химического состава, но и для согласованного выбора параметров, характеризующих систему.

Рассмотрим зависимость  $D_c$  от химического состава на примере систем Fe–Ni и Fe–C при концентрациях, соответствующих параметру  $\Gamma'(C) \leq 1$ .

#### 5.1. Зависимость $D_c$ от состава при аппроксимации $1 - \Gamma' = 4T'^2$

Допустим вначале, что этим системам в области концентраций (30–34)% Ni точно соответствует на плоскости параметров ( $T'$ ,  $\Gamma'$ ) линия 2. Тогда параметр  $B=4$ . Чтобы без внутренних противоречий проводить количественные оценки, следует установить соответствие между приведенными параметрами. Согласно литературным данным, для сплавов Fe–Ni с 29, 30, 31, 32,  $C_{Ni}^* \%Ni$  ( $33\% < C_{Ni}^* < 34\%$ ) примем в качестве ориентировочных следующие значения температур  $M_s$ : 263, 243, 230, 223, 0 K соответственно (0 K для  $C_{Ni}^* \%Ni$  нами доопределен и сопоставляется с предельным значением  $\Gamma'=1$ ). Оценки, выполненные в [1, 4], показали, в частности, что при электронных конфигурациях  $3d^{8.6}4s^{1.4}$  для Ni и  $3d^{6.96}4s^{1.04}$  для Fe попаданию точки пересечения ветвей  $M_s^I(C)$  и  $M_s^{IV}(C)$  при отображении на линию 2 при концентрации, близкой к 30% Ni, соответствуют координаты  $T' \approx 0.1$ ,  $\Gamma' \approx 0.96$ . Примем эти данные в качестве пробных реперных значений, отнеся их к концентрации 30% Ni и считая, что вклады  $\Gamma'(d_{tw})$  и  $\Gamma'(D)$  при этой концентрации уже включены в полное

затухание. То обстоятельство, что в прежних оценках вклады  $\Gamma'(d_{tw})$  и  $\Gamma'(D)$  не учитывались, не играет существенной роли, так как приведение к точке с выбранными значениями при учете вкладов  $\Gamma'(d_{tw})$  и  $\Gamma'(D)$  может быть достигнуто малой (на уровне сотых долей электрона) s-d вариацией электронной конфигурации атома железа.

Очевидно, что  $\Gamma' \approx 0.1$ ,  $\Gamma \approx 0.96$  удовлетворяют (61). Использование соотношения (61) позволяет с помощью задаваемого из экспериментальных данных параметра  $M_s$  сразу находить полное затухание  $\Gamma'$ . Затем, вычитанием температурного вклада  $\Gamma'(T)$ , устанавливается эффективный вклад в затухание  $\Gamma'_e = \Gamma' - \Gamma'(T)$ . Подстановка  $\Gamma'_e$  в (87) позволяет найти  $D_c$ . Если бы все параметры, входящие в (87), были точно известны, то найденные  $D_c$  можно было бы сравнивать с экспериментально наблюдаемыми величинами. Однако требование знания точных значений параметров является слишком жестким. Поэтому, учитывая фундаментальный характер (87) и полагая достоверным факт различия на порядок величин  $D_{c1} \approx 1$  мкм и  $D_{c2} \approx 10$  мкм для систем Fe-31Ni и Fe - 31Ni - 0.28C, соответственно, будем осуществлять подбор параметров (в физически оправданных интервалах значений) до выполнения требуемых отношений величин  $D_{c2}$  и  $D_{c1}$ . Определившись с набором параметров, построим зависимости  $\tilde{T}(D)$  с помощью (89) и (90).

Поскольку обработка данных предполагает знание величины  $a_0$ , следует задать его явную зависимость от  $T'$ . Имеет смысл проверить, в какой мере учет зависимости для  $a_0(T')$  совместим с поставленной целью - получить при реалистичных значениях параметров наблюдаемое соотношение  $D_{c2} \approx 10D_{c1}$  при попадании  $D_{c1}$  и  $D_{c2}$  в окрестности значений вблизи  $D_{c1} = 1$  мкм и  $D_{c2} = 10$  мкм соответственно:

$$(0.7 \leq D_{c1} \leq 1.4) \text{ мкм}, \quad (7 \leq D_{c2} \leq 14) \text{ мкм}. \quad (91)$$

При использовании степенной экстраполяции выберем сравнительно быстро убывающую зависимость  $a_0 \sim (T')^4$ , предполагая, что в низкотемпературном диапазоне существенна пятая степень температуры. Итак рассмотрим (для интервала  $(0 \leq T' \leq 0.1)$ ) зависимость:

$$a_0(T') = a_0(0.1) (T'/0.1)^4. \quad (92)$$

Как отмечалось выше, в качестве стартового значения при экстраполяции в интересующей нас области температур можно взять  $a_0(0.1) = 1$ .

Рассматриваемая область составов обладает весьма интересными свойствами и наиболее сложна как при экспериментальных исследованиях, так и при интерпретации результатов. Прежде всего, отметим особенность магнитного состояния аустенита. Для концентраций Ni > 27% температура

Кюри  $T_c$  ферромагнитного упорядочения становится выше  $M_s$ , т.е. в интересующем нас диапазоне концентраций от 29% до  $C_{Ni}^*$  аустенит ферромагнитен. Отметим, что  $T_c$  возрастает с увеличением концентрации Ni, а  $M_s$  убывает. Это означает, что сплавы с большей концентрацией Ni в точке  $M_s$  отстают от  $T_c$  дальше. В модели коллективизированных электронов с перекрывающимися подзонами для спинов “вверх” и “вниз” удаление от точки Кюри, сопровождающееся ростом намагниченности, должно вести к росту  $|\epsilon_d - \mu|$  для спин-поляризованных состояний, лежащих под уровнем Ферми  $\mu$ . Допустим, что в рассматриваемой области составов ферромагнитного аустенита повышение концентрации Ni на 1% ( $\Delta C_{Ni} = 1\%$ ) сопровождается повышением  $\Delta |\epsilon_d - \mu|$  величины  $|\epsilon_d - \mu|$  на 10%. Тогда, задавая изменение концентрации никеля  $\Delta C_{Ni}$  в процентах, получим:

$$\frac{\Delta |\epsilon_d - \mu|}{|\epsilon_d - \mu|} = 0.1 \Delta C_{Ni}. \quad (93)$$

Верхняя граница концентраций  $C_{Ni}^*$ , при которой  $M_{s\infty}$  практически достигает температуры абсолютного нуля, при экстраполяции данных [55, 69], близка к 33,2% Ni. Конкретное ее значение может и отличаться от указанного (в сторону увеличения). В принципе важно, что имеется граничная концентрация легирующего элемента, для которой  $M_{s\infty} = 0K$ . Учитывая необходимость понимания специфики состояния системы, мы параллельно с процессом отображения прокомментируем его особенности для нескольких концентраций.

**Концентрация 30% Ni.** Считая температуру  $M_s = 243K$ , находим  $|\epsilon_d - \mu| \approx k_B M_s / T \approx 0.33534 \cdot 10^{-19} Дж \approx 0.2096 эВ$  или  $2430K$  по температурной шкале. Полное затухание  $\Gamma'$  включает и вклад  $\Gamma'(T) = a_0 k_B M_s / 2 |\epsilon_d - \mu|$ , который, при учете выбранной аппроксимации (92) для  $a_0$ , дает  $\Gamma'(T) = 0.05$ . Тогда эффективное затухание  $\Gamma'_e = \Gamma'(C) + \Gamma'(d_{tw}) \approx 0.96 - 0.05 = 0.91$ . Ясно, что, вычитая, согласно выполненной оценке, вклад  $\Gamma'(d_{tw}) \approx 0.1$ , можно оценить  $\Gamma'(C) \approx 0.81$  для Fe-30Ni (мы пренебрегли вкладом  $\Gamma'(D)$  по сравнению с  $\Gamma'(d_{tw})$ ). В итоге имеем набор значений:

$$|\epsilon_d - \mu| \approx 0.2096 эВ, \quad M_s' \approx 0.1, \quad \Gamma' \approx 0.96, \quad a_0 \approx 1, \quad \Gamma'(T) \approx 0.05, \quad \Gamma'_e \approx 0.91. \quad (94)$$

**Концентрация 29% Ni.** Особенность обработки данных для случая Fe-29Ni состоит в том, что концентрация 29Ni ниже на 1% точки пересечения (или тесного сближения) ветвей  $M_s^I(C)$  и  $M_s^{IV}(C)$ . Поэтому следует принимать во внимание, как минимум, два варианта обработки:

- 1) считая, что изображающая точка осталась на линии 2 можно продолжить использование параболы (61);  
 2) считая, что изображающая точка перешла на линию постоянного уровня, проходящую через точки  $\Gamma' \approx 0.1$ ,  $\Gamma' \approx 0.96$  и  $\tilde{M}_s^{IV} \rightarrow (0.256, 0.268)^{IV}$  для ветви  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$ .

Полагая, что для концентраций Ni меньших 30% ветвь  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$  уже не совпадает с линией 2, для линии постоянного уровня (части ветви  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$ ), проходящей через точки  $\Gamma' \approx 0.1$ ,  $\Gamma' \approx 0.96$  и  $\tilde{M}_s^{IV} \rightarrow (0.256, 0.268)^{IV}$ , можно в качестве простейшей аппроксимации использовать прямую  $\Gamma'(\Gamma')$ :

$$\Gamma'(\Gamma') = -4.4359\Gamma' + 1.4036. \quad (95)$$

В соответствии с (93) для величины  $|\varepsilon_d - \mu|$  следует брать меньшее значение, чем для 30%Ni, а именно  $|\varepsilon_d - \mu| \approx 0.18864$  эВ. С учетом (92) находим значение  $a_0 \approx 2.091 \approx 2.1$ , практически совпадающее с использованной ранее в [1,4] величиной 2.1 при высокотемпературной оценке вклада  $\Gamma'(T)$ . Чтобы оценить отличие, появляющееся после смещения отображающей точки с параболической “траектории” (61) на ветвь (95), приведем два набора значений параметров. Для вариантов 1 и 2 соответственно имеем:

$$\begin{aligned} |\varepsilon_d - \mu| \approx 0.18864 \text{ эВ}, \quad M_s' \approx 0.12025, \quad \Gamma' \approx 0.9422, \quad a_0 \approx 2.091, \\ \Gamma'(T) \approx 0.1257, \quad \Gamma_e' \approx 0.8165, \end{aligned} \quad (96)$$

$$\begin{aligned} |\varepsilon_d - \mu| \approx 0.18864 \text{ эВ}, \quad M_s' \approx 0.12025, \quad \Gamma' \approx 0.8702, \quad a_0 \approx 2.091, \\ \Gamma'(T) \approx 0.1257, \quad \Gamma_e' \approx 0.7445. \end{aligned} \quad (97)$$

Сравнение (96) и (97) с (94) показывает резкое уменьшение величины  $\Gamma_e'$  при переходе к сплаву с 29%Ni. В физическом отношении за таким изменением стоит переход от двойникового мартенсита, для которого характерен вклад  $\Gamma'(d_{tw}) \approx 0.1$ , к пакетному мартенситу, не имеющему внутренних двойников превращения.

**Концентрация 31%Ni.** Обработка данных для случая Fe-31Ni с учетом (92) и (93) дает:

$$\begin{aligned} |\varepsilon_d - \mu| \approx 0.23056 \text{ эВ}, \quad M_s' \approx 0.08606, \quad \Gamma' = 0.9704, \quad a_0 \approx 0.5485, \\ \Gamma'(T) \approx 0.0236, \quad \Gamma_e' \approx 0.9468. \end{aligned} \quad (98)$$

**Концентрация 32%Ni** характеризуется значениями:

$$|\epsilon_d - \mu| \approx 0.25152 \text{ эВ}, M_s' \approx 0.07647, \Gamma' = 0.97661, a_0 \approx 0.34195,$$

$$\Gamma'(T) \approx 0.01307, \Gamma_e' \approx 0.96354. \tag{99}$$

**Сплав Fe–31Ni–0.28C.** Поскольку при аппроксимации (61) рост  $D_c$  в сплаве Fe–31Ni–0.28C по сравнению со сплавом Fe–31Ni возможен при увеличении  $|\epsilon_d - \mu|$ , примем формально, что добавление углерода сопровождается дополнительным увеличением  $|\epsilon_d - \mu|$  на 30%. Тогда, полагая, согласно [25], что температура  $M_s = 165 \text{ К}$ , находим:

$$|\epsilon_d - \mu| \approx 0.29973, M_s' \approx 0.04748, \Gamma' = 0.99098,$$

$$a_0 \approx 0.05082, \Gamma'(T) \approx 0.0012065, \Gamma_e' = 0.989773. \tag{100}$$

Подставляя найденные значения параметров в (87), при  $A=1, n=1, v_s=10^6 \text{ м/с}$ , легко получаем  $D_c$ , представленные в сводной табл.2 вместе с используемыми параметрами:

Таблица 2

**Расчетные значения критического размера зерна для систем разного состава при аппроксимациях (61) и (95) и параметрах  $A=1, n=1, v_s=10^6 \text{ м/с}$**

состав	$ \epsilon_d - \mu $ эВ	$M_s'$	$\Gamma'$	$a_0$	$\Gamma'(T)$	$\Gamma_e'$	$D_c$ мкм
29%Ni	0.18864	0.12025	0.8702	2.091	0.1257	0.7445	0.34
30%Ni	0.2096	0.1	0.96	1	0.05	0.91	0.874
31%Ni	0.23056	0.08606	0.9704	0.5485	0.0236	0.9468	1.34
32%Ni	0.25152	0.07647	0.97661	0.34195	0.01307	0.96354	1.8
31Ni 0.28C	0.29973	0.04748	0.99098	0.05082	0.001206	0.98977	5.25
$C^*_{Ni}$	$\neq 0$	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>	$\infty$

## 5.2. Сравнение с экспериментальными данными по влиянию химического состава на величину $D_c$

На рис. 14, взятом из [29], приведен график наблюдаемой зависимости  $D_{cp}$  от концентрации Ni. Интересно, что для 29% и 30%Ni имеет место хорошее согласие данных графика (0.3мкм и 0.8 мкм соответственно) и расчета  $D_c$  (см. Табл.2). Небольшое (около 10%) превышение расчетных данных легко устраняется понижением значений  $|\epsilon_d - \mu|$  (напомним, см. п. 3.6, должно выполняться неравенство  $D_c < D_{cp}$ ).



При концентрациях 31% и 32% Ni, наоборот, экспериментальные данные для  $D_{cp}$  (1.8мкм и 3.5мкм соответственно) превышают расчетные значения  $D_c$  в 1.34 и в 1.94 раза. Разумеется, эти отклонения можно было бы устранить, перейдя от (93) к нелинейному варианту концентрационной зависимости  $|\epsilon_d - \mu|$ .

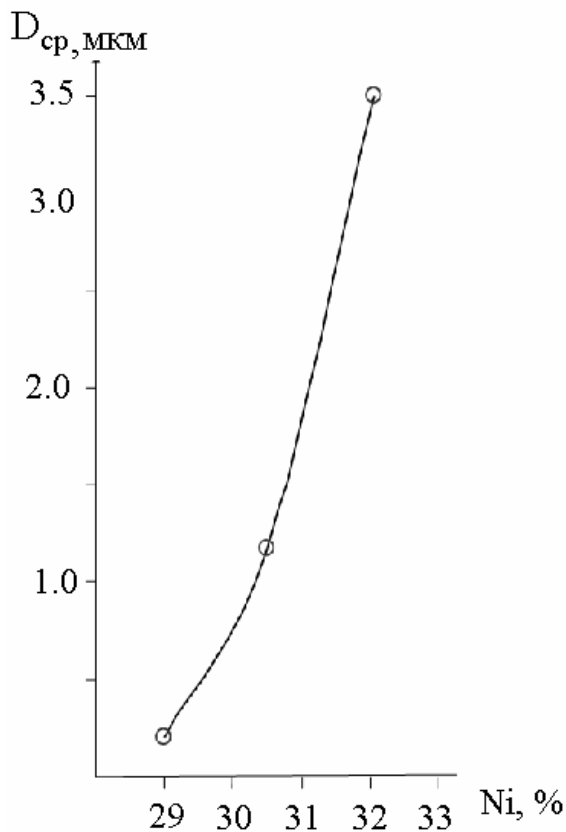


Рис. 14. Экспериментальные данные [29] о  $D_{cp}$  для сплавов Fe – Ni при концентрации Ni (29 – 32) %

Однако мы этого делать не будем, помня о том, что  $D_c$  нельзя отождествлять с  $D_{cp}$ . Кроме того, как отмечалось при обсуждении значений фактора  $n$  в связи с соотношением (16), изменению  $n$  от 1 до 2 соответствует изменение положения дислокационного сегмента единственной дислокации от границы к центру зерна. Поскольку значение  $D_c$  прямо пропорционально  $n$ , то указанные выше различия значений  $D_c$  и  $D_{cp}$  можно было бы устранить при выборе вместо  $n = 1$  значений  $n = 1.34$  и  $n = 1.94$ .

Аналогичные пояснения можно сделать относительно выполнения требования (91). Действительно, снижением  $|\epsilon_d - \mu|$  для содержания 31% Ni легко получить  $D_{c1} \approx 1$  мкм, а переходом от  $n=1$  (для которого приведены данные в таблице 1) к  $n = 2$  для сплава Fe-31Ni-0.28C получить  $D_{c2} \approx 10.5$  мкм  $\approx 10D_{c1}$ . Разумеется, формально увеличение  $n$  будет сопровождаться ростом  $D_c$  для любых составов, однако возрастание числа  $n$  (до  $n=2$ ) в присутствии углерода может быть обусловлено влиянием атмосферы примеси внедрения, образуемой вблизи дислокации.

Укажем еще одну особенность. Добавление углерода должно сопровождаться ростом доли вклада  $\Gamma'(C)$  в  $\Gamma_e'$ . Действительно, напомним, что добавление одного весового % C снижает температуру  $M_s$  в системе Fe–C до того же уровня, что и добавление 22% Ni в системе Fe–Ni. Поэтому на основе анализа [1,4] можно было бы ожидать дополнительного вклада в  $\Gamma_e'$ , превышающего 0.1. Поскольку значения  $\Gamma_e'$  ограничены условием  $\Gamma_e' \leq 1$ , а  $\Gamma_e'$  для Fe–31%Ni отстоит от 1 только на 0.05, то возможным следствием должно стать либо сокращение вклада  $\Gamma'(d_{tw})$  (это привело бы к росту ширины пластинок микродвойников), либо сокращение вклада в  $\Gamma'(C)$  от рассеяния на ионах никеля (это привело бы к перераспределению электронов, то есть к изменению атомных электронных конфигураций). Последнее вполне вероятно, если учесть, что в концентрированном железо - никелевом сплаве часть октаэдрических кластеров, содержащих атомы внедренного углерода, будет обязательно содержать и ионы никеля.

Большой интерес представляет динамическое состояние вблизи точки  $\Gamma_e' \approx 1$ . Действительно, наличие двойников превращения для сплавов с низкими температурами  $M_s$  указывает на высокую восприимчивость электронной подсистемы к коротковолновым смещениям конечных амплитуд. Поскольку вклад  $\Gamma'(d_{tw})$  входит в  $\Gamma_e'$ , то, в случае сохранения высокого уровня коротковолновых смещений и в непосредственной близости к абсолютному нулю температур, можно считать, что разность зарядовых чисел для ионов железа и никеля существенно не изменяется при переходе от концентрации 32% Ni к предельной  $C_{Ni}^*$ . Если же вклад  $\Gamma'(d_{tw})$  резко сокращается, то выполнения условия  $\Gamma_e' = 1$  с обращением в нуль температуры  $M_s$  означает возрастание разности зарядовых чисел ионов. Это вполне возможно, поскольку при значительных концентрациях Ni возрастает вероятность возникновения кластеров с ближним порядком, в которых из-за перераспределения электронов между атомами Fe и Ni изменяются эффективные заряды ионов, так что может существенно усиливаться рассеяние электронов s-зоны. Косвенно в пользу данного варианта свидетельствует, по-видимому, снижение практически до нуля коэффициента линейного расширения [69] для системы Fe– $C_{Ni}^*$ . Подчеркнем, наконец, что найденные значения  $D_c$  через процедуру отображения на плоскость переменных ( $T'$ ,  $\Gamma'$ ) связаны с конкретным вариантом аппроксимации (61) для низкотемпературной области на линии 2. Полезно рассмотреть и другой вариант аппроксимации в окрестности значений  $\Gamma_e' \leq 1$ , чтобы проверить, требуются ли изменения значения  $n$  в пределах от 1 до 2 для согласования с данными экспериментов или достаточно учесть вариацию параметра  $|\epsilon_d - \mu|$ .

### 5. 3. Факторы, отражающие структурную чувствительность $D_c$

В конце п. 3.6 отмечался пример зависимости  $D_{cp}$  от способа приготовления ансамбля зерен для образцов одного и того же состава (Fe-32%Ni), полученных [29] быстрой закалкой из расплава и по методу “деформация-отжиг”. Непосредственное влияние внутризеренной дислокационной структуры на величину  $D_c$  в (87), как уже обсуждалось, отражает параметр  $n$ . Динамическая структура кооперативных коротковолновых смещений учитывается в факторе  $\Gamma_e'$  вкладом  $\Gamma'(d_{tw})$ . Однако, важнейшим фактором, способным обеспечить скачкообразное изменение  $D_c$ , является вклад  $\Gamma'(C)$ , обусловленный разностью зарядовых чисел ионов основного компонента (железа) и легирующего элемента (например, никеля) для коллективизированных  $s$ -электронов. Анализ, выполненный в [70], позволяет считать, что четвертая ветвь  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$ , реализуемая высокоскоростным охлаждением, соответствует минимально возможному значению параметра решетки аустенита, достижимому в процессе охлаждения. Однако этот вывод относится к однородным ненапряженным состояниям. По-видимому, образцы, полученные закалкой из расплава и не прошедшие отжига, сохраняют высокий уровень закалочных напряжений. В результате, возникнут волны зарядовой (и спиновой) плотности за счет пространственного перераспределения имеющихся коллективизированных электронов между зонами растяжения и сжатия. Кроме того, априори можно было бы ожидать, что в зонах растяжения электронная конфигурация железа изменяется в сторону увеличения  $s$ -электронов, тогда как в зонах сжатия часть  $s$ -электронов никеля переходит в  $d$ -состояния (напомним, никель обладает наиболее компактной  $d$ -оболочкой среди  $3d$ -элементов). В обоих случаях изменения электронных конфигураций атомов вели бы к уменьшению вклада  $\Gamma'(C)$ , пропорционального квадрату разности зарядовых чисел ионов железа и никеля. В соответствии с (87) уменьшение  $\Gamma'(C)$ , а значит, и  $\Gamma_e'$ , сопровождается снижением значения  $D_c$ . При одноосном характере напряжений, как в области сжатия, так и в области растяжения, найдутся ориентировки мартенситных кристаллов, для которых приложенные напряжения снижают барьер для зарождения. Поскольку обычно приложенные напряжения повышают температуру  $M_s$ , на первый взгляд, имеется противоречие с наблюдаемым снижением  $M_s$  на 40–50К. Однако, как показывают оценки [1, 4], деформация сжатия  $2.15 \cdot 10^{-3}$  способна снизить значение  $|\epsilon_d - \mu|$  для спин-поляризованных состояний на  $8.4 \cdot 10^{-3}$  эВ, что приблизительно соответствует 100К по температурной шкале. Если отождествлять температуру  $M_{s\infty}$  с температурой  $\tilde{T}_\infty$ , оптимальной для генерации управляющих волн, то из (89) очевидно, что  $\tilde{T}_\infty = \tilde{T}(\infty) \sim |\epsilon_d - \mu|$ . Аналогичный результат, как будет показано ниже, имеет место и для

других (непараболических) аппроксимаций. Значит, деформация сжатия  $10^{-3}$  (типичный порядок предела упругости) приведет к снижению  $M_{\infty}$  приблизительно на 50К, что и наблюдается. Заметим, что снижение  $|\varepsilon_d - \mu|$  способствует повышению  $D_c$ . Значит, изменения факторов  $\Gamma'(C)$  и  $|\varepsilon_d - \mu|$  и их влияние на  $D_c$  имеют противоположный характер. Подчеркнем, однако, что в условиях “несжимаемости” решетки в состояниях, соответствующих четвертой ветви, рассчитывать на значительные изменения  $\Gamma_e'$  не приходится. Тогда главную роль играет изменение  $|\varepsilon_d - \mu|$ , и  $D_c$  скорее растет, чем убывает. Это еще один аргумент в пользу сделанного в п. 3.6 вывода о чисто формальном сопоставлении  $D_{cp}$  с размером 70нм, оцененным в [29] для состояния, полученного при быстрой закалке из расплава.

В качестве дополнительного аргумента для исключения размера 70 нм из области значений  $D_c$  в случае сплавов учтем, что из формулы (87) следует выражение для минимального размера  $D_c$ , формально достигаемое при  $\Gamma_e' = 0$ . Заметим, однако, что реальные значения  $\Gamma_e'$  для концентрированных сплавов удовлетворяют неравенствам  $0.5 < \Gamma_e' < 1$ . Подставляя в (87)  $A=1$  и  $1 - \Gamma_e' \approx 0.5$ , находим:

$$D_c = \frac{\hbar n 10^2 v_s}{2|\varepsilon_d - \mu|}. \quad (101)$$

При  $n=1$ ,  $v_s=10^6$  м/с,  $\hbar=1.054 \cdot 10^{-34}$  Дж·с,  $|\varepsilon_d - \mu| \approx 0.2$  эВ имеем  $D_c \approx 0.16$  мкм = 160 нм. Поскольку значение  $10^8$  м/с для фактора  $10^2 v_s$  хорошо согласуется со всей остальной совокупностью данных, нецелесообразно его изменять в сторону уменьшения (для выполнения неравенства  $70 \text{ нм} < D_c$  в случае концентрированных сплавов). Поэтому значение 70нм мы будем считать выпадающим из области значений  $D_c$  (по крайней мере, для сплава Fe–32%Ni). Заметим, что полученная оценка (101) неплохо коррелирует с качественной оценкой (22).

Очевидно также, что самое малое значение  $D_c = D_{cmin}$  должно наблюдаться в чистом железе, то есть при неформальном равенстве  $\Gamma_e' = 0$ . Использование, как и выше, значений  $n=1$ ,  $v_s=10^6$  м/с,  $\hbar=1.054 \cdot 10^{-34}$  Дж·с, но при  $|\varepsilon_d - \mu| \approx 0.237$  эВ, принимавшемся в [1, 4] для чистого железа, и  $\Gamma_e' = 0$ , приводит к значению  $D_{cmin} \approx 67.5$  нм. Этот результат, насколько известно авторам, экспериментально не проверялся. В связи с близостью полученной оценки для чистого железа с обсуждавшимся выше значением  $D_{cp} \approx 70$  нм в [29] для состояния, полученного при быстрой закалке из расплава системы Fe–32%Ni, в качестве маловероятной гипотезы можно

допустить, что в процессе изготовления образцов возникло статистически значимое количество зерен, сильно обедненных никелем.

Для дополнения предложенной качественной интерпретации полезно рассмотреть описание низкотемпературной части ветви  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$  с помощью аппроксимации вида:

$$1 - \Gamma' = B (T')^P, \quad (102)$$

полагая  $P > 2$ .

#### 5.4. Оптимальная температура генерации при аппроксимации

$1 - \Gamma' = B (T')^P$  для низкотемпературного участка ветви  $\tilde{M}_s^{IV}$

Проведенное в п. 5.1. рассмотрение предполагало составной вариант “траектории”, для ветви  $\tilde{M}_s^{IV}$ , включающий участок линии 2. Между тем, вполне реалистичен вариант, при котором низкотемпературный участок ветви  $\tilde{M}_s^{IV}$  вместо участка линии 2 задается кривой (102) при  $P > 2$ . Как отмечалось в п. 4.5, при аппроксимации ветви  $\tilde{M}_s^I(C)$  параболой, для реализации пересечения ветвей  $\tilde{M}_s^I(C)$  и  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$  степенная аппроксимация ветви  $\tilde{M}_s^{IV}(C)$  должна иметь доминирующую степень выше второй. Учитывая, что температурные вклады в  $\Gamma'(T)$  содержат такие степени, подобная аппроксимация представляется естественной.

Рассмотрим в качестве примера зависимость (102) при  $P=5$ , уже использованную при выборе температурной зависимости (92):

$$1 - \Gamma' = B (T')^5. \quad (103)$$

Допустим, что кривая (103) проходит через точку ( $T'=0.1$ ,  $\Gamma'=0.96$ ), однако эту точку заранее ассоциировать с системой Fe–30 Ni не будем. Параметр  $B$  находим из требования прохождения кривой (103) через точку (0.1, 0.96). Тогда  $B=4 \cdot 10^3$  (ясно, что  $B=4 \cdot 10^{P-2}$  при других  $P$ ).

Прежде, чем вести отображение на плоскость ( $T'$ ,  $\Gamma'$ ), заметим, что совместное использование (102) и (87) позволяет при известных значениях  $M_s$  и  $D_c$  установить значения  $|\epsilon_d - \mu|$ , не прибегая к допущениям типа (93). Если считать, что единственный зависящий от температуры вклад в затухание электронов пропорционален  $(T')^P$ , то можно оставить в левой части (102) не зависящий от температуры вклад  $\Gamma_e'$  и перенести в правую часть температурно зависящий вклад вида  $\Gamma'(T') = \beta(T')^P$ . Тогда,

приравнивая между собой выражения для  $1-\Gamma_e'$ , найденные из (102) и (87), получим:

$$|\epsilon_d - \mu|^{P-1} = \frac{4(B + \beta)D_c (k_B M_s)^P}{\hbar n 10^2 v_s} \quad (104)$$

Величину  $\beta=5 \cdot 10^3$  находим, полагая, что температурный вклад  $\Gamma'_s(T)$ , оцениваемый с помощью (56), (60) и (92), при  $T'=0.1$  совпадает с  $\beta(T')^5$ .

В табл. 3 приведены результаты расчета с помощью (104) при  $P=5$ ,  $n=1$ ,  $v_s=10^6$  м/с,  $B=4 \cdot 10^3$ ,  $\beta=5 \cdot 10^3$ ,  $\hbar=1.054 \cdot 10^{-34}$  Дж·с,  $k_B=1.38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К и экспериментальных значениях  $D_{cp}^*$ ,  $D_c^{**}$  и  $M_s$  (включен для сравнения и сплав Fe-29Ni, который, вообще говоря, можно рассматривать, используя другую аппроксимацию). Данные  $D_{cp}^*$  взяты из [29], а данные  $D_c^{**}$  соответствуют значениям  $D_c$ , полученным при обработке зависимостей  $M_s(D)$  из [25]. Использование (87) предполагает, что указанные значения  $D_{cp}^*$  обрабатываются в качестве  $D_c$  (см. обсуждение в п.5.5.3).

Таблица 3

**Расчетные значения критического размера зерна для систем разного состава при аппроксимации (103) и параметрах  $B=4 \cdot 10^3$ ,  $\beta=5 \cdot 10^3$ ,  $n=1$ ,  $v_s=10^6$  м/с**

состав	$M_s$ К	$D_{cp}^*$ , $D_c^{**}$ мкм	$ \epsilon_d - \mu $ эВ	$M_s'$	$\Gamma' = \Gamma_e'$
29%Ni	263	0.3*	0.177098	0.128085	0.689734
30%Ni	243	0.8*	0.205056	0.102209	0.899610
31%Ni	230	1**	0.202420	0.098001	0.918643
31%Ni	230	1.8*	0.234461	0.084609	0.960977
32%Ni	223	3.5*	0.266370	0.072207	0.982333
31Ni 0.28C	165	10**	0.237649	0.059883	0.993069
$C^*_{Ni}$	<b>0</b>	$\infty$	<b><math>\neq 0</math></b>	<b>0</b>	<b>1</b>

На рис. 15 приведен график зависимости  $D_c$  от  $\Gamma_e'$

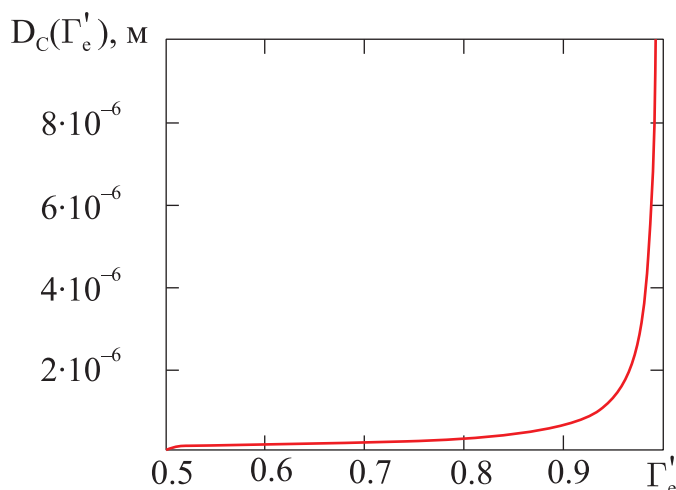


Рис.15. Расчетная зависимость  $D_c(\Gamma_e')$  при  $n=1$ ,  $\epsilon_d-\mu \approx 0.2376$  эВ. Для Fe-31Ni-0.28C:  $\Gamma_e'=0.993069$ ,  $D_c=10$  мкм

## 5. 5. Обсуждение результатов

### 5. 5. 1. Предварительные итоги

1. Формула (87) позволяет описать любое наблюдаемое значение  $D_c$ , не используя каких-либо экзотических диапазонов значений параметров. Интересно, что не потребовалось варьировать скорость электронов - при всех расчетах использовано одно и то же значение  $v_s=10^6$  м/с.
2. Вариации параметров  $a_0$  (при аппроксимации (61)) и  $|\epsilon_d - \mu|$  носят физически обоснованный систематический характер. Как для данных  $D_{cp}^*$ , так и для  $D_c^{**}$  имеет место ожидаемое изменение параметра  $|\epsilon_d - \mu|$ , неплохо согласующееся с предположением (93). Разумеется, конкретный вид зависимостей (92) и (93) может уточняться.
3. Переход от аппроксимации (61) к (103) устраняет необходимость использовать значения  $n$ , отличающиеся от 1. Это свидетельствует в пользу картины зарождения вблизи дислокации, смещенной из центра к границе зерна. Случайные изменения параметра  $n$ , возможно, являются основной причиной разброса данных при измерении  $M_s(D)$ .
4. Использование аппроксимации (103) позволяет легко удовлетворить требование (91). Это означает, что в диапазоне температур (250÷100) К доминирует вклад в затухание электронов, пропорциональный  $T^5$ .

### 5.5.2. Учет влияния изменения температурных вкладов в затухание электронов

Из (103) легко записать явный вид для температуры  $\tilde{T}(D)$ , аналогичный (89):

$$\tilde{T}(D) = \tilde{T}_\infty \sqrt[5]{1 - D_c/D}, \quad \tilde{T}_\infty = \tilde{T}(\infty) = \frac{|\epsilon_d - \mu|}{k_B} \sqrt[5]{\frac{1 - \Gamma_e'}{B + \beta}}. \quad (105)$$

Как обсуждалось в п. 5.1, пропорциональность  $\tilde{T}_\infty$  и  $|\epsilon_d - \mu|$  позволяют естественно объяснить понижение температуры  $M_s$  влиянием закалочных напряжений на величину  $|\epsilon_d - \mu|$ . Тривиальное обобщение для случая (102) при  $1 \leq P \leq 5$  дает:

$$\tilde{T}(D) = \tilde{T}_\infty \sqrt[P]{1 - D_c/D}, \quad \tilde{T}_\infty = \tilde{T}(\infty) = \frac{|\epsilon_d - \mu|}{k_B} \sqrt[P]{\frac{1 - \Gamma_e'}{B + \beta}}, \quad B = 4 \cdot 10^{P-2}, \quad (106)$$

$$D_c = \frac{\hbar n 10^2 v_s}{4|\epsilon_d - \mu|(1 - \Gamma'_e)}. \quad (107)$$

Соотношения (106) показывают, что описание температуры  $M_s(D) = \tilde{T}(D)$ , как и  $M_{s\infty} = \tilde{T}_\infty$ , при смене доминирующей степени  $P$  температурной зависимости затухания электронов должно осуществляться простой сменой параметра  $P$ . Ясно, что при температурах (250÷100)К доминирует вариант  $T^5$  (обусловленный электрон-фононным рассеянием), дающий хорошо согласующиеся с экспериментальными данными результаты (возможно вплоть до нескольких десятков градусов по абсолютной шкале температур). Несмотря на это при переходе к температурам  $T \sim 1$ К вариант  $T^5$  должен быть заменен на  $T^2$  (обусловленный, например, электрон-электронным рассеянием). Вариант описания типа (90) с зависящим от температуры коэффициентом удобен для использования при наличии двух (и более) одновременно значимых температурных зависимостей вкладов в затухание  $s$ - электронов.

### 5.5.3. Оценка различия параметров $D_{cp}$ и $D_c$

Проверим высказанное ранее в п. 3.6 утверждение о возможной близости  $D_{cp}$  и  $D_c$ , полагая в (106)  $M_{s\infty} = \tilde{T}_\infty$ ,  $M_s(D_{cp}) = \tilde{T}(D_{cp}) = M_s^*(D_{cp}) = 77$ К. Тогда из (106) получаем:

$$\sqrt[P]{1 - D_c / D} = M_s^*(D_{cp}) / M_{s\infty} \quad (108)$$

или

$$D_c / D_{cp} = 1 - (M_s^*(D_{cp}) / M_{s\infty})^P. \quad (109)$$

Для сплава Fe–31Ni, например, при  $P=5$ ,  $M_{s\infty} = \tilde{T}_\infty = 230$ К и  $D_c \approx 1$ мкм из (109) находим  $D_c / D_{cp} \approx 0.996$  и  $D_{cp} \approx 1.004 D_c \approx 1,004$ мкм. Аналогично, для сплава Fe–32Ni при  $P=5$ ,  $M_{s\infty} = \tilde{T}_\infty \approx 223$ К из (109) имеем  $D_c / D_{cp} \approx 0.9951$  и  $D_{cp} \approx 1.005 D_c$ . При переходе к доминирующей квадратичной зависимости от температуры затухания электронов (при выборе в (106) и (109) параметра  $P=2$ ) значение  $D_c / D_{cp}$  снизится до 0.888 и  $D_{cp} \approx 1.126 D_c$  для Fe–31Ni и, соответственно,  $D_{cp} \approx 1.135 D_c$  для Fe–32Ni. Самое огрубленное описание при  $P=1$  даст  $D_{cp} \approx 1.5 D_c$  для Fe–31Ni и  $D_{cp} \approx 1.53 D_c$  для Fe–32Ni. Таким образом, при высоких степенях  $P$  допущение о близости  $D_{cp}$  и  $D_c$  оправданно. При огрубленном описании следует учитывать их существенное различие.

Имеется и возможность расхождений между экспериментальными значениями  $D_{cp}^e$  и истинными  $D_{cp}$ , базирующаяся на твердой уверенности в



универсальности зависимости (32) применительно к описанию доли  $V_M$  объема мартенситной фазы в ходе автокаталитического превращения либо к зависимости  $M_s(D)$ . Тогда, ограничившись узким диапазоном размеров  $\Delta D$ , всегда можно найти такие  $D'$  и  $D_{cp}^e$ , чтобы наблюдаемые зависимости  $V'_M(D)$  в интервале  $(D' - \Delta D/2, D' + \Delta D/2)$  были близки к  $V_M''(D) \sim [1 - \sqrt{D_{cp}^e/D}]$ . Например, требуя одинаковой асимптотики при  $D \rightarrow \infty$ , запишем две огрубленные зависимости вида (30) и (32) для доли мартенсита  $V_M$ :

$$V'_M(D) = V_{M\infty} [1 - D_{cp}/D], \quad V_M''(D) = V_{M\infty} [1 - \sqrt{D_{cp}^e/D}]. \quad (110)$$

Приравнявая  $V'_M(D)$  и  $V_M''(D)$ , находим  $D'$ - точку пересечения кривых (110), вблизи которой возможна приближенная замена одной зависимости на другую:

$$D' = (D_{cp})^2 / D_{cp}^e. \quad (111)$$

В частности, беря в качестве  $D'$  точку 5.15 мкм, соответствующую центральной точке самого узкого диапазона в таблице 1, и подставляя найденное в [29] значение  $D_{cp}^e \approx 3.5$  мкм для этого диапазона, из (111) соответственно находим:

$$D_{cp} = \sqrt{D' D_{cp}^e} \approx 4.246 \text{ мкм}. \quad (112)$$

Таким образом, величина  $D_c$  при однократном огрубленном описании составит  $\frac{2}{3} \cdot 3.5 \approx 2.33$  мкм, а при двойном –  $\frac{2}{3} \cdot 4.246 \approx 2.83$  мкм.

Учет заметного различия  $D_c$  и  $D_{cp}$  позволяет сгладить ход изменения параметра  $|\epsilon_d - \mu|$  системы Fe–Ni в диапазоне концентраций (29–32)%Ni (в таблице 3 при обработке  $D_{cp}$  в качестве  $D_c$  заметен рост скорости изменения параметра  $|\epsilon_d - \mu|$  при переходе через концентрацию 31%).

#### 5.5.4. О возможном влиянии состояния границ зерен на результаты интегральной методики регистрации превратившегося объема

При интегральной методике регистрации больших долей автокаталитически превратившегося объема представляется вполне возможным влияние динамического фактора (41), способствующего стимуляции пороговой деформации в соседних зернах. При наличии зерен с релаксированной (после отжига) дислокационной структурой, по-

видимому, обеспечивается переизлучение волн с малыми потерями, и фактор (41) проявляется в полной мере. Заметим, зависимость  $M_s(D)$  по-прежнему описывается формулой (105) (допустимо описание и с помощью зависимости (90)).

Переход к зернам с нерелаксированными границами, приводит, вероятно, к сильному рассеянию цилиндрических волн и резкому снижению (если не исключению) влияния фактора (41) за счет преломления на границах зерен. Однако переизлучение цилиндрических волн поверхностями возникших мартенситных кристаллов должно сохраниться. Поэтому размер  $D_{cp} \approx 70$  нм – это, скорее всего, размер  $L_{min}$  областей аустенита свободных от дефектов к концу макровзрыва (см. окончание п. 3.2).

Подчеркнем, использование (90) позволяет описать предложенную в [25] зависимость  $M_s(D)$  при совпадении расчетных и экспериментальных точек во всем диапазоне значений температур  $M_s$  и размеров зерна  $D$ . Это показывает, что для детального согласования необходимо учитывать вклады в затухание s-электронов, пропорциональные как  $T^2$  так и  $T^5$ . Для иллюстрации на рис.16 приведены варианты расчетной зависимости (90)  $M_s(D)$ .

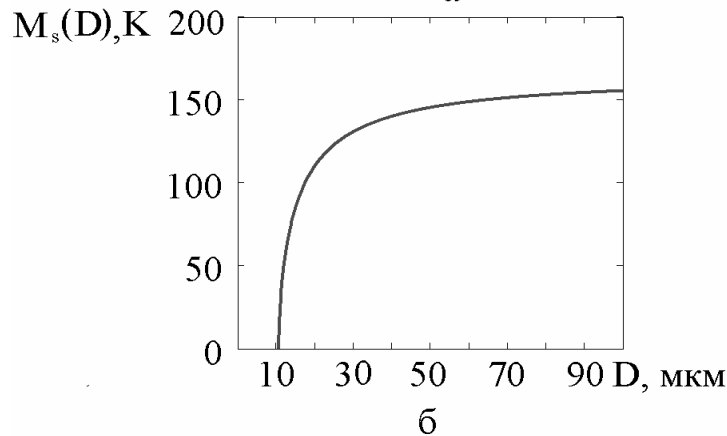
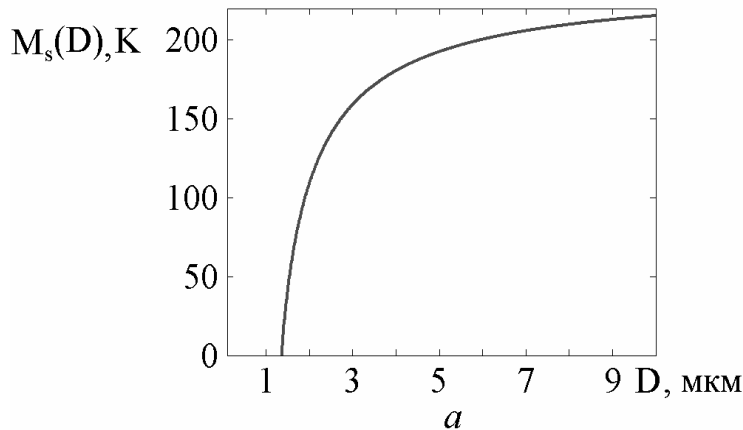


Рис. 16. Расчетная зависимость  $M_s$  от  $D$  при  $A=1, B=4$ :

а) Fe–31Ni:

$$M_{s\infty}=236\text{K}, n=1,$$

$$\varepsilon-\mu=0.23056\text{эВ},$$

$$\alpha_0=0.5485,$$

$$\Gamma'_e=0.9468,$$

$$D_c=1.34\text{ мкм};$$

б) Fe–31Ni–0.28C:

$$M_{s\infty}=164.1\text{K}, n=2,$$

$$\varepsilon-\mu=0.29973\text{эВ},$$

$$\alpha_0=0.05082,$$

$$\Gamma'_e=0.989773,$$

$$D_c \approx 10.5\text{ мкм}$$

### 5.6. Краткое резюме о температуре $M_s$ и критическом размере зерна

1. Проведенное рассмотрение подтверждает, на наш взгляд, что именно условие поддержания оптимальных условий генерации управляющих волн неравновесными электронами предопределяет зависимость  $M_s$  от всех значимых физических параметров. В основе описания лежит условие, обеспечивающее создание населенностей d-состояний над и под уровнем Ферми, за счет перераспределения d-электронов с участием промежуточных s-состояний. В компактной записи это условие (80, 81) выглядит исключительно просто и универсально, для удобства запишем его еще раз:

$$\Gamma_s'(D, C, T) = 1. \quad (113)$$

Выполнение (113) оказывается возможным при согласованном изменении параметров в диапазонах, соответствующих высоким уровням неравновесных добавок (обеспечивающих активность подсистемы d-электронов при инверсной населенности пар состояний).

Таким образом, имеются веские основания считать, что температура  $M_s$  соответствует оптимальной температуре генерации, а наблюдаемые концентрационные  $M_s(C)$  и размерные  $M_s(D)$  зависимости - прямое следствие динамической теории.

2. Описание экспериментальных данных согласуется с концепцией зарождения мартенситного кристалла в упругом поле одной дислокации при выполнении соотношения пространственных масштабов (12) и (16).

3. Найденная аналитическая зависимость (87) критического размера зерна  $D_c$  от физических параметров базируется на соотношениях неопределенностей для энергии и времени и пространственных масштабов (12) и (16) и поэтому имеет фундаментальный характер.

4. Использование аппроксимаций типа (102) в пространстве переменных ( $T'$ ,  $\Gamma'$ ) исключительно удобно в физическом и методическом отношении, так как устанавливает простую связь важнейшего наблюдаемого макропараметра - температуры  $M_s$  с результирующим значением микропараметра  $\Gamma_s$  затухания s-электронов.

5. Тем не менее, и зависимость (32) полезно иметь в виду при обработке экспериментальных данных, поскольку ей может соответствовать физически обоснованный сценарий реализации мартенситной реакции, обсуждаемый в п. 3.5.

---

---

## Глава 6

### Расчет доли мартенсита при атермической макрокинетики

В этой главе на основе соотношения пространственных масштабов, характерных для зарождения кристалла в упругом поле дислокации, и развитых представлений о природе критического размера зерна излагается симметричная модель ортогонального сочленения кристаллов, позволяющая легко оценивать число поколений мартенситных кристаллов и долю образовавшегося мартенсита (интегральную и для любого из поколений).

#### 6.1. Особенности атермической макрокинетики

Выше при обсуждении особенностей интегральных методик регистрации количества мартенсита в сплавах на основе железа при охлаждении уже говорилось, что  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситное превращение (МП) наблюдается в некотором интервале температур  $M_s - M_f$  (см., например, [14, 15]). Верхняя граница интервала  $M_s$  – температура начала МП в условиях отсутствия мартенситных кристаллов, а нижняя граница  $M_f$  – в условиях, когда объем исходной фазы заметно уменьшился за счет образования мартенсита. В ряде сплавов, например Fe- Ni при (30–34)% Ni, макроскопическая кинетика носит ярко выраженный атермический (автокаталитический, в пределе даже «взрывной») характер, когда в результате одного «взрыва» может образоваться порядка десятков процентов от полного количества мартенсита. Форма отдельного кристалла либо тонкопластинчатая, либо линзовидная с центральной тонкопластинчатой частью («мидрибом»), возникающей, как и пластинчатый кристалл, со сверхзвуковой скоростью, то есть мидриб образуется на первом этапе роста кристалла, задавая ориентацию его габитусной плоскости. Как правило, после каждого взрыва для возникновения последующего требуется дополнительное переохлаждение, а также имеет место тенденция морфологического подобия ансамблей

мартенситных кристаллов разных поколений (например, довольно типичны зигзагообразные комбинации). Эти особенности привели к попыткам описания наблюдаемых ансамблей как фрактальных структур (см., например, [71, 72]). Несмотря на значительные усилия, в частности при формулировке приемлемых для сравнения с экспериментом моделей самоподобных ансамблей и расчетов фрактальной размерности остаточного аустенита, результата, обладающего простотой и наглядностью для обработки результатов экспериментаторами, по мнению авторов, достичь не удалось. Полезно указать на причины сложившегося положения. Во-первых, отсутствует строгое подобие между ансамблями разных поколений (наблюдаются не только остроугольные, но и тупоугольные сочленения, а среди остроугольных зигзагообразных имеются несколько вариантов углов сочленения). Конечно, затруднение подобного типа можно преодолеть в рамках мультифрактального анализа. Однако при этом утрачивается простота и наглядность описания, и, кроме того, обычная обработка плоских изображений (сечений трехмерных распределений кристаллов) не является достаточной для описания реальных трехмерных ансамблей. Во-вторых, и это главное, при описании использовался формальный, феноменологический подход, не базировавшийся на физических представлениях о механизме зарождения и роста кристаллов мартенсита. В-третьих, увлечение вычислением фрактальной размерности привело к чрезмерному акцентированию проблемы, имеющей второстепенный характер по сравнению с расчетом доли превратившейся фазы, которую, в качестве макропараметра традиционно относили к области приложения термодинамики. Между тем, как показывает анализ, выполненный в гл. 3, 4, в динамической теории  $\gamma$ - $\alpha$  МП температура  $M_s$  рассматривается как оптимальная для генерации неравновесными электронами волн смещений атомов, управляющих ростом мартенситного кристалла. Начальный этап формирования кристалла  $\alpha$ - фазы интерпретируется как гетерогенное зарождение в упругих полях дислокаций. Уже отдельной дислокации достаточно для возникновения областей с благоприятным для зарождения типом деформации. Для дальнейшего принципиально важно, что поперечный размер  $d$  начального возбужденного состояния, задающий толщину мартенситного кристалла, связан, согласно (12) со средним расстоянием между дислокациями  $L$ :

$$d \sim 10^{-2} L. \quad (114)$$

Более общо величину  $L$  можно рассматривать как размер объема исходной фазы, свободный от дефектов. Тогда очевидно, что появление каждого поколения кристаллов сопровождается уменьшением свободного объема, а

значит, и уменьшением, согласно (114), толщины пластины (или мидриба линзовидного кристалла). На рис.17, взятом из [71], представлена оптическая металлография для трех вариантов переохлаждения ниже точки  $M_s$ , ярко демонстрирующая масштабирование зигзагообразных ансамблей.

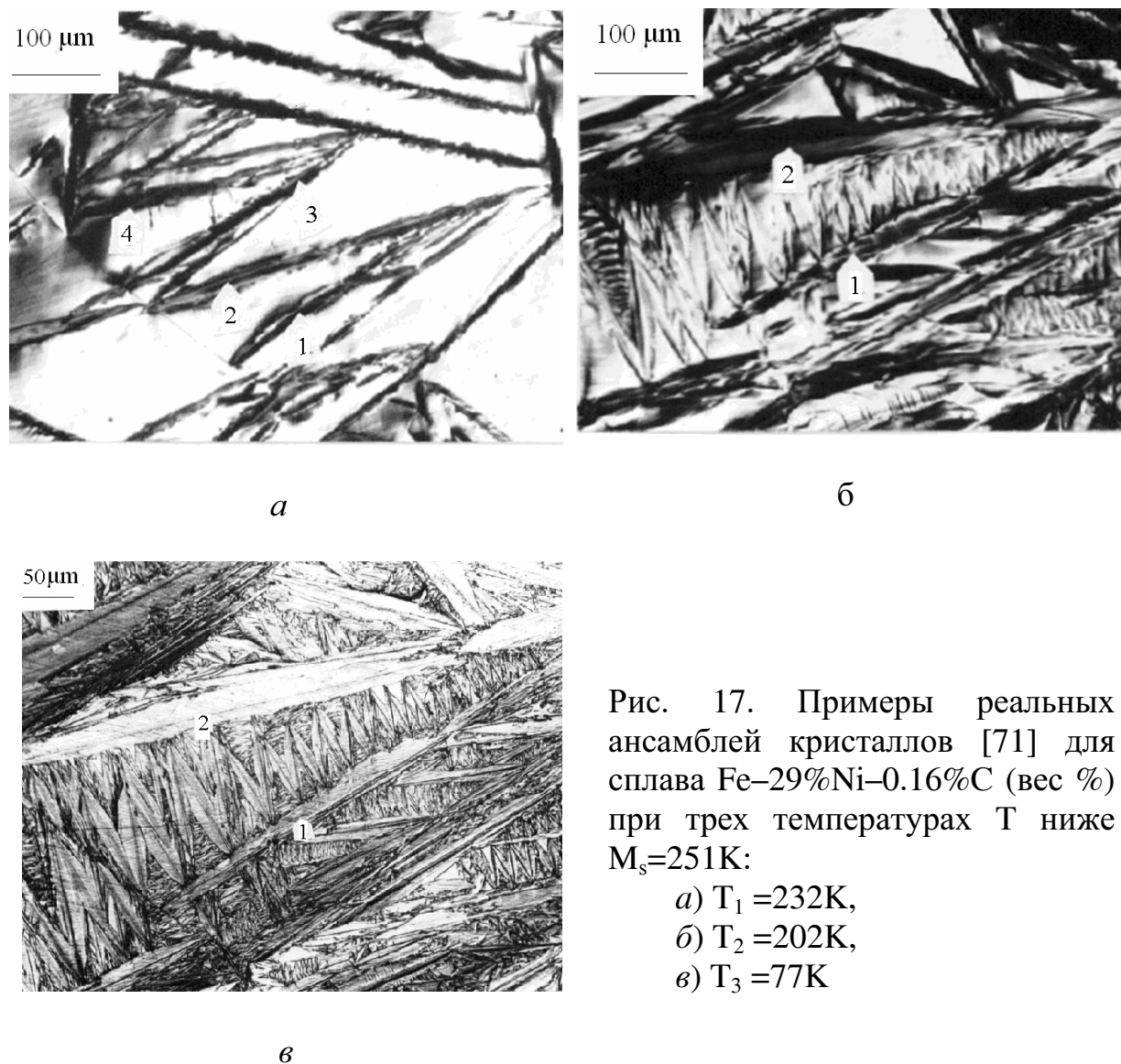


Рис. 17. Примеры реальных ансамблей кристаллов [71] для сплава Fe–29%Ni–0.16%С (вес %) при трех температурах  $T$  ниже  $M_s=251\text{K}$ :

*a)*  $T_1 = 232\text{K}$ ,

*б)*  $T_2 = 202\text{K}$ ,

*в)*  $T_3 = 77\text{K}$

Следовательно, соотношение (114) пространственных масштабов при зарождении кристалла позволяет задать естественный коэффициент подобия при рассмотрении последовательных поколений кристаллов мартенсита. Это означает, что для оценки такой важной макрохарактеристики, как доля превращенного аустенита, можно воспользоваться достаточно простой симметричной моделью сопряжения

кристаллов, правильно отражающей изменение масштаба свободного объема при превращении.

## 6.2. Методика проведения расчетов на примере плоской симметричной модели сопряжения кристаллов

При физической реализации самоподобных ансамблей число поколений всегда конечно. Поэтому полезно установить минимально допустимое значение  $L_{\min}$  еще совместимое с картиной управляемого волнового роста. Геометрический предел, согласно (17), при  $d \geq a$ , где  $a$  - параметр решетки аустенита, дает  $L_{\min} > 10^2 a \approx 36$  нм.

Разумеется, чисто геометрический предел дает нижнюю границу  $L_{\min}$ . Реальная картина богаче. Как показано в гл. 4, существует критический размер зерна  $D_c$ , ниже которого протекание  $\gamma$ - $\alpha$  МП оказывается невозможным. Наблюдаются зависимости  $M_s$  и  $D_c$  от концентрации второго компонента сплава, причем имеются особые концентрации  $C^*$ , задаваемые условиями  $D_c(C^*) \rightarrow \infty$ ,  $M_s(C^*) \rightarrow 0$ .

$L_{\min}$  и  $(D_c)_{\min}$  величины одного порядка и, по сути, задают один и тот же предельный масштаб. Как обсуждалось, реализация пороговых условий генерации управляющих волн, скорее всего, возможна для длин волн  $\lambda$ , превышающих  $a$  по порядку величины, тогда  $L_{\min} \sim (D_c)_{\min}$  возрастут, как минимум, на порядок (22) по сравнению с 36 нм, что уже соответствует типичным наблюдаемым в сплавах железа размерам  $(D_c)_{\min} \sim 1$  мкм.

Полагая  $C < C^*$ , прекращение МП можно рассматривать как следствие уменьшения размеров  $L_{\text{св}}$  связанных областей аустенита (не содержащих мартенситных кристаллов) при достижении условия

$$L_{\text{св}} \leq L_{\min} \approx 10^3 a \approx 0.36 \text{ мкм.} \quad (115)$$

Полезно установить номер  $n$  последнего поколения, совместимого с выполнением условий (114) и (115). Рассмотрим вначале наиболее простую (из-за высокой симметрии) и наглядную в геометрическом отношении плоскую модель с ортогональными парами кристаллов (крестообразное сочленение), два поколения которой представлены на рис.18. Подобную модель можно трактовать как плоское сечение образца с дислокациями, имеющими линии, ортогональные плоскости чертежа.

Долю объема  $\delta_M$ , испытавшего МП, и долю  $\delta_A$  оставшегося аустенита  $\delta_A = 1 - \delta_M$  можно выразить через  $n$  и параметр  $\chi$ , связывающий эффективную толщину  $d_{\text{эф}}$  кристалла в каждом  $j$ -поколении ( $1 \leq j \leq n$ ) с размером связанной области  $L_{\text{св}(j-1)}$  предыдущего поколения

$$d_{efj} = \kappa \cdot d_j = \kappa \cdot 10^{-2} L_{cb(j-1)} = \chi L_{cb(j-1)}, \chi = \kappa \cdot 10^{-2}, L_{cbj} = \left( \frac{1-\chi}{2} \right)^j L_{cb0}. \quad (116)$$

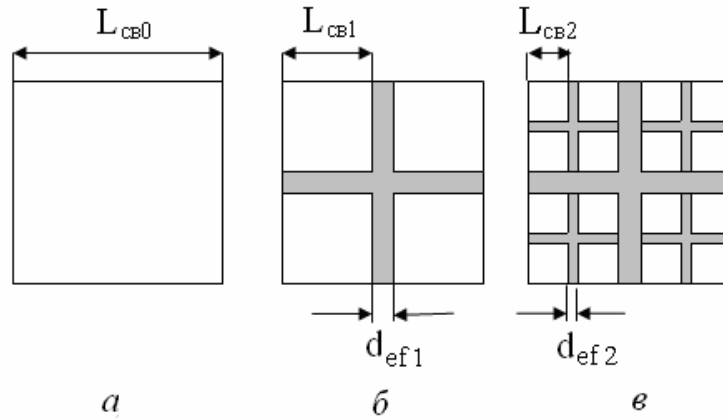


Рис.18. Плоская модель самоподобных ансамблей кристаллов:  
*а*- исходная фаза, *б*- первое поколение; *в*- первое и второе поколения

В (116)  $1 \leq \kappa \leq 10^2$  и не зависит от индекса  $j$ , нумерующего поколения, а  $10^{-2} \leq \chi < 1$ . Значения  $\kappa > 1$  допустимы, поскольку форма кристаллов может быть не только тонкопластинчатой, но и линзовидной, содержащей наряду с тонкопластинчатой регулярно двойникованной центральной частью (мидрибом), гораздо большую по объему обрамляющую «шубу», возникающую с меньшей скоростью по сравнению с мидрибом.

В  $j$ -ом поколении размер области  $L_{cbj}$ , свободной от кристаллов мартенсита, снижается по сравнению с исходным размером  $L_{cb0}$  в  $\left( \frac{1-\chi}{2} \right)^j$  раз. Если стартовое состояние аустенита соответствует хорошо отожженному монокристаллу с плотностью дислокаций  $\rho \approx 10^4 \text{ см}^{-2}$ , то  $L_{cb0} \approx 1/\sqrt{\rho} = 10^{-2} \text{ см} = 10^2 \text{ мкм}$ . При заданном  $L_{\min}$  число  $n$  реализуемых поколений, в соответствии с неравенством  $L_{cbn} \geq L_{\min}$  и равенством (116), удовлетворяет соотношению

$$n \leq [ \ln (L_{cb0} / L_{\min}) ] / [ \ln (2 / (1 - \chi)) ] \equiv n_{\max}, \quad (117)$$

то есть равно целой части величины  $n_{\max}$ . Поскольку приближение к особой концентрации  $C^*$  сопровождается ростом  $D_c$ , то при одном и том же  $L_{cb0}$  число  $n$  будет снижаться.

При расчете  $\delta_M$  удобно перейти от размерных  $L_{cbj}$  и  $d_{efj}$  к безразмерным  $\tilde{L}$  и  $\tilde{d}$ , путем деления на  $L_{cb0}$  (при этом  $\tilde{L}_{cb0} = 1$ , а  $0 < \tilde{L}_{cbj} < 1$ ). Тогда  $\delta_M$  численно совпадает с площадью, занятой  $n$  поколениями прямоугольных полос (сечений крестообразных сочленений кристаллов) в



квадрате единичной площади. С учетом (116) вклад  $j$ -го поколения  $\delta_{Mj}$  легко выразить через  $\chi$

$$\delta_{Mj} = 4^{(j-1)} \tilde{d}_{efj} [\tilde{d}_{efj} + 4 \tilde{L}_{cbj}] = \chi (2 - \chi) (1 - \chi)^{2(j-1)}. \quad (118)$$

При реализации  $n$  поколений кристаллов с помощью (118) находим  $\delta_M$  и  $\delta_A$

$$\delta_M = \sum_{j=1}^n \delta_{Mj} = 1 - (1 - \chi)^{2n}, \quad \delta_A = 1 - \delta_M = (1 - \chi)^{2n}. \quad (119)$$

Из (119) формально следуют очевидные предельные случаи:  $\delta_M = 0$ ,  $\delta_A = 1$  либо при  $n=0$  (исходная аустенитная фаза), либо при  $n \neq 0$  и  $\chi \rightarrow 0$  (бесконечно тонкие кристаллы);  $\delta_M \rightarrow 1$ ,  $\delta_A \rightarrow 0$  либо при  $\chi \rightarrow 1$  и  $n \neq 0$ , либо при  $0 < \chi < 1$  и  $n \rightarrow \infty$ . Последний вариант сопоставляет остаточному аустениту фрактальную структуру с размерностью

$$d_f = (\ln 4) [\ln (2 / (1 - \chi))]^{-1}, \quad 2 > d_f > 0. \quad (120)$$

Отметим, что из требования равенства фрактальных размерностей для разных фрактальных структур, сопоставляемых остаточному аустениту, по известному значению  $d_f$  легко найти значение  $\chi$  в нашей модели. Например, зигзагообразные поколения кристаллов в [71] при угле сочленения  $24^\circ$  и коэффициенте подобия 0.5 дают  $d_f \approx 1.356$ . Согласно (120), такая размерность в нашей модели имеет место при  $\chi \approx 0.2805$ , т.е. в (116) параметр  $k \approx 28$ , и в рассматриваемом случае объем «шубы» в 28 раз превышает объем мидриба. Существенно, что, выбирая указанную приведенную толщину  $\chi$ , можно обеспечить количественную близость описаний интегральных характеристик материала (пропорциональных объемным долям фаз) в разных моделях при конечных значениях  $n$ . Напомним, что в сплавах на основе железа  $\alpha$ -мартенсит ферромагнитен, и обработку результатов экспериментов, фиксирующих количество возникающего мартенсита, удобно вести по изменению намагниченности образца, испытывающего превращение [73]. Заметим, что двумерный вариант ортогонального сочленения в качестве модельного использовался в [74] при обсуждении фрактальной размерности. Ясно, однако, что фрактальная размерность в условиях конечного числа поколений играет сугубо вспомогательную роль и ее определение носит приближенный, а главное, необязательный характер.

### 6.3. Результаты расчетов долей мартенсита для плоской и трехмерной моделей

Табл. 4 иллюстрирует результаты расчета  $n$  и  $\delta_M$  для трех различных значений  $(L_{св})_{\min}$  при  $L_{св0} = 10^2$  мкм и пяти значениях  $\chi$  в двумерной модели. Включение в качестве  $(L_{св})_{\min}$  значений 3.6 мкм и особенно 34 мкм отражает возможность приближения к особой концентрации  $C^*$ , сопровождающегося ростом  $D_c$ .

Таблица 4

Реперные расчетные значения  $n$  и  $\delta_M$  в плоской модели

$(L_{св})_{\min}$ МКМ	$\chi = 0.01$		$\chi = 0.02$		$\chi = 0.1$		$\chi = 0.2$		$\chi = 0.3$	
	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$
0.36	8	0.1485	7	0.2464	7	0.7712	6	0.9313	5	0.9717
3.6	4	0.0773	4	0.1492	4	0.5695	3	0.7379	3	0.8823
34	1	0.0199	1	0.0396	1	0.19	1	0.36	1	0.51

Таким образом, принятая модель позволяет выразить  $\delta_M$  через параметры  $\chi$  и  $n$ , причем  $n$  зависит от  $(L_{св})_{\min}$  и  $\chi$ . Определение фрактальной размерности  $d_f$  остаточного аустенита (при моделировании или путем измерений), позволяет найти  $\chi$ , при котором модель может использоваться для адекватной количественной обработки экспериментальной информации.

Трехмерный вариант модели с тем же коэффициентом подобия  $(1-\chi)/2$  (см. рис.19) приводит к фрактальной размерности

$$d_f = (\ln 8) [\ln (2 / (1 - \chi))]^{-1}, \quad 3 > d_f > 0, \quad (121)$$

вкладу  $j$ -го поколения  $\delta_{Mj}$

$$\delta_{Mj} = 8^{j-1} \tilde{d}_{efj} [\tilde{d}_{efj}^2 + 6 \tilde{d}_{efj} \tilde{L} + 12 \tilde{L}_{свj}^2] = \chi (\chi^2 - 3\chi + 3) (1 - \chi)^{3(j-1)}. \quad (122)$$

и долям  $\delta_M$  и  $\delta_A$  от исходного куба единичного объема

$$\delta_M = \sum_{j=1}^n \delta_{Mj} = 1 - (1 - \chi)^{3n}, \quad \delta_A = 1 - \delta_M = (1 - \chi)^{3n}. \quad (123)$$

Табл. 5 иллюстрирует результаты расчета  $n$  и  $\delta_M$  для трех различных значений  $(L_{св})_{\min}$  при  $L_{св0} = 10^2$  мкм и пяти значениях  $\chi$  в трехмерной модели.

Очевидно, что снижение числа  $n$  до единицы при  $(L_{cb})_{\min} = 34 \text{ мкм}$  обусловлено большим значением критического размера (напомним, это возможно для сплавов при концентрациях легирующего элемента близких к выделенной концентрации  $C^*$ ).

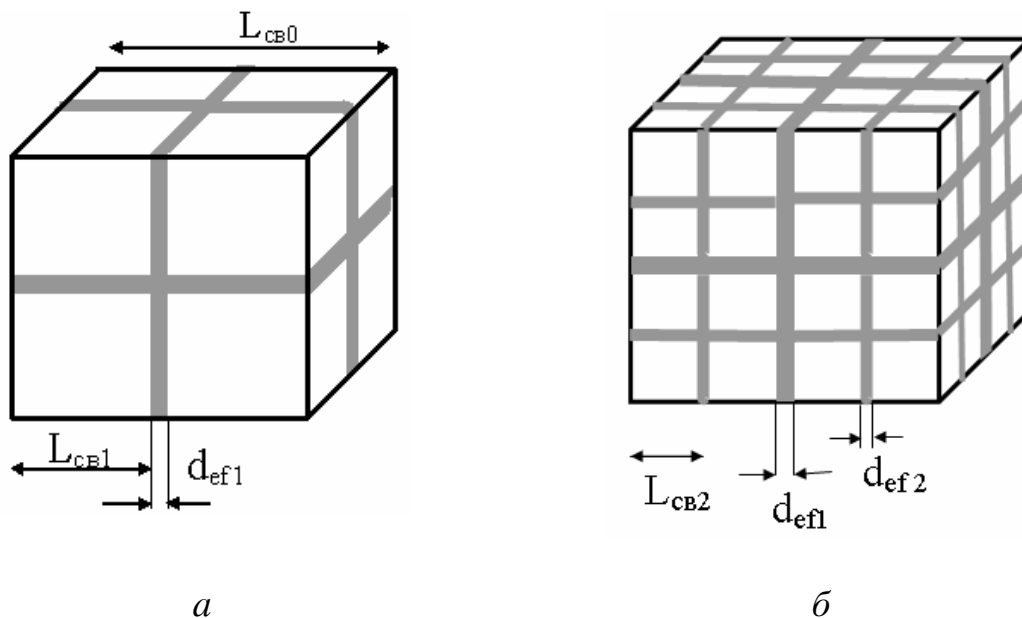


Рис.19. Трехмерная модель самоподобных ансамблей кристаллов: *a*- первое поколение; *б*- первое и второе поколения

Таблица 5

Реперные расчетные значения  $n$  и  $\delta_M$  в трехмерной модели

$(L_{cb})_{\min}$ мкм	$\chi = 0.01$		$\chi = 0.02$		$\chi = 0.1$		$\chi = 0.2$		$\chi = 0.3$	
	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$	$n$	$\delta_M$
0.36	8	0.2143	7	0.3457	7	0.8906	6	0.9820	5	0.9953
3.6	4	0.1136	4	0.2153	4	0.7176	3	0.8658	3	0.9596
34	1	0.0297	1	0.0588	1	0.2710	1	0.4880	1	0.6570

Принципиально важно, что расчет макропараметра  $\delta_M$  осуществлен на основе фундаментального соотношения масштабов (114) и параметров, установленных в динамической теории для процесса формирования отдельного кристалла. Поколения самоподобных ансамблей кристаллов являются упрощенным отражением динамической картины зарождения и роста кристаллов, тем не менее, в качественном отношении описание является верным, демонстрируя, каким образом может быть установлено значение макропараметра без привлечения термодинамики.

Не вызывает сомнений, что найденные соотношения могут оказаться пригодными в первом приближении и для количественной обработки

результатов. Если значение параметра  $\chi$  выбирается из независимых данных (например, для фрактальной размерности) легко сопоставить экспериментальные данные с расчетными для приращений  $\delta_{Mj}$  (122) в каждом последующем поколении. Заметим, что, согласно (118) и (122), вклады поколений соответствуют членам геометрической прогрессии. Каждое поколение естественно трактовать как автокаталитический «взрыв», после которого требуется понизить температуру из-за уменьшения пространственного размера связной области аустенита. Если требовать далее совпадения измеренной и расчетной (123) интегральных долей  $\delta_M$ , то можно найти число «взрывов»  $n$ , сопоставляемых в симметричной модели реальной автокаталитической реакции. Разумеется, сами соотношения (122) и (123) можно использовать для определения  $\chi$  и  $n$  из сопоставления с экспериментальными данными. В практическом плане кроме интегральной доли  $\delta_M$  удобно использовать данные о первом взрыве, поскольку эта доля сравнительно легко измеряется. В табл. 3 приведены доли  $\delta_{M1}$  мартенсита в объеме образца, рассчитанные с помощью (122) при  $j=1$ , зависящие только от значения  $\chi$  и соответствующие ожидаемому вкладу в  $\delta_M$  от первого «взрыва».

Таблица 6

**Объемная доля первого поколения мартенситных кристаллов**

$\chi$	$\chi = 0.01$	$\chi = 0.02$	$\chi = 0.1$	$\chi = 0.2$	$\chi = 0.3$
$\delta_{M1}$	0.0297	0.0588	0.271	0.488	0.657

В табл. 7 приведены доли мартенсита, приходящиеся на первый «взрыв», отнесенные ко всему объему мартенсита ( $\delta_M$  берется из табл. 5).

Таблица 7

**Доля кристаллов первого поколения в общем количестве мартенсита**

$(L_{св})_{\min}$ , МКМ	$\chi = 0.01$		$\chi = 0.02$		$\chi = 0.1$		$\chi = 0.2$		$\chi = 0.3$	
	$n$	$\delta_{M1}/\delta_M$	$n$	$\delta_{M1}/\delta_M$	$n$	$\delta_{M1}/\delta_M$	$n$	$\delta_{M1}/\delta_M$	$n$	$\delta_{M1}/\delta_M$
0.36	8	0.1386	7	0.1701	7	0.3043	6	0.4969	5	0.6601
3.6	4	0.2614	4	0.2731	4	0.3776	3	0.5636	3	0.6847
34	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Поскольку изменение удельного объема в ходе МП при оценке  $\delta_M$  здесь не учитывалось, при обработке экспериментальных данных лучше использовать нормировку на полный объем мартенсита  $\delta_{M1} / \delta_M$ , не зависящую от относительного изменения объема фазы за счет МП.

Понимание физического механизма формирования мартенситных кристаллов позволяет провести оценку значимого макропараметра мартенситной реакции – доли образовавшегося мартенсита в случае макроскопической автокаталитической кинетики путем сопоставления

поколениям статистически подобных ансамблей кристаллов простой симметричной совокупности самоподобных поколений ортогонально сочлененных кристаллов, удобной для обработки экспериментальных результатов. Выбор параметра  $(L_{cb})_{min}$ , зависящего от химического состава сплава, позволяет установить число поколений кристаллов.

#### 6.4. Оценки температуры $M_f$

Полагая  $C < C^*$ , существование температуры  $M_f$  можно рассматривать как следствие уменьшения характерных размеров  $L_{cb}$  областей аустенита, обрамленных участками границ зерен и мартенситных кристаллов, при достижении условия (115). Это означает, что температура  $M_f$  может быть найдена при подстановке в формулу для  $M_s(L_{cb})$  вместо  $L_{cb}$  величины  $(L_{cb})_{min}$ . Достаточной для иллюстрации является, например, простая формула (89) для  $M_s(D)$ , которая после замен  $D \rightarrow L_{cb}$ ,  $D_c \rightarrow (L_{cb})_{min}$  принимает вид

$$M_s(L_{cb}) = M_{s\infty} [1 - (L_{cb})_{min} (L_{cb})^{-1}]^{0.5}, \quad M_{s\infty} = M_s(\infty). \quad (124)$$

Продолжая обсуждение предельного случая быстрой автокаталитической реакции, используем симметричную трехмерную модель формирования поколений кристаллов. Число  $n$  реализуемых поколений конечно и задается целой частью величины  $n_{max}$  в соотношении (117), масштаб  $L_{cbj}$  в  $j$ -поколении и связь эффективной толщина  $d_{efj}$  кристалла в  $j$ -поколении с размером  $L_{cb(j-1)}$  предыдущего  $(j-1)$ -поколения даются (116), в котором по-прежнему значения  $\chi \sim 10^{-2}$  относятся к тонкопластинчатым кристаллам, а  $\chi \sim 10^{-1}$  – к линзовидным. Используя перечисленные соотношения, легко получаем  $M_f = M_s(L_{cbn})$ . В табл.8 приведены  $n$  и  $M_f/M_{s\infty}$ . Значения  $n$  в табл.8 соответствуют значениям в табл. 4, 5, 7. Для отражения возможности приближения к концентрации  $C^*$  наряду с  $L_{min} \approx 0.36$  мкм рассмотрены  $L_{min}$ , превышающие на один и два порядка  $0.36$  мкм при одном и том же стартовом размере  $L_{cb0} = 10^2$  мкм.

Таблица 8

Результаты расчета  $n$  и  $M_f/M_{s\infty}$  для трех значений  $(L_{cb})_{min}$  при учете (124)

$(L_{cb})_{min}$ , мкм	$\chi = 0.01$		$\chi = 0.02$		$\chi = 0.1$		$\chi = 0.2$		$\chi = 0.3$	
	$n$	$\frac{M_f}{M_{s\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{s\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{s\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{s\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{s\infty}}$
0.36	8	0.0353	7	0.685	7	0.1915	6	0.348	5	0.5608
3.6	4	0.6327	4	0.6128	4	0.3499	3	0.6614	3	0.4004
34	1	0.5596	1	0.5533	1	0.4944	1	0.3873	1	0.1690

Для сравнения в табл.9 приведем аналогичную информацию, но при использовании зависимости (105), которая ниже дана в виде (125).

Таблица 9

Результаты расчета  $n$  и  $M_f/M_{S\infty}$  для трех значений  $(L_{cb})_{\min}$  при учете (125)

$(L_{cb})_{\min}$ МКМ	$\chi = 0.01$		$\chi = 0.02$		$\chi = 0.1$		$\chi = 0.2$		$\chi = 0.3$	
	$n$	$\frac{M_f}{M_{S\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{S\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{S\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{S\infty}}$	$n$	$\frac{M_f}{M_{S\infty}}$
0.36	8	0.2623	7	0.8595	7	0.5160	6	0.6556	5	0.7935
3.6	4	0.8327	4	0.8221	4	0.6566	3	0.8476	3	0.6934
34	1	0.7928	1	0.7892	1	0.7545	1	0.6843	1	0.4911

Заметим, что сравнение данных табл.8 и табл.9 с экспериментальными значениями для  $M_f/M_{S\infty}$  может использоваться в качестве дополнительного аргумента при отборе наиболее адекватной зависимости  $M_s$  от размера зерна  $M_s(D)$ .

### 6.5. Изменения температуры $M_s$ и критического размера $D_c$ , связанные с увеличением параметра $|\epsilon_d - \mu|$ в сильном магнитном поле

Хорошо известно [73], что сильное магнитное поле способно существенно повышать температуру  $M_s$ . С чисто термодинамических позиций подобный сдвиг  $M_s$  объясняется смещением температуры  $T_0$  фазового равновесия в уравнении Клаузиуса-Клапейрона в случае различия намагниченностей фаз (намагниченность мартенсита заметно больше, чем у аустенита). Поскольку температура  $M_s$  соответствует оптимальной температуре генерации управляющих волн, можно ожидать, что влияние поля скажется на росте  $M_s$ . Магнитное поле способно изменять величину  $|\epsilon_d - \mu|$ , поэтому представляет интерес рассмотреть зависимость  $M_s(D)$  от  $\Delta|\epsilon_d - \mu|$ . Ясно, что в области пропорциональности  $\Delta|\epsilon_d - \mu|$  и  $H$ , подобная зависимость эквивалентна зависимости от  $H$ . Из формул (89), (90), (105) несложно увидеть, что сильное изменение  $M_s(\infty)$  возможно для сплавов, у которых в отсутствие поля  $M_s(\infty)$  близки к 0 К, то есть  $\Gamma_e'$  близки к 1. Для области низких температур, как показал анализ, вполне приемлем вариант (105). Для лучшего восприятия формулу (105) перепишем, как (125), проведя явную замену оптимальной температуры на температуру  $M_s$ :

$$M_s(D) = M_{s\infty} \sqrt[5]{1 - D_c / D}, \quad M_{s\infty} = M_s(\infty) = \frac{|\bar{\epsilon}_d - \mu|}{k_B} \sqrt[5]{\frac{1 - \Gamma_e'}{B + \beta}}. \quad (125)$$

Полезно установить типичный масштаб изменения  $|\epsilon_d - \mu|$  при действии сильного импульсного магнитного поля  $H$  (например, до  $H = 36 \text{ МА/м} = 36 \cdot 10^6 \text{ А/м}$  в [73]). В частности, положительная объемная магнитострикция в сильном поле (достигающая при таких полях  $\Delta V/V = 10^{-3}$ ), как следует из оценок изменения химического потенциала  $\mu$  для  $s$ -электронов в [1, 4], должна уменьшать  $\mu$  на величину:

$$\Delta\mu \approx 2\mu\Delta V / (3V). \quad (126)$$

При  $\mu \approx 10 \text{ эВ}$  и  $\Delta V/V = 10^{-3}$  из (126) имеем  $\Delta\mu \approx 6.7 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$ , что по температурной шкале соответствует снижению  $\mu$  на величину  $\Delta\mu / k_B \approx 77.5 \text{ К}$  и, следовательно, увеличению параметра  $|\epsilon_d - \mu|$ . Далее для иллюстрации будем считать, что параметр  $|\epsilon_d - \mu|$  увеличивается на  $\Delta|\epsilon_d - \mu| / k_B = 100 \text{ К}$  по температурной шкале для всех значений  $|\epsilon_d - \mu|$  в табл. 3. Результаты расчетов параметров  $D_{сн}$  и  $M_{s\infty H}$  по формулам (87) и (125) с учетом изменения  $\Delta|\epsilon_d - \mu| / k_B = 100 \text{ К}$  вместе с исходными значениями  $|\epsilon_d - \mu|$ ,  $M_{s\infty}$  и  $D_c$  приведены в табл. 10. Кроме того, в табл. 10 добавлены весьма показательные данные, демонстрирующие изменения параметров при подходе к особой точке  $\Gamma_e' \rightarrow 1$  и  $D_c \rightarrow \infty$ .

Таблица 10

**Расчетные значения  $D_{сн}$  и  $M_{s\infty H}$  при параметрах  $\Delta|\epsilon_d - \mu| / k_B = 100 \text{ К}$ ,  
 $B = 4 \cdot 10^3$ ,  $\beta = 5 \cdot 10^3$ ,  $n = 1$ ,  $v_s = 10^6 \text{ м/с}$**

состав	$M_{s\infty H}$	$M_{s\infty}$ , К	$D_{сн}$ , мкм	$D_{ср}^*, D_c^{**}$ , мкм	$ \epsilon_d - \mu $ , эВ	$\Gamma_e' = \Gamma_e'$
29%Ni	270.8	263	0.2811	0.3*	0.177098	0.689734
30%Ni	258.4	243	0.6468	0.8*	0.205056	0.899610
31%Ni	246.5	230	0.7761	1**	0.202420	0.918643
31%Ni	261.2	230	1.061	1.8*	0.234461	0.960977
32%Ni	279.7	223	1.273	3.5*	0.266370	0.982333
31Ni 0.28C	244.8	165	1.603	10**	0.237649	0.993069
	237.7	112	1.858	69.3	0.237649	0.999
	236.5	71	1.904	693	0.237649	0.9999
	236.4	44.6	1.909	6930	0.237649	0.99999
<b>C*<sub>Ni</sub>%</b>		<b>0</b>		$\infty$	<b>≠ 0</b>	<b>1</b>

Наиболее впечатляющий результат, как показывает анализ данных табл. 10, относится к резкому снижению значений  $D_{сн}$  до уровня (1.8–1.9)мкм по сравнению с исходными  $D_c$  при низких  $M_s$  (вблизи особой концентрации),

составляющими десятки, сотни и тысячи мкм. Это означает, что стабилизация аустенита при выполнении неравенства  $D < D_c$  (из-за больших  $D_c$ ), нарушается сильным полем. Причем уже для зерен с диаметрами  $D \geq 10$  мкм начинает выполняться сильное неравенство  $D \gg D_{сн}$ , позволяющее рассматривать отношение  $D_{сн}/D$  как малый параметр.

С другой стороны, при фиксированном составе сплава и разных диаметрах зерен  $D \geq D_c$ , при которых уже сказывается размерный эффект зависимости  $M_s(D)$ , включение нарастающего магнитного поля, ведущего к низким  $D_{сн}$ , должно сближать все  $M_s(D)$ , обеспечивая практически слияние в одной точке  $M_{с∞н}$  (в пренебрежении слагаемым  $D_{сн}/D$ ). Этот вывод согласуется с наблюдаемыми результатами, отраженными на рис. 20, взятом из [73] (см. рис. 5.14а в [73]).

Как и следовало ожидать на основе (125), наибольшее смещение  $M_{с∞н}$  достигается при низких  $M_{с∞}$ . Оценки сдвига  $\Delta M_{с∞} = (M_{с∞н} - M_{с∞})$  в области низких  $M_{с∞}$  в целом согласуются с наблюдаемыми значениями [73] для никелевых сталей. При удалении от особой концентрации сдвиг  $M_s$  понижается. Величина сдвига для составов Fe–29%Ni, Fe–30%Ni занижена, скорее всего, из-за иллюстративного характера допущения о постоянстве параметра  $\Delta|\epsilon_d - \mu|$ , который в этой области составов (см. обсуждение в гл. 4) может сильно изменяться.

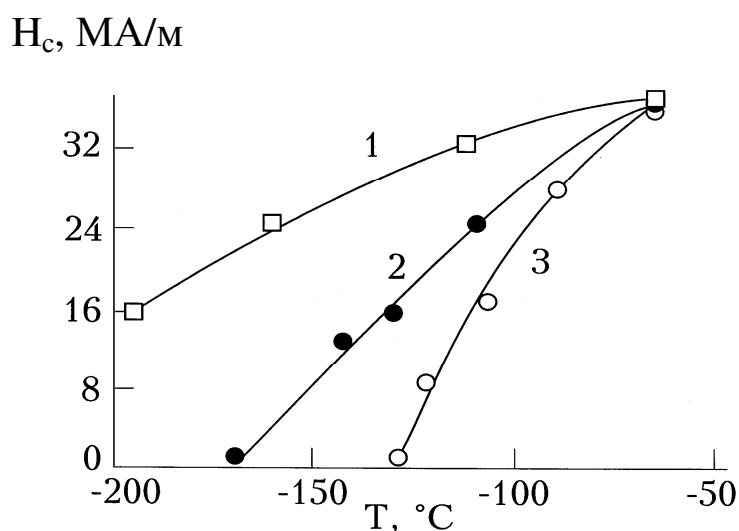


Рис. 20. Зависимость порогового магнитного поля от размера зерна  $D$  [73] для сплава Fe–31%Ni–0.25C: 1–  $D=16$  мкм, 2–  $D=45$  мкм; 3–  $D=180$  мкм

## 6.6. Заключительные замечания к главе 6

В парамагнитном состоянии аустенита, наряду с магнитострикционным эффектом, следует учитывать зеемановское



расщепление электронных энергетических уровней в магнитном поле. Хотя подобное расщепление приводит к симметричным повышению и понижению расщепленных уровней относительно исходного вырожденного энергетического уровня, не изменяя среднее значение энергии расщепленного мультиплета, параметр  $|\epsilon_d - \mu|$ , характеризующий среднюю энергию d-электронов в значимом интервале энергий, в общем случае изменится. Действительно, определяющий вклад дают состояния с энергиями из окрестности пика плотности состояний, поэтому больший удельный вклад в среднюю энергию  $\epsilon_d$  дадут состояния, энергия которых приближается к энергии пика  $\epsilon_t$  в процессе расщепления и, напротив, меньший удельный вклад дадут состояния, энергия которых удаляется от энергии пика  $\epsilon_t$ . Сама величина расщепления в случае сильного поля сопоставима с приведенной выше оценкой  $\Delta|\epsilon_d - \mu|$ , связанной с понижением химического потенциала за счет магнитострикционного эффекта. Покажем это. Пусть магнитный момент атома равен  $1.7 \mu_B$  (такой момент наблюдается в сплаве Fe-35%Ni), где  $\mu_B = 9.274 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл – магнетон Бора. Величина энергии  $\Delta E_m$  магнитного момента в поле с индукцией  $B$

$$\Delta E_m = 1.7 \mu_B B, \quad B = \mu_0 (H + J), \quad (127)$$

где  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$  Гн/м – магнитная постоянная, вклад намагниченности насыщения  $J \approx 1,26$  МА/м относительно мал по сравнению с  $H = 36$  МА/м ( $J = 1.7 \mu_B \cdot n_a$ , где  $n_a$  – концентрация атомов  $n_a \approx 8 \cdot 10^{28}$  1/м<sup>3</sup>). Тогда при  $B = 46,8$  Тл из (127) получаем  $\Delta E_m \approx 7.41 \cdot 10^{-22}$  Дж или  $\approx 54$  К по температурной шкале. Уместно также напомнить [1, 4], что возможно и обменное усиление расщепления, ведущее к квазиферромагнитному состоянию. При близости энергии Ферми к энергии пика плотности состояний, расщепление на подзоны сопровождается перераспределением зарядов с заметным изменением параметра  $|\epsilon_d - \mu|$ . Таким образом, рост параметра  $|\epsilon_d - \mu|$  может быть связан и с понижением  $\mu$ , и с повышением энергии  $\epsilon_d$ .

В принципе, сильное магнитное поле, искривляя траекторию электрона, вносит вклад в затухание электронов с квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ . Однако для s-электронов этим вкладом можно пренебречь по сравнению с рассеянием на примесях. Грубая оценка радиуса орбиты  $r = mv/eB$  на основе классического представления о силе Лоренца как центростремительной силе (справедливая при сферической поверхности Ферми свободных электронов) дает  $r = 0.12$  мкм  $= 1.2 \cdot 10^{-7}$  м при  $m = 9.31 \cdot 10^{-31}$  кг (масса свободного электрона),  $v \approx 10^6$  м/с,  $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$  Кл (заряд электрона). Значит характерное время порядка  $r/v$ , и связанное с

ним затухание  $\hbar\nu/2\Gamma \approx 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$  на два порядка меньше вклада примесного рассеяния в концентрированных сплавах.

Полученные результаты дают принципиально новую информацию, существеннейшим образом дополняющую термодинамическое рассмотрение [73] и не сводящуюся к анализу различия в намагниченностях аустенита и мартенсита. Найденные формулы для зависимостей критического размера зерна  $D_c$  и температуры  $M_s$  от значимых физических параметров позволяют ставить задачу о детализации причин влияния химического состава сплава на особенности реализации мартенситной реакции при внешних воздействиях, включая учет сильного магнитного поля.

Согласно [73], сильное импульсное магнитное поле инициирует главным образом макрокинетику автокаталитического (взрывного) типа, поскольку время воздействия ограничено длительностью импульса. Заметим, что при положительном магнотриксционном эффекте сильное поле не только повышает температуру  $M_s$ , но и снижает  $D_c$ , что приводит к увеличению числа поколений образующихся мартенситных кристаллов, а значит, и к увеличению доли образующегося мартенсита, как это и наблюдается.

Следует иметь в виду, что такая кинетика реализуется в области относительно низких температур, когда выполняются условия генерации упругих волн неравновесными электронами. В этом случае длинные оси кристаллов обусловлены процессом роста, прекращение которого лимитируется рассеянием УВП на препятствиях типа границ образца, зерен, возникших ранее кристаллов, то есть растущие кристаллы кратно снижают объем свободного от значимых неоднородностей аустенита. Тогда соотношение пространственных масштабов (12, 114), задающее коэффициент подобия при формировании последовательных поколений кристаллов, совершенно естественно позволяет в рамках симметричной модели крестообразно сочленяемых кристаллов оценивать макроскопическое количество образовавшегося мартенсита. Последнее поколение кристаллов соответствует достижению критического размера (порядка  $D_c$ ) для свободных объемов аустенита. Принципиально важно, что расчет макропараметра осуществляется без привлечения термодинамики на основе чисто динамического подхода. В свою очередь, знание изменяющихся масштабов свободного объема и зависимости  $M_s$  от  $D$  позволяют объяснить необходимость понижения  $M_s$  в присутствии ранее возникших кристаллов, а температуру  $M_f$  окончания МП рассматривать как температуру  $M_s$  для образования кристаллов последнего поколения.

Если условие генерации управляющих волн не выполняется, то возникающие кристаллы имеют вид реек, ширина которых соответствует времени распространения УВП, лимитированного временем снижения начального уровня деформаций до уровня ниже порогового. В сплавах железа такую форму имеют кристаллы с габитусами, близкими к  $\{557\}_\gamma$ , образующиеся, начиная с низких концентраций легирующего элемента или примеси внедрения, при сравнительно высоких температурах  $M_s$ . Формирование специфических ансамблей пакетного мартенсита [75] с компактно упакованными стопами реек [44, 47, 76] обладает изотермической макрокинетикой [77]. Следует, однако, иметь в виду, что наличие градиентов температуры и химического потенциала снижают величину эффективного затухания упругих волн, увеличивая тем самым время жизни УВП в надпороговом режиме. Основная закономерность изотермической макрокинетики состоит в существовании температуры, отклонение от которой как в сторону более высоких, так и более низких температур, сопровождается снижением приращения количества мартенсита. Эту закономерность можно качественно объяснить следующим образом. Пусть оптимальной для роста пакетного мартенсита в чистом железе является температура  $M_s^I$  первой ветви концентрационной зависимости  $M_s(C)$ , которой на плоскости переменных  $T'$  и  $\Gamma'$ , задаваемых (56), сопоставляется точка, близкая к (0.4, 0.4). При отсутствии концентрационного вклада изменение  $T$  соответствует движению по прямой  $T' \approx \Gamma'(T)$  (при выборе в (60)  $a_0 \approx 2$ ). В случае фиксированной концентрации  $C$  охлаждение и нагрев ведут к смещению вдоль прямой  $T' \approx \Gamma'(T)$ -  $\Gamma'(C)$  параллельной  $T' \approx \Gamma'(T)$ . Увеличение  $T'$  слабо меняет уровень производной  $\partial f / \partial \mu'$ , но снижение величины переохлаждения относительно  $T_0$  ведет, во-первых, к уменьшению стартовой деформации, и, во-вторых, к росту пороговой деформации, что обязательно сократит время роста реечного кристалла. При снижении  $T$  уменьшение  $\sigma_0 / \sigma_n$  обусловлено быстрым снижением  $\sigma_0$  за счет падения  $\partial f / \partial \mu'$  для точек ниже кривой 2 на рис.12.

Заметим, что действие сильного магнитного поля приводит к дополнительному вкладу в неравновесные добавки к электронным функциям распределения, сопоставимые с вкладами от градиентов химического потенциала [1, 4], что позволило предсказать анизотропный ориентационный эффект образования пластинчатых мартенситных кристаллов в исходных монокристаллах аустенита при одноосном поле, коллинеарном оси симметрии четвертого порядка. Очевидно, что действие постоянного магнитного поля (пусть и меньшей напряженности) будет способствовать протеканию

МП как для случая атермической, так и изотермической макрокинетики особенно для сплавов, обладающих высокой относительной магнитной восприимчивостью. Напомним, что суперпарамагнитное состояние аустенита наблюдается довольно часто. Обменное усиление поля способно привести к изменению параметра  $|\epsilon_d - \mu|$ , а следовательно, уменьшить  $D_c$  и увеличить  $M_s$ .

Разумеется, при формальном увеличении параметра  $|\epsilon_d - \mu|$  можно получить значения  $D_{сн}$  в диапазоне десятых долей микрона (сотен нанометров). Представив  $|\epsilon_d - \mu|$  в виде  $|\epsilon_d - \mu|_0(1 + \Delta_H)$ , при малых  $\Delta_H \ll 1$  выражение для  $D_{сн}$  запишем в виде

$$D_{сн} \approx D_c [1 + \Delta_H / (1 - \Gamma_e')^{-1}]. \quad (128)$$

Если, кроме того, вблизи особой концентрации  $1 - \Gamma_e' \ll \Delta_H$ , то из (128) получаем гиперболическое убывание  $D_{сн}$  при возрастании  $\Delta_H$ :

$$D_{сн} \approx D_c (1 - \Gamma_e') / \Delta_H. \quad (129)$$

Заметим, что типичные значения  $\Delta_H$ , использованные в табл.10, принадлежат интервалу 0.02–0.04. На рис. 21 показана зависимость  $D_{сн}$  от  $\Delta_H$  при  $\Gamma_e' = 0.99999$  и увеличении интервала изменения  $\Delta_H$  на порядок.

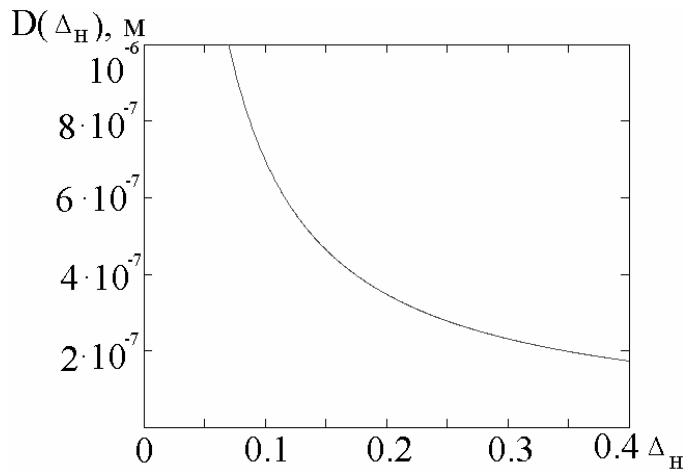


Рис. 21. Пример зависимости критического размера зерна  $D_{сн}$  от  $\Delta_H$  (относительного приращения параметра  $|\epsilon_d - \mu|$ ) для случая  $\Gamma_e' = 0.99999$

В частности,  $D_{сн} \approx 0.173 \text{ мкм}$  при  $\Delta_H = 0.4$ , то есть уменьшилось практически на порядок по сравнению с данными для  $D_{сн}$  при  $\Gamma_e' = 0.99999$  и меньших на порядок  $\Delta_H \approx 0.0364$  в табл.10.

Расчет объемной доли мартенсита при включении магнитного поля за счет изменения параметра  $|\epsilon_d - \mu|$  можно вести по той же, что и выше, методике, проводя замену параметров  $M_s \rightarrow M_{сн}$  и  $D_c \rightarrow D_{сн}$ .

Очевидно, что полученные закономерности открывают новые возможности целенаправленных экспериментов с комбинированием величин концентраций легирующих элементов, значений размеров зерен и интенсивности магнитного поля. Принципиально важно, что установленные аналитические зависимости  $M_s$  и  $D_c$  от значимых физических параметров позволяют с помощью измерения  $M_s$ ,  $D_c$ ,  $M_{SH}$ ,  $D_{CH}$  восстанавливать значения микропараметров  $|\epsilon_d - \mu|$  и  $\Gamma_e'$ , извлекая важнейшую физическую информацию.

Напомним также, что магнитострикционный эффект, типичный для инварных сплавов, сильно зависит от состава (см., например, рис. 5.3 в [1, 4]), достигая максимальных значений при 30%Ni. В результате, для значения  $\Delta V/V$  в сильном магнитном поле можно ожидать значений, приближающихся к  $10^{-2}$ . Тогда величина сдвига температуры  $M_{SH} - M_s$  будет сопоставима со 100 К, что в свою очередь сопоставимо с экспериментальными значениями, существенно превышающими указанные в табл.10 значения около 15К. Так например, в поле 330 кЭ для сплава Fe-30Ni (см. рис. 4.8 в [73]) сдвиг  $M_{SH} - M_s \approx 70$ К.

Отметим еще раз, что для иллюстрации данные в табл.10 приводятся при упрощающем предположении о постоянном для всех концентраций приращении  $\Delta|\epsilon_d - \mu|/k_B = 100$ К значений  $|\epsilon_d - \mu|$  и соответственно слабо изменяющихся значениях параметра  $\Delta_H$ , принадлежащих интервалу 0.02–0.04.

В окрестности особой концентрации  $C^*$ , когда выполняется неравенство  $D_c > D$ , совершенно естественно можно определить нижнюю границу  $H_{cmin}(D_{CH})$  критического магнитного поля  $H_c$ , вызывающего появление мартенсита, требованием  $D_{CH} = D$  при температуре абсолютного нуля. Очевидно, что величина  $H_c$  должна возрастать при увеличении температуры и уменьшении  $D$ .

Полезно также иметь в виду, что природу, аналогичную эффекту дестабилизации сильным магнитным полем аустенита, стабилизированного измельчением зерна, имеет эффект дестабилизации аустенита сильным магнитным полем в случае стабилизации аустенита, обусловленной значительной (десятки процентов) пластической деформацией (см. п. 5.2 в [73]). По существу, это прямое следствие соотношения характерных пространственных масштабов при зарождении и соотношения неопределенностей для энергии и времени.

---

---

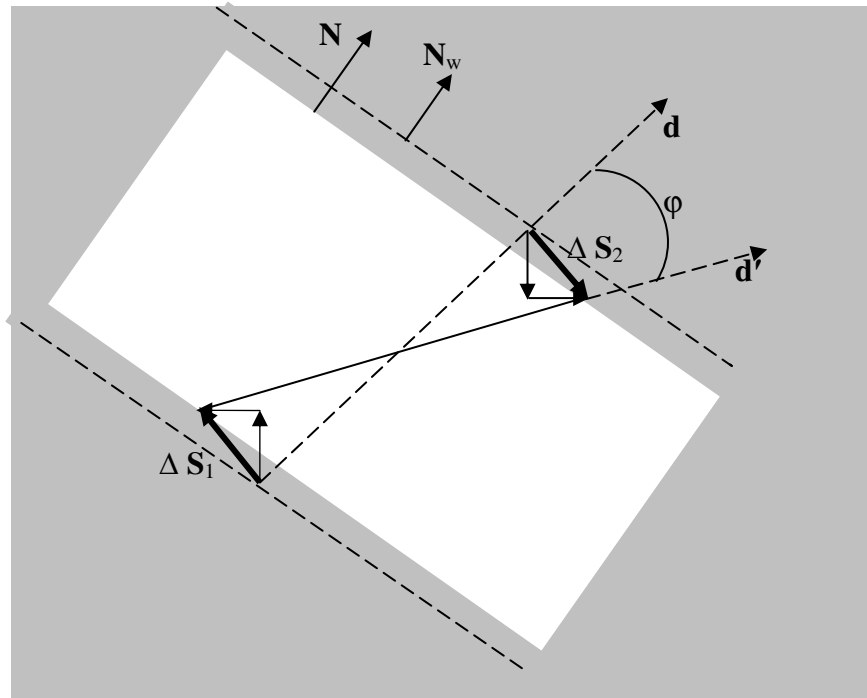
## Глава 7

### **Аккомодационное мартенситное превращение в нанокристаллическом состоянии**

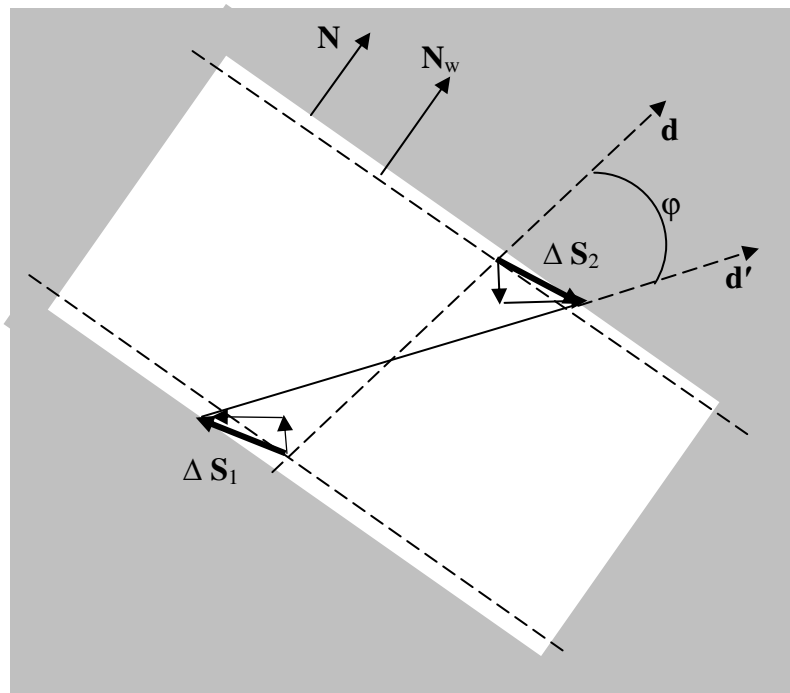
Обсудим теперь случай поликристаллов с зёрнами, размер которых  $D$  является докритическим ( $D < D_c$ ) по отношению к механизмам гетерогенного зарождения в упругом поле дислокаций и управляемого волнового роста кристаллов мартенсита, сохраняющих представительный набор макроскопических морфологических признаков. Будем считать, что химический состав системы обеспечивает удаленность параметра  $\Gamma'_e$  от значения  $\Gamma'_e = 1$ , достаточную для того, чтобы полагать  $D_c \geq (D_w)_r \approx 0.35 \text{ мкм} = 350 \text{ нм}$  (см. обсуждение в п. 2.2 и оценки (21), (22)). Как отмечалось в п.2.2, для такого состояния имеется возможность превращения зёрен (нанокристаллов) как целого. В силу стесненности условий для контактирующих зёрен процесс образования мартенситной фазы должен носить аккомодационный характер. Если превращающееся зерно за счет внутризеренной деформации (формирование двойников превращения и механическое двойникование) обеспечивает неизменность размеров и формы (с точностью до упругих деформаций), то превращение зерна может быть обособленным. Если же резервы внутризеренной деформации оказываются недостаточными для сохранения размеров и формы зерна, то превращение одного из зёрен может индуцировать превращение контактирующих зёрен, при котором имеет место значительная компенсация изменений объема и формы превращающейся области.

Собственно, и в закритической области размеров зёрен ( $D > D_c$ ) формирование самоаккомодированных ансамблей кристаллов хорошо известно, как и внутрикристаллическая аккомодация при формировании двойников превращения (см., например, [14], [78], [79]). Напомним [5-8], что при распространении пары налагающихся волновых пучков, несущих пороговую деформацию типа растяжение-сжатие в ортогональных направлениях, потерявшую устойчивость область решетки в форме

пластины можно рассматривать как канал в метастабильно устойчивом аустените (см. рис. 22).



*a*



*б*

Рис. 22. Модель формирования “канала” превращения в метастабильно устойчивом аустените: *а*) фрагмент сечения “канала” превращения, демонстрирующий поворот превращающегося материала при деформациях, существенно превышающих пороговые, в случае отрицательного объемного эффекта; *б*) фрагмент сечения “канала” превращения, в случае положительного объемного эффекта

Решетка внутри канала теряет устойчивость в точках контакта диагонали (с направлением  $\mathbf{d}$ ) сечения параллелепипеда по отношению к плоской деформации сжатия-растяжения. В результате решетка внутри «канала» испытывает стесненный поворот на угол  $\varphi$ , отраженный на рис. 22а и рис. 22б изменением ориентации  $\mathbf{d}$  на  $\mathbf{d}'$ . Этот поворот задает макродви́г и ориентационные соотношения (ОС). Направления векторов смещений  $\Delta\mathbf{S}_{1,2}$  на 22а и рис. 22б относятся, соответственно, к вариантам уменьшения и увеличения удельного объема при превращении. Перемещения  $\Delta\mathbf{S}_{1,2}$  в ходе деформации граничных точек диагонали представлены как результирующие конечных смещений вдоль главных осей деформации. Видно, что перемещения  $\Delta\mathbf{S}_{1,2}$  в ходе развития деформации осуществляются вдоль стенки канала, смещающейся непрерывно при сохранении ориентации нормали  $\mathbf{N} \parallel \mathbf{N}_w$ . Положение стенок канала, соответствующее пороговому уровню деформации, указаны штриховыми линиями. После завершения деформации положение стенок канала соответствует границам между светлыми и затененными областями. Сближение стенок на рис. 22а соответствует уменьшению удельного объема (величина смещения для иллюстрации увеличена), в случае положительного объемного эффекта (рис. 22б) ширина канала возрастает.

Определяя ширину как разность проекций на направление  $\mathbf{N}_w$  размеров канала в  $\mathbf{d}'$  и  $\mathbf{d}$  направлениях, легко определить относительное изменение ширины канала  $\frac{\Delta b}{b}$ , а также  $\frac{\Delta L}{L}$  - относительное изменение размера вещества в направлении вдоль канала:

$$\frac{\Delta b}{b} = \frac{1}{2} (\varepsilon_1 - |\varepsilon_2|), \quad (130)$$

$$\frac{\Delta L}{L} = \frac{1}{2} (\varepsilon_1 - |\varepsilon_2|) - \varepsilon_1 |\varepsilon_2|. \quad (131)$$

Сравнение (131) и (130) показывает, что объемный эффект (в случае плоской деформации) делится примерно в равных долях между поперечными и продольными размерами вещества в канале. Как следует из формулы (130), изменение размера  $\Delta b$  в направлении, перпендикулярном к границе двойника (как и к границе плоскости габитуса), пропорционально разности величин деформаций растяжения и сжатия  $(\varepsilon_1 - |\varepsilon_2|)$ . В динамической модели, согласно (7), отношение деформаций задается квадратом отношения модулей скоростей волн. Значит, (130) можно представить в виде:



$$\frac{\Delta b}{b} = \frac{1}{2 \cdot |\varepsilon_2|} (1 - \alpha^2). \quad (132)$$

Поэтому при ортогональных кристаллографических направлениях распространения коротковолновых пучков, описывающих основную компоненту двойниковой структуры,  $\Delta b$  может обращаться в нуль при одном и том же типе направлений  $\mathbf{n}'_1$  и  $\mathbf{n}'_2$  (например, при распространении волн вдоль осей симметрии четвертого порядка в случае  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения в сплавах железа [5]). Ясно, что величина  $\Delta b$  может быть близка к нулю и при любых ортогональных ориентациях  $\mathbf{n}'_1$  и  $\mathbf{n}'_2$  в случае изотропизации упругих свойств аустенита. Следовательно, при сохранении коротковолнового процесса двойникования в нанокристаллическом состоянии образца межзеренный контакт по границе двойникования может не сопровождаться заметными напряжениями. В то же время, в соответствии с (131), даже при выполнении равенства  $\varepsilon_1 = |\varepsilon_2|$  имеется уменьшение размера материала  $\Delta L$  вдоль границы пропорциональное произведению деформаций  $\varepsilon_1 |\varepsilon_2|$ :

$$\Delta L \sim \varepsilon_1 |\varepsilon_2|. \quad (133)$$

Ясно, что при контакте в подобном направлении соседнее зерно будет испытывать растяжение. Напомним, что рассуждения относились к плоской деформации, когда изменения не затрагивали размера в ортогональном к деформируемой плоскости направлении. При наличии такого изменения размера именно в этом направлении может инициироваться основной аккомодационный контакт зерен.

Если отвлечься от компенсационных возможностей процессов двойникования, то в качестве естественного масштаба, характеризующего изменение размера зерна  $\Delta D$  при однородной деформации превращения зерна  $\varepsilon$  и являющегося приемлемым при стыковках превращающихся зерен, выступает параметр решетки  $a$ . Будем считать, что

$$\Delta D/2 \approx \varepsilon D/2 \approx P \cdot a, \quad (134)$$

где  $D$  – диаметр зерна, а  $P$  – множитель порядка единицы, зависящий от жесткости решетки и состояния контактирующих границ (плотности материала границ, степени дефектности и неравновесности). Фактически, имеется интервал значений  $P_{\max} > P > P_{\min}$  для феноменологического

параметра  $P$ . Разумеется, величина  $P_{\min}$  может быть и меньше, и больше 1. Зададим с помощью (134) критический размер зерна для аккомодационного межзеренного мартенситного превращения  $D_{ac}$ :

$$D_{ac} = 2 P_{\min} a / \varepsilon. \quad (135)$$

Заметим, что потенциальной возможности превращения в цепочке зерен соответствует выполнение неравенства

$$D > D_{ac}. \quad (136)$$

Из определения (113) следует, что критический размер  $D_{ac}$  зависит от величины деформации превращения. Для превращений второго рода и превращений первого рода, близких к превращениям второго рода, величина  $D_{ac}$  должна заметно зависеть и от температуры. Действительно, при температурах в окрестности  $M_s$  значения деформации  $\varepsilon$  минимальны и, следовательно, величина  $D_{ac}$  максимальна. При снижении температуры величина  $\varepsilon$  растет, и  $D_{ac}$  понижается, достигая минимального значения  $(D_{ac})_{\min}$  при  $\varepsilon = \varepsilon_{\max}$ . Поэтому, как и ранее при определении критического размера зерна  $D_c$  для мартенсита охлаждения со стандартным набором морфологических признаков, под минимальным критическим размером  $(D_{ac})_{\min}$  можно понимать размер, ниже которого для заданного химического состава сплава аккомодационное превращение подавляется при охлаждении вплоть до абсолютного нуля температур.

Так, если для B2–R превращения в окрестности  $M_s$  считать скачок деформации близким к  $\varepsilon = 10^{-2}$ , то при  $a \approx 0.3$  нм и  $P_{\min} \approx 1$  из (135) получаем оценку  $D_{ac} \approx 60$  нм. Формально более низкие значения  $D_{ac}$  достигаются понижением отношения  $P_{\min}/\varepsilon$ . Например, снижение величины  $P_{\min}$  до 0.5 и возрастание  $\varepsilon$  до  $2 \cdot 10^{-2}$  приведут к  $D_{ac} \approx 15$  нм. Для B2–B19 превращения максимальное значение деформации растяжения близко к  $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-2}$ , и при  $P_{\min} \approx 1$  имеем оценку  $D_{ac} \approx 7.5$  нм. Для B2–B19' превращения максимальное значение деформации растяжения примерно в полтора раза больше, и, значит, при  $P_{\min} \approx 1$  имеем оценку  $D_{ac} \approx 5$  нм.

Очевидно, что для  $\gamma - \alpha$  превращения с максимальной величиной деформации бейновского сжатия  $\varepsilon \approx -0.2$  при  $P_{\min} \approx 1$  получаем  $D_{ac} \approx 3$  нм. Напомним, что в [80] при моделировании методом молекулярной динамики имела место монодоменная  $\alpha - \gamma$  перестройка свободных кластеров сплава Fe–Ni с размерами  $3 \text{ нм} < d < 3.5 \text{ нм}$ .

Таким образом, можно ожидать, что при монодоменной трансформации зерен аккомодационное мартенситное превращение с признаками фазового перехода первого рода, протекающее по эстафетному типу, для превращений  $\gamma - \alpha$ , B2–B19', B2–B19, возможно при критических размерах  $D_{ac}$ , превышающих, соответственно: 3 нм, 5 нм и 7.5 нм.

Конечно, при формальном описании монодоменной однородной трансформации зерен значениям  $D_{ac}$  в десятки нанометров можно сопоставлять  $1 < P_{min} < 10$  (например,  $D_{ac} \approx 20$  нм при  $\epsilon = 8 \cdot 10^{-2}$ , можно сопоставить  $P_{min} \approx 2,67$ ). Имеется, однако, и другая возможность. Согласно данным [81], при B2 – B19' в зернах с размером  $D \geq 50$  нм наблюдается только одна система микродвойников по  $(001)_{B19}$  с толщинами порядка параметра решетки. При возрастании  $D$  возможно подключение дополнительной системы микродвойникования и возникновение чередующихся доменов микродвойников. Хотя микродвойникование по  $(001)_{B19}$  предположительно связывается с механическим двойникованием, наблюдаемая регулярность картины микродвойникования скорее свойственна формированию двойников превращения. В рамках динамической теории образование двойников превращения [2], [5] [39] обусловлено согласованным действием относительно длинноволновых смещений, формирующих габитус мартенситного кристалла, и коротковолновых смещений, формирующих основную компоненту регулярной двойниковой структуры. В случае зерен с диаметром порядка  $10^2$  нм роль длинноволновой компоненты выполняют собственные низкочастотные колебательные моды зерна как целого. При такой интерпретации типичный размер внутривдвойникового зерна, испытывающего превращение, должен соответствовать минимальной толщине двойникового кристалла мартенсита охлаждения, что и наблюдается. Как обсуждалось во втором абзаце данного раздела, двойникование сопровождается значительной компенсацией деформаций. Тогда, согласно (136), естественно считать, что нескомпенсированная деформация, соответствующая размеру  $D'_{ac} \approx 50$  нм, при  $P_{min} \approx 1$  равна  $1.2 \cdot 10^{-2}$ . Обозначение  $D'_{ac}$  введено для отличия критического размера зерна с микроскопически двойникованным объемом от размера  $D_{ac}$  для однородно превратившегося зерна. Заметим, что такая величина нескомпенсированной деформации возникает, согласно (133), при перемножении двух наибольших собственных значений тензора деформаций в ходе формирования элементарной ячейки B19' фазы в одном из направлений, ортогональных нормали к границе двойника. Второе ортогональное направление вдоль оси  $\langle 001 \rangle_{B2}$  может характеризоваться, подобно B2–R превращению, такой же величиной деформации лишь при температурах в окрестности  $M_s$ , возрастая до нескольких сотых при удалении от  $M_s$ . Сравнимая нескомпенсированная деформация может, по-

видимому, наблюдаться вблизи  $M_s$ , согласно (115), и вдоль нормали к границе двойника.

Для B2–B19 превращения реализация системы микродвойников по  $(001)_{B19}$  также возможна [82]. Если величина нескомпенсированной деформации близка к 0.03, то возникновение зерен с превращенным микродвойникованным объемом и критическим размером  $D'_{ac} \approx (17–20)$  нм при  $P_{min} \approx 1$  вполне вероятно. Результаты моделирования [83], [84] также демонстрируют формирование двойниковых структур.

Следовательно, для аккомодационного варианта мартенситного превращения в объемных нанокристаллических материалах, обладающих однородным размером зерен  $D$  в объеме образца (имеются в виду  $D < 100$  нм), возможно существование, как минимум, двух различных критических размеров  $D'_{ac}$  и  $D_{ac}$ , причем размер  $D'_{ac}$  с микродвойникованным объемом зерна больше  $D_{ac}$ . Заметим, что при  $D > 100$  нм принято говорить о материалах с ультрамелким зерном (“bulk ultrafine-grained materials (BUFGM)” по терминологии [85]). Разумеется, при учете двойникования объема зерна возможны не только «чистые» варианты двойников превращения или механического двойникования, но и комбинированные варианты их совместной реализации. Представляет интерес фиксация аккомодационного мартенситного превращения для объемных нанокристаллических материалов с размерами  $D$  в несколько нанометров  $D \geq D_{ac}$ .

Очевидно, что при размерах  $D$ , заметно меньших 1 нм, рассчитывать, даже гипотетически, на протекание аккомодационного мартенситного превращения (с тем же типом изменения кристаллической решетки, что и при крупных зернах) мало оснований. При таких размерах  $D$  следует говорить не о нанокристаллах, а о малоразмерных кластерах [86]. Действительно, при количестве атомов в кластере порядка  $10^2$  конкурировать начинают атомные конфигурации (например, кубоид и сфероид для атомов Ni), существенно отличающиеся от конфигурации в кристаллической решетке исходного трехмерного кристалла. Причем снижение числа атомов в кластере увеличивает вероятность сфероидной конфигурации, близкой, в свою очередь, к конфигурации аморфного состояния. В связи с этим не исключено, что фиксация в [87] не характерной для комнатных температур ГЦК–подобной структуры в малых кластерах Fe с размерами (1–3) нм обусловлена заметным отличием атомных конфигураций кластеров от идеальной ГЦК симметрии. Разумеется, требуется и независимое подтверждение данных [87], в частности, значений параметра решетки.

Сделаем еще одно замечание. Естественно считать, что в объемных нанокристаллических материалах потеря устойчивости нанокристалла по

отношению к однородной деформации обусловлена возрастанием амплитуд низкочастотных мод колебаний нанокристалла как целого. Очевидно, самой низкой частоте соответствует движение в противофазе диаметрально расположенных участков поверхностного слоя нанокристалла. Наличие спектра частот собственных колебаний нанокристаллов должно проявиться в законе дисперсии упругих волн. Действительно, структурное состояние объемных нанокристаллических материалов, по-видимому, можно представить моделью, в которой обособленные кристаллические зерна, обладающие характерным набором собственных колебаний, «погружены» в межзеренную среду (состоящую из перекрывающихся поверхностных слоев нанозерен). Подобная модель должна отражать явление аномальной дисперсии при внешних частотах, приближающихся к частотам собственных колебаний. Заметим, что при  $D \geq D_{ac}$  и температурах вблизи  $M_s(D)$  за счет резонансного характера поглощения и переизлучения нанокристаллами бегущих волн смещений атомов возможна активация аккомодационного мартенситного превращения. Следует также иметь в виду, что, в силу разориентировки центральных областей кристаллических решеток зерен и значительного объема межзеренной среды, возможно аккомодационное превращение, при котором превращающиеся центральные области зерен остаются разделенными непревратившимися участками межзеренной среды, как в случае двойникованных, так и недвойникованных нанокристаллов. На рис. 23 и рис. 24 для трех испытанных превращение зерен схематически обозначены серым оттенком непревратившиеся участки, а черным и белым соответственно основная и двойниковая составляющие превратившихся областей.

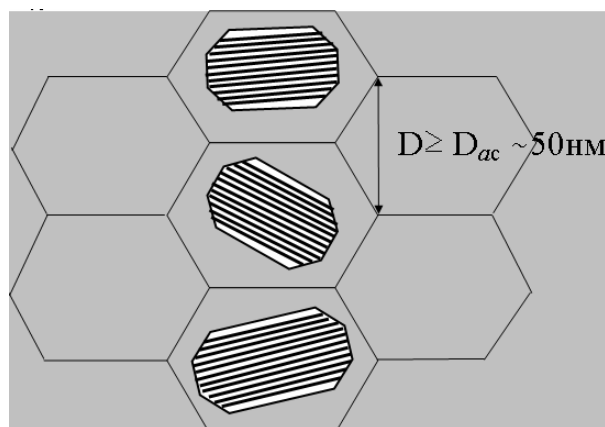


Рис. 23. Схематическая иллюстрация аккомодационного мартенситного превращения в трех зернах, отражающая неполноту превращения объема зерна, двойниковый характер превращения и разориентировку решеток в соседних зернах

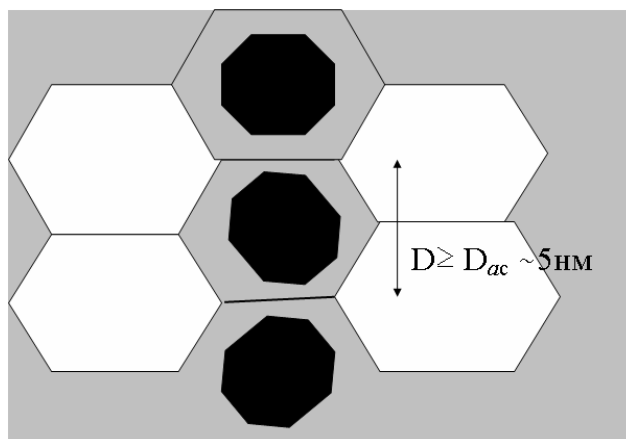


Рис. 24. Схематическая иллюстрация аккомодационного мартенситного превращения в трех нанозернах, отражающая неполноту превращения объема зерна. Черным цветом условно отмечены области внутри зерен, превратившиеся как целое

В табл. 11 дается ориентировочная иерархия характерных критических размеров зерен и размеров мартенситных кристаллов.

Таблица 11

**Иерархия типичных критических размеров зерна  $D_c$ , толщин мартенситных кристаллов  $d$  и толщин двойников  $d_{tw}$**

ТИП МАРТЕНСИТА	$D_c$	$d$	$d_{tw}$
Мартенсит охлаждения и напряжения	1мкм	(10–100)нм	(3–10)нм
Мартенсит деформации	0.1мкм	(1–10)нм	
Мартенсит аккомодационный двойникованный	(20–100)нм	(20–100)нм	(1–3)нм
Мартенсит аккомодационный одной ориентировки – превращение зерна как целого	(3–10)нм	(3–10)нм	

Подчеркнем также, что, в отличие от уже наблюдавшихся вариантов превращения в нанокристаллическом состоянии при  $D \geq D'_{ac}$ , возможность аккомодационного превращения при  $D'_{ac} > D \geq D_{ac}$  имеет пока что гипотетический характер.

---

---

## Заключение

1. Современное состояние динамической теории МП в массивных образцах (крупных зернах) можно характеризовать как определенный завершающий этап кристаллодинамического описания зарождения и быстрого роста кристаллов при реконструктивных мартенситных превращениях. Ключевые положения динамического анализа самоорганизующейся мартенситной реакции были дополнены простой, но крайне важной идеей. А именно: высокая скорость превращения и его динамический характер приводят к тому, что потерявшая устойчивость пластинообразная область решетки, стремясь в стесненных условиях к новой симметрии расположения атомов, сохраняет неизменным отношение главных деформаций, заданное УВП. В результате, управляющий волновой процесс, обеспечивая наиболее быстрые пути мартенситной перестройки, предопределяет макроскопические морфологические признаки, охватывая по глубине управления несколько порядков по деформации (схема управления ростом кристалла с развитием финишных деформаций представлена на рис. 25).

2. В активе теории в настоящее время имеется ряд фундаментальных достижений. Для удобства читателей, помимо ссылок [1], [4], [5] приведем и другие, в основном, легкодоступные ссылки:

- объяснение сверхзвуковой (по отношению к продольным волнам) скорости роста тонкопластинчатых мартенситных кристаллов (или центральной зоны – мидриба линзовидных кристаллов) в модели управляющего волнового процесса [88], [89];
- построение микроскопической теории генерации упругих волн неравновесными  $d$  – электронами в сплавах переходных металлов [11 - 13], [56- 58], [90], [91];
- ориентационный эффект в сильном магнитном поле для монокристаллических образцов сплавов Fe-Ni с габитусами  $\{3\ 15\ 10\}_\gamma$ , выражающийся в появлении только кристаллов с габитусами,

составляющими наименьшие углы с полем, направленным вдоль оси симметрии четвертого порядка [92];

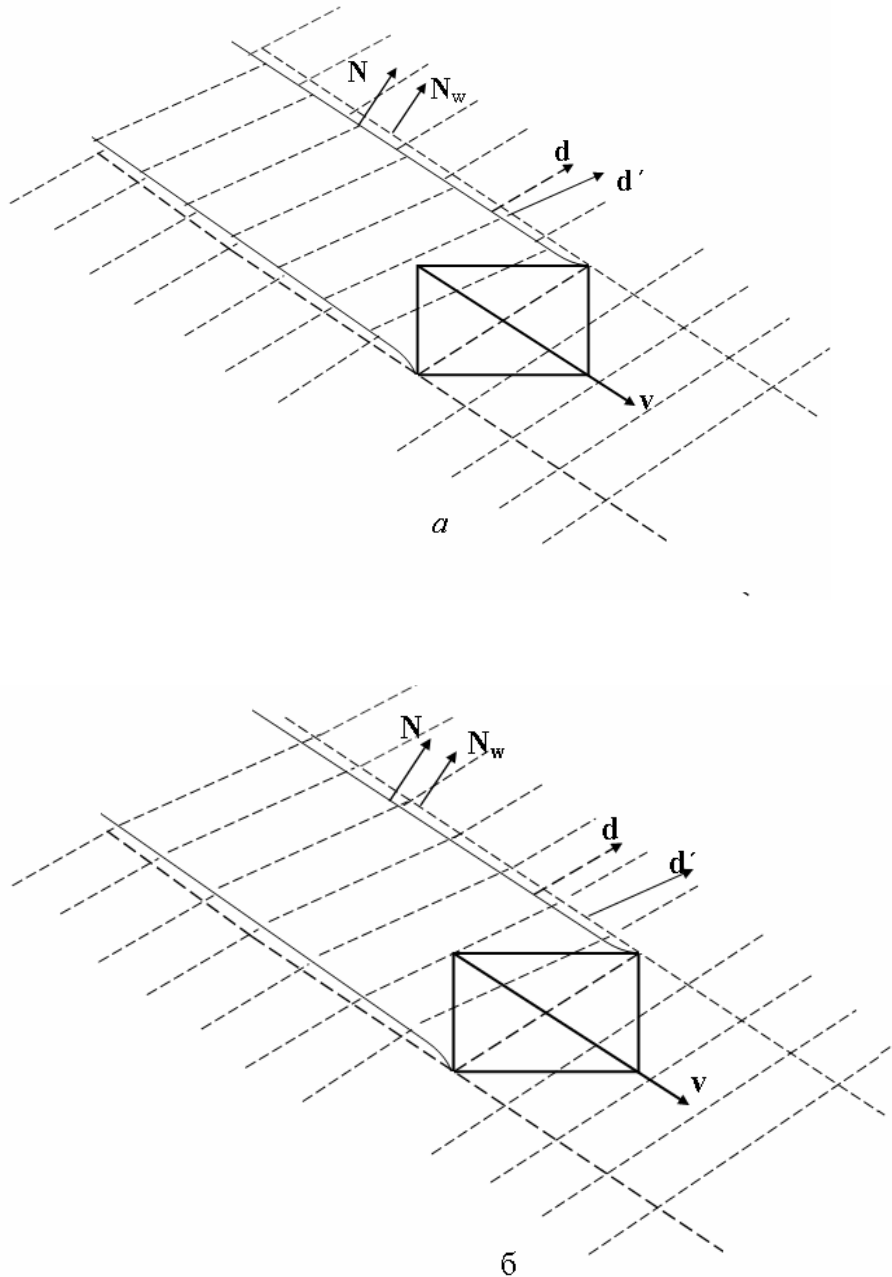


Рис. 25. Формирование мартенситной пластины при деформации превращения, существенно превышающей пороговую: а) разрыв поперечных рисок при блокировании продольных смещений стенок аустенитного канала; б) сохранение непрерывности поперечных рисок

– идентификация дислокационных центров зарождения и реконструкция динамической картины роста по наблюдаемой



совокупности морфологических признаков мартенситных кристаллов [97 – 99];

– описание всех морфологических признаков, включая параметр решетки  $a$ , при ОЦК – ГПУ МП (с наибо́льшей перестройкой плоскостей  $\{110\}_a$  ОЦК-фазы) как функций упругих свойств исходной фазы [6 – 8], [100 – 102];

– интерпретация характерных ансамблей мартенситных кристаллов [44– 47];

– установление соотношения пространственных масштабов при зарождении мартенсита в упругом поле дислокации [96], [103], [104];

– вывод формулы для зависимости температуры  $M_s$  начала МП от размера зерна [105 – 107];

– вывод формулы для критического размера зерна  $D_c$ , объясняющей возможность формального предельного перехода  $D_c \rightarrow \infty$  при  $M_s \rightarrow 0$  К для критической концентрации второго компонента сплава [103 – 107];

– установление на плоскости изменения параметров  $\Gamma'$  и  $T'$  области значений, оптимальной для генерации неравновесными  $d$  – электронами волн, управляющих ростом мартенситного кристалла, и области параметров  $\Gamma'$  и  $T'$ , в которой невозможна реализация МП за счет распространяющегося волнового процесса, поддерживаемого неравновесными  $d$  – электронами [65], [108], [109];

– расчет доли мартенсита охлаждения при атермической макрокинетике в симметричной модели самоподобных ансамблей кристаллов [110];

– расчет температуры  $M_f$  окончания протекания МП [111];

– снятие стабилизации аустенита, обусловленного измельчением зерна (или сильной пластической деформацией) за счет снижения значения критического размера зерна (или критического размера свободного от дефектов объема) при увеличении параметра  $|\epsilon_d - \mu|$  в магнитном поле (см. п. 6.5 и 6.6 настоящей монографии);

– интерпретация морфологических признаков мартенсита деформации в кристонной модели [3];

– построение динамической модели двойникования как следствия согласованного распространения относительно коротковолновых и длинноволновых смещений, несущих пороговую деформацию [2], [5] [39];

– описание изменения формы профилей мартенситных кристаллов при росте мартенситного кристалла в неоднородной среде [112].

3. Разумеется [1], УВП, задавая макроскопические морфологические признаки, не предопределяет конечные положения всех атомов. Смещения атомов к новым положениям равновесия могут дополнительно инициироваться более коротковолновыми смещениями в предпереходном состоянии, на стадиях роста и аккомодации сосуществующих фаз.

Характерные для наномасштаба черты кристаллодинамики, обусловленные коротковолновыми смещениями, отвечают как за формирование тонкой внутренней двойниковой структуры кристаллов, так и за спектр перетасовочных смещений, меняющих последовательность чередования наиболее плотноупакованных кристаллических плоскостей, а значит, и симметрию кристаллической решетки.

Согласованное с УВП действие перетасовочных смещений заключается в том, что при наличии фазы растяжения на мезомасштабе в направлении, ортогональном к направлению перетасовочного (существенно неоднородного) сдвига, обеспечиваемого поперечными волнами, понижается сопротивление к сдвигу за счет увеличения расстояния между плотноупакованными плоскостями, смена последовательности чередования которых задает новую симметрию решетки. Иллюстрацией может служить кристаллодинамическая модель ГЦК-ГПУ перестройки [113]. Важно, что при этом самопроизвольное смягчение поперечных мод не является обязательным.

Уместно отметить, что развивающаяся (после потери устойчивости исходной решетки) однородная (на мезомасштабе порядка толщины кристалла) деформация, меняя атомный потенциальный рельеф, может индуцировать неустойчивость к коротковолновым перетасовочным смещениям.

4. Следует подчеркнуть, что реконструктивное МП способно протекать и в отсутствие подсистемы, способной генерировать фононы, или из-за особенностей ее строения или состояния (например, положения уровня Ферми или сильного затухание фононов при высоких температурах), не позволяющих осуществлять эффективную поддержку управляющего процесса. Тогда формируются мартенситные кристаллы, один из размеров которых лимитируется расстоянием, проходным УВП за время превышения начальными амплитудами колебаний (в области зарождения) пороговых значений. В результате процесс формирования мартенсита даже в изотермических условиях будет представлять собой последовательность актов быстрого (атермического) скачкообразного роста, разделенных промежутками времени, длительность которых может существенно (по порядку величины) превышать интервалы времени образования отдельных кристаллов (применительно к  $\gamma$ - $\alpha$  МП в сплавах железа такая ситуация реализуется, по-видимому, для роста кристаллов речного типа). Сказанное означает, что область применения концепции УВП не исчерпывается специальными случаями переходных металлов и

сплавов и может использоваться для любых кристаллических тел, включая простые металлы, полупроводники и диэлектрики. Конкретная динамическая структура области фронта УВП может модифицироваться применительно к особенностям МП в данном материале.

5. Уместно констатировать, что в настоящее время волновой подход к описанию роста мартенситных кристаллов и формирования двойников превращения достаточно широко используется (помимо [1, 4, 5] см., например, [114 – 120]). Как правило, общей основой служит использование функционала Гинзбурга-Ландау, обсуждавшегося и применявшегося в [1], [4]. Однако, как показано в [1, 4, 5], только ясное понимание картины зарождения позволяет адекватно отразить динамическую структуру межфазного переходного слоя. Без такого дополнения используемые одномерные, двумерные и трехмерные модели сохраняют, в значительной степени, искусственный характер. Они не приспособлены для описания сверхзвуковой скорости роста мартенситного кристалла, испытывают затруднения с описанием реально наблюдаемой совокупности морфологических признаков, не отражают причин влияния состава сплава на температуру начала мартенситного превращения и зависимость  $M_s$  от размера зерна. Развита в [1, 4, 5] и существенно дополненная здесь динамическая теория с самого начала была нацелена на построение физической модели, способной описать совокупность всех наиболее характерных наблюдаемых закономерностей для реконструктивных мартенситных превращений. По этой причине в ней принцип минимальной достаточности для отражения значимых качественных сторон сложного синергетического явления естественно сочетается с необходимой полнотой конкретного описания.

6. Касаясь перспектив ближайших исследований, отметим, что представляет интерес дальнейшее развитие динамической теории применительно к сплавам с эффектом памяти формы [121]. В частности, при В2–В19' МП актуален анализ различных вариантов двойникования. С достаточной полнотой проблематика этой интересной области отражена в [122].

7. Следует отметить, что основной акцент в изложенном динамическом подходе делается на механизме быстрого (сверхзвукового) формирования центральной части мартенситного кристалла, задающего габитус кристалла. Причем управляющий волновой процесс формируется в определенных областях упругого поля дислокационного центра зарождения, обеспечивая «торцевой рост» кристалла (используется и термин «радиальный рост»). Рост кристаллов в толщину для МП с ярко выраженными признаками перехода первого рода либо не происходит, либо идет с заметно меньшей скоростью по сравнению со скоростью торцевого роста. В последнем случае форма кристаллов становится

линзовидной (габитусная плоскость задается ориентацией центральной части кристалла).

Для превращений в сплавах с эффектом памяти формы характерен вариант термоупругого обратимого изменения толщины кристалла. Формально такое утолщение можно рассматривать как послойное приращение за счет пробега коротковолнового аналога УВП вдоль габитусной плоскости. В условиях сильного затухания коротковолновых смещений вполне приемлемым выглядит и вариант приращения за счет распространения вдоль габитуса «дислокации превращения», аналогичный распространению дислокационных перегибов при поперечном скольжении, используемый в феноменологической теории «размытых фазовых переходов» [123]. При этом первоначальный акт формирования центральной части, задающий габитус, считается завершенным и не рассматривается. В связи с обсуждавшейся выше проблемой существования критического размера зерна (см. также публикации [103–107], [124]), уместно отметить, что применительно к сплавам с термоупругим ростом в [123] и [125] учитывается и такая кинетическая характеристика как длина свободного пробега «дислокации превращения». Поскольку границы зерен должны ограничивать пробег дислокаций, для температуры превращения в [123] и [125] также имеется критическая зависимость от размера зерна, содержащая логарифмический вклад и похожая (после подбора значений феноменологических параметров) на наблюдаемую в [25] зависимость. Впрочем, упомянутое в [123] сравнение с данными [25] вряд ли может претендовать на адекватность, так как для рассмотренных в [25] составов сплавов механизм роста кристаллов не соответствует термоупругому варианту.

8. Опыт описания ОЦК–ГПУ превращения дает ясные алгоритмы описания не только при пороговых, но и при конечных деформациях для случая ГЦК – ОЦК (ОЦТ) мартенситного превращения. Так, например, в [126] уже удалось существенно уточнить картину формирования кристалла речного мартенсита, а в [127, 128] предложить новый вариант превращения при наибо́льшей трансформации исходной плотноупакованной плоскости.

9. Несомненный интерес представляет и рассмотрение вариантов реализации аккомодационного МП в объемных нанокристаллических образцах с размерами нанокристаллов из диапазона  $\sim (3\div 100)$  нм. Помимо качественных соображений, изложенных в гл. 7, заслуживает внимания подход [129] для описания предельно узких (моноатомных) перестроек, по существу предлагающий интерпретацию появления предельно малых носителей превращения и тем самым смыкающийся с работами [123] и [125], оперирующими ”дислокациями превращения”.

10. Скорее всего, свою нишу в динамической картине перестроек на наномасштабном уровне займет и предложенная в [130] интерпретация полиморфных превращений как реконструкции координационных полиэдров. Действительно, в условиях предельно узкой (моноатомной) толщины переходного слоя представления о потоках электронов в полях градиентов температуры и химического потенциала следует, по существу, заменить на квазилокальное описание электронных переходов. В связи с этим использование представления о выделении энергии при элементарном акте локальной трансформации кубооктаэдра в икосаэдр с формированием волн переключения, распространяющихся за счет контактного переключения ячеек структуры, выглядит физически реализуемым. Морфологически подобная перестройка соответствует превращению в форме линейных цепочек с предельно малым поперечным размером, соответствующим размеру превращающейся элементарной ячейки. В частности, такой процесс способен описать специфику мартенситного превращения в металлических усах. Привлекательной чертой данной качественной интерпретации может стать ее независимость от наличия коллективизированных электронов, то есть применимость для металлов, полупроводников и диэлектриков.

Разумеется, вполне приемлемой выглядит и возможность распространения по квазиодномерной системе продольной волны, сопровождающегося сжатием в направлении распространения и расширением в двух поперечных направлениях, нестесненного атомным окружением. Очевидно, что подобная простая схема естественно приводит к прямой бейновской деформации, если направление распространения вдоль усов совпадает с осью симметрии четвертого порядка. При этом скорость роста не будет превышать скорости продольных упругих волн вдоль оси кристалла.

Обобщая, можно утверждать, что для квазиодномерных систем выбор динамического механизма, инициирующего перестройку заданного типа, будет в значительной степени зависеть от того, какому из кристаллографических направлений коллинеарен наибольший из размеров "квантовой проволоки".

Подводя окончательный итог, отметим, что предлагаемая вниманию специалистов монография существенно дополняет результаты исследования спонтанного  $\gamma \rightarrow \alpha$  МП в сплавах на основе железа, изложенные в двух предшествующих компактных монографиях [1, 5]. В настоящее время, исправленное и дополненное второе издание [131] монографии [1], как и монография [5], имеются в открытом доступе (см.

---

<http://www.kashchenko.com>,  
[http://www.nanometer.ru/2010/01/13/martensitnie\\_prevrashenia\\_162444.html](http://www.nanometer.ru/2010/01/13/martensitnie_prevrashenia_162444.html) ).

Общим ядром трех монографий является модель волнового управления ростом мартенситного кристалла в предельном случае сверхзвуковой скорости роста, позволившая создать развернутую динамическую теорию формирования кристалла (в зернах, с размерами, превышающими критический размер), превосходящую по полноте описания наблюдаемых особенностей мартенситной реакции существующие подходы. Это создает надежную основу для исследования взаимодействий растущего кристалла с границами зерна, образца и возникшими ранее мартенситными кристаллами.

---

---

## Литература

- [1] Кашченко М. П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа. – Екатеринбург: УИФ “Наука”, 1993. 224с.
- [2] Чащина В. Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига // Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург. 2000. 139с.
- [3] Кашченко М. П., Семеновых А. Г., Чащина В. Г. Кристонная модель формирования  $\alpha'$  мартенсита деформации в сплавах на основе железа // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6. № 3. С. 37–56.
- [4] Kashchenko M. P. The wave model of martensite growth for the FCC–BCC transformation of iron–based alloys // arXiv: cond–mat/0601569 v3 4 Feb 2006.
- [5] Кашченко М. П., Чащина В. Г. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при  $\gamma$ - $\alpha$ -превращении в сплавах железа. – Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун-т. 2009. 98с.
- [6] Кашченко М. П., Чащина В. Г. Основные принципы динамической теории реконструктивных мартенситных превращений // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2006. Т.3. № 4. С. 67–70.
- [7] Kashchenko M. P., Chashchina V. G. The material orientation relationship for the bcc-hcp transformation // arXiv: 0707. 1938 v 1 [cond–mat. mtrl–sci] 13 Jul 2007.
- [8] Кашченко М. П., Чащина В. Г. Управляющий волновой процесс и материальные ориентационные соотношения при реконструктивных мартенситных превращениях // XLVI Международная конференции “Актуальные проблемы прочности”, 15–17 октября 2007 г. Витебск.

- Беларусь: материалы конференции. Ч.2 / УО “ВГТУ”. –Витебск, 2007. С. 99 –104.
- [9] Горьков Л. П. Об особенностях электронного спектра соединений со структурой  $\beta - W$  // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т. 20. № 8. С. 571–574.
- [10] Горьков Л.П., Дорохов О.Н. Сверхпроводящие свойства и структурный переход в соединениях с решеткой A-15 // ЖЭТФ. 1976. Т.71. N 5(11). С. 1934–1950.
- [11] Кащенко М.П. Лазерная модель мартенситного превращения в сплавах переходных металлов // Мартенситные превращения в металлах и сплавах: Докл. междунар.конф. "I СОМАТ-77". Киев: Наукова думка. 1979. С. 137–141.
- [12] Кащенко М.П., Минц Р.И. Механизм мартенситного превращения, обусловленный неравновесностью электрон-фононной системы // Письма в ЖЭТФ. 1977. Т. 26. № 6. С. 433–435.
- [13] Кащенко М.П., Минц Р.И. Микроскопический механизм мартенситного превращения в системе Fe–Ni // ЖЭТФ. 1978. Т.75. № 6(12). С. 2280–2289.
- [14] Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. – М.: Наука, 1977. 240 с.
- [15] Бернштейн М.Л., Займовский В.А., Капуткина Л.М. Термомеханическая обработка стали. – М.: Metallurgy, 1983, 480с.
- [16] Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. – М.: Наука, 1965. 388с.
- [17] Аристова Н.В., Алексина И.В., Кащенко М.П. Роль фактора анизотропии в отборе центра зарождения мартенсита В19 в сплаве Ti–Ni–Cu // ФММ. 1994. Т. 77. №. 1. С. 146–150.
- [18] Алексина И. В., Кащенко С. М., Кащенко М. П. Дислокационные центры зарождения и пирамидальная морфология мартенсита в Ti–Ni–Cu – В книге Функционально – механические свойства материалов и их компьютерное конструирование / под редакцией В.А. Лихачева / Материалы ХХІХ Межреспубликанского семинара “Актуальные проблемы прочности” 15–18 июня 1993. Псков. С. 545–548.



- [19] Alexina I. V., Aristova N. V., Letuchev V. V., Kashchenko M. P. The dislocation nucleation centres at B2–B19 martensitic transformation in Ti–Ni–Cu alloy. Shape memory International academic publishers, Beijing, China, 1994. P. 65–69.
- [20] Кащенко М. П., Алексина И. В., Летучев В. В., Нефедов А. В. Дислокационные центры зарождения при B2–B19 мартенситном превращении в никелиде титана // ФММ. 1995. Т. 80. № 6. С. 1–15.
- [21] Letuchev V. V., Vereshchagin V. P., Alexina I. V., Kashchenko M. P. Conception of New Phase Dislocation-Based Nucleation at Reconstructive Martensitic Transformations // Journal de Physique IV. Colloque C8. 1995. V.5. P.151–156.
- [22] Алексина И. В. Вероятные дислокационные центры зарождения мартенсита в системах Cu–Zn, Ti–Ni, Ti–Ni–Cu // Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург. 1997. 146с.
- [23] Scheil E. Über die Umwandlung des Austenit in geharten Stahle // Z. anorg. Chem. 1929. 180. S. 1–6.
- [24] Гайдуков М. Г. , Садовский В. Д. К вопросу о влиянии величины зерна аустенита на мартенситное превращение в стали // ДАН СССР. 1954. Т. 96. № 1. С. 67–69.
- [25] Umemoto M. and Owen W. S. Effects of austenitizing temperature and austenite grain size on the formation of athermal martensite in an iron-nickel and an iron-nickel-carbon alloy // Metallurgical transactions. 1974. V. 5. P. 2041–2046.
- [26] Петров Ю. Н. Дефекты и бездиффузионное превращение в стали. – Киев: Наукова думка. 1978. 262 с.
- [27] Иванов Ю. Ф., Кащенко М. П., Марков А. Б., Ротштейн В. П. Критический размер зерна для зарождения  $\alpha$ -мартенсита // ЖТФ. 1995. Т. 65. № 3. С. 99-102.
- [28] Блинова Е. Н., Глезер А. М., Дьяконова Н. Б., Жорин В. А. Размерный эффект при мартенситном превращении в сплавах железо-никель, закаленных из расплава // Изв. РАН. Сер. физ. 2001. Т. 65. № 10, С. 1444–1449.

- [29] Глезер А. М., Блинова Е. Н., Поздняков В. А. Мартенситное превращение в микрокристаллических сплавах железо-никель // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66. № 9. С. 1263–1275.
- [30] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций – М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- [31] Коттрел А. Теория дислокаций – М.: Мир. 1969. 96 с.
- [32] Кащенко М. П., Семеновых А. Г., Чащина В. Г. Кристонная модель формирования полос сдвига в кубических кристаллах с кристаллографической ориентировкой границ общего типа // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6. №1. С. 95–122.
- [33] Cech R. E., Turnbull D. Heterogeneous nucleation of the martensitic transformation // Trans. AIME. 1956. V. 206. P. 124–132.
- [34] Magee C. L. The kinetics of martensite formation in small particles // Metal. Trans. 1971. V. 2. P. 2419–2430.
- [35] Kajiwara S., Ohno S., Honma K. and Uda M. Martensitic transformation in ultrafine particles of Fe-Ni alloys // Proceedings of the international conference on martensitic transformations. The Japan institute of metals. 1986. P. 359–364.
- [36] Asaka K., Hirotsu Y., Tadaki T. Martensitic transformation in nanometer-sized particles of Fe-Ni alloys // Mater. Science & Engin. A. 1999. P. 262–265.
- [37] Кащенко М. П., Теплякова Л. А., Джемилев К. Н., Чащина В. Г. Условия генерации кристонов и интерпретация кривой  $\sigma - \epsilon$  для монокристаллов  $\text{Ni}_3\text{Fe}$  // ФММ. 1999. Т. 88. № 3. С. 17 – 21.
- [38] Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. II. – М: МИСиС. 1997. 526с.
- [39] Кащенко М.П., Чащина В.Г. Вихарев С.В., Иванов С.В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов при мартенситных превращениях// XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007г.: сборник материалов. Ч. II. – СПб., 2007. С. 278–280.
- [40] Печковский Э.П., Трефилов В.И. Влияние структуры аустенита на развитие мартенситного превращения в сплавах на основе железа. Препринт № 71.4. Киев: Ин-т металлофизики АН УССР. 1971. 31с.

- [41] Knapp H., Dehlinger U. Mechanik und Kinetik der diffusionslosen Martensitbildung // Acta met. 1956. V. 4. P. 289-297.
- [42] Горбач В. Г., Печковский Э. П., Трефилов В. И. Структурная чувствительность мартенситной точки // УФЖ. 1971. Т. 16. №1. С. 133–136.
- [43] Соловьев В. А. // Проблемы металловедения и физики металлов. – М: Металлургия. 1976. 258 с.
- [44] Кащенко М. П., Летучев В. В., Коновалов С. В., Яблонская Т. Н. Модель формирования пакетного мартенсита // ФММ. 1997. Т. 83. № 3. С. 43–52
- [45] Кащенко М. П., Коновалов С. В., Яблонская Т. Н. Дислокационные центры зарождения  $\alpha$ -мартенсита и парные сочленения кристаллов тонкопластинчатого мартенсита // Известия вузов. сер. Физика. 1994. Т. 37. № 6. С. 64–67.
- [46] Кащенко М. П., Коновалов С. В. Яблонская Т. Н. Дислокационные центры зарождения  $\alpha$ -мартенсита и парные сочленения кристаллов мартенсита с габитусами {hhl} // Известия вузов. сер. Физика. 1994. Т. 37. № 4. С. 67–70.
- [47] Верещагин В. П., Кащенко М. П., Коновалов С. В., Яблонская Т. Н. Идентификация дефектов, необходимых для реализации многокристалльных группировок пакетного мартенсита // ФММ. 1994. Т. 77. №.4. С. 173–174.
- [48] Гранато А., Люкке К. Струнная модель дислокации и дислокационное поглощение звука. В кн.: Физическая акустика IV А. – М.: Мир, 1969. С. 261–321.
- [49] Новак А., Берри Б. Релаксационные явления в кристаллах. – М.: Атомиздат. 1975. 472с.
- [50] Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. – М.: Наука. 1972. 280с.
- [51] Бабанлы М. Б., Лободюк В. А., Матвеева Н. М. Размерный эффект при мартенситном превращении в сплавах Ti Ni Cu // ФММ. 1993. Т. 75. № 5. С. 89–95.

- [52] Lobodyuk V. A. Phase transition in Ti-Ni-Cu alloys quenched from a liquid // *Met. Phys. Adv. Tech.* 1999. V.18. № 2. P. 201–209.
- [53] Кризement О., Гудремон З., Вефер Ф. К термодинамике аустенитно-мартенситного превращения // *Фазовые превращения в стали.* М.: Металлургиздат, 1961. С. 72–89.
- [54] Могутнов Б. М., Томилин И. А., Шварцман Л. А. Термодинамика железо-углеродистых сплавов. – М.: Металлургия. 1972. С. 263–271.
- [55] Кауфман Л., Коэн М. Термодинамика и кинетика мартенситных превращений // *Успехи физики металлов.* Т.IV. – М.: Металлургиздат, 1961. С.192-289.
- [56] Кащенко М. П., Скорикова Н. А., Чащина В. Г. Условия, необходимые для генерации упругих волн неравновесными электронами в металлах с кубической решеткой // *ФММ.* 2005. Т. 99. № 5. С. 3 –13.
- [57] Kashchenko M. P., Skorikova N. A., Chashchina V. G.. Pairs of electronic states supporting the wave process of martensite crystal growth // *Materials Science and Engineering A.* 2006. V. 438–440. P. 99–101.
- [58] Скорикова Н. А., Чащина В. Г., Кащенко М. П. Пары инверсно населенных состояний электронов в оптимальном для генерации волн интервале энергий // *Известия вузов. Физика.* 2005. № 11. С. 44– 48.
- [59] Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах. – М.: Мир. 1971. 470 с.
- [60] Мирзаев Д. А., Морозов О. П., Штейнберг М. М. О связи превращений в железе и его сплавах // *ФММ.* 1973. Т. 36. № 3. С. 560–568.
- [61] Штейнберг М. М., Мирзаев Д. А., Пономарева Т. Н. Гамма-альфа превращение при охлаждении сплавов железо-марганец // *ФММ.* 1977. Т. 43. № 1. С. 166–172.
- [62] Мирзаев Д. А., Штейнберг М. М., Пономарева Т. Н. и др. Фазовые  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращения в бинарных сплавах железа с медью, кобальтом, рутением и платиной // *ФММ.* 1981. Т. 51. № 2. С. 364–375.

- [63] Мирзаев Д. А., Штейнберг М. М., Пономарева Т. Н., Счастливец В. М. Влияние скорости охлаждения на положение мартенситных точек. Углеродистые стали // ФММ. 1979. Т. 47. № 1. С. 125–135.
- [64] Мирзаев Д. А., Штейнберг М. М., Пономарева Т. Н., Счастливец В. М. Влияние скорости охлаждения на положение мартенситной точки II. Легированные стали // ФММ. 1979. Т. 47. № 50. С. 986–992.
- [65] Кащенко М. П., Эйшинский Е. Р. Определение оптимальной температуры генерации фононов неравновесными электронами в бинарных сплавах железа // ФММ. 1983. Т. 56, № 4. С. 681–689.
- [66] Weiss R. J., Marrotta A. S. Spin-dependence of the resistivity of magnetic metals // J. Phys. Chem. Sol. 1959. V.9. P. 302–308.
- [67] Вонсовский С. В. Магнетизм. – М. : Наука, 1971. 1032 с.
- [68] Saxena A., Shenoy S. R., Bishop A. R., Lookman T. A model of shape memory materials with hierarchical twinning: statics and dynamics // J. Phys. (Fr). 1995. V.5. № 12. P. 125 -130.
- [69] Гудремон Э. Специальные стали. Т. I. – М.: ГНТИЛ по черной и цветной металлургии. 1959. 952с.
- [70] Кащенко М. П., Семеновых А. Г., Чащина В. Г. Нижняя граница температуры начала формирования  $\alpha$ -мартенсита охлаждения в сплавах на основе железа // ФММ. 2003. Т. 95. №2 . С. 1–6.
- [71] Deng J., Long Q. Y., Ye F. et all. Fractal characteristics of the martensitic transformation in a Fe–29%Ni–0.16%C alloy // J. Phys. D: Appl. Phys. 1996. V. 29. P. 2672–2676.
- [72] Ролдугин В. И. Фрактальные структуры в материаловедении // Материаловедение. 2005. № 6. С.28–31.
- [73] Счастливец В. М., Калетина Ю. В., Фокина Е. А. Мартенситное превращение в магнитном поле. – Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322с.
- [74] Pasko A. Yu., Likhachev A. A., Koval Yu. N. and Kolomytsev V. I. 2D Fourier Analysis and its Application to Study of Scaling Properties and Fractal Dimensions of  $\varepsilon$ -Martensite // Journal de Physique IV. Colloque C5. 1997. V.7. P.435–440.

- [75] Счастливец В. М., Родионов Д. А. Стальные монокристаллы. –Екатеринбург: УрО РАН. 1996. 275 с.
- [76] Marder A. R., Krauss G. The formation of low-carbon martensite in Fe-C alloys // Trans. Quart. 1969. V. 62. № 4. P. 957–964.
- [77] Лободюк В. А., Эстрин Э. И. Изотермическое мартенситное превращение // УФН. 2005. Т. 175. № 7. С. 745–765.
- [78] Miyazaki S., Otsuka K., Wayman C. M. The shape memory mechanism associated with the martensitic transformation in Ti-Ni alloys – I. Self-accommodation // Acta metall. 1989. V. 37. № 7. P. 1873–1884.
- [79] Khachaturyan A. G., Shapiro S. M., Semenovskaya S. Adaptive phase formation in Martensitic transformation // Physical Review B. 1991. V. 43. № 13. P. 10832–10843.
- [80] Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Горностырев Ю.Н. Структурные превращения в нанокластерах сплава Fe-Ni. Результаты моделирования методом молекулярной динамики // ФММ. 2006. Т. 101. № 2. С. 146–157.
- [81] Waitz T., Pranger W., Antretter T., Fischer F. D., Karnthaler H. P. Competing accommodation mechanism of martensite in nanostructured NiTi shape memory alloys // Materials Science and Engineering. A. 2008. V. A 481–482. P. 479–483.
- [82] Rotaru G. M., Schryvers D. New (33) long-period microtwin variant in the martensitic phase of a PtTi alloy // Materials Science and Engineering. A. 2008. V. A 481–482. P. 437–441.
- [83] Meyer R., Entel P. Molecular dynamics Study of Iron-Nickel Alloys // IV European Symposium on martensitic transformations, Barselona 1994. A. Planes, J. Ortín and L. Mañosa Eds. (Les editions de physique). 1995. P. 123–128.
- [84] Meyer R., Entel P. Lattice Dynamics of Martensitic Transformations Examined by Atomistic Simulations // arXiv: cond- mat/ 9706248v1. 24 June. 1997.
- [85] Valiev R. Z., Estrin Y., Langdon T. G., Zehetbauer M. J., Zhu Y. T. Producing bulk ultrafine-grained materials by severe plastic deformation // JOM. 2006. № 4. P. 33–39.

- [86] Безносюк С. А., Важенин С.В., Жуковский М. С., Жуковская Т. М., Маслова О. А. Компьютерное моделирование алгоритмической эволюции квантово-размерных частиц // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2006. Т. 3. № 4. С. 7–14.
- [87] Munoz J. E., et al. Iron nanoparticles produced by high – energy ball milling // *J. Nanopart. Res.* 2007. № 9. P. 945–950.
- [88] Кащенко М. П., Минц Р. И. Колебательные аналоги деформации Бейна и морфология мартенсита в твердых растворах систем  $\gamma$  (Fe–Ni) // *ФТТ*. 1977. Т.19. № 2. С. 329–334.
- [89] Кащенко М. П., Верещагин В. П.- Движение границы мартенситного кристалла в модели фононного лазера // *ФММ*. 1985. Т. 60, № 5. С. 855–863.
- [90] Кащенко М. П. Условия генерации волн, сопоставляемых деформации Бейна // *ФММ*. 1980. Т. 49. № 5. С. 937–946.
- [91] Верещагин В. П., Кащенко М. П. Принципы отбора пар электронных состояний, потенциально активных в генерации фононов // *ФММ*. 1986. Т. 61. № 2. С. 237–244.
- [92] Кащенко М. П. Интерпретация ряда характерных морфологических признаков мартенсита систем Fe–Ni, Fe–C в модели фононного лазера // *ФММ*. 1984. Т. 58. № 5. С. 862–869.
- [93] Кащенко М. П., Летучев В. В., Коновалов С. В., Нескоромный С. В. Лазерное зондирование начальной стадии мартенситного превращения  $\gamma$ – $\alpha$  // *Известия РАН. Сер. Металлы*. 1992. № 2. С.105–108.
- [94] Кащенко М. П., Летучев В. В., Коновалов С. В., Нескоромный С. В. Физическое моделирование процесса зарождения  $\alpha$  –мартенсита // *ФММ*. 1992. Т. 67. № 1. С. 146–147.
- [95] Letuchev V. V., Konovalov S. V., Neskornnvi S. V., Kaschenko M. P. Initiation of the  $\gamma$  –  $\alpha$  martensitic transformation in iron–based alloys by picosecond pulses // *Journal of Materials Science Letters*. 1992. V. 11. P. 1683–1684.

- [96] Кашенко М. П., Летучев В. В., Коновалов С. В., Нескоромный С. В. Волновой механизм роста и новая методика инициирования зарождения  $\alpha$ -мартенсита. // ФММ. 1993. Т. 76. № 3. С. 90–101.
- [97] Кашенко М. П., Верещагин В. П. Центры зарождения и волновые схемы роста мартенсита в сплавах железа // Известия вузов. Сер. Физика. 1989. №8. С. 16–20.
- [98] Kashchenko M. P., Letuchev V. V., Alexina I. V., Nefedov A. V. Reconstruction of martensitic nucleation process from morphological attributes // J.Phys. IV France, Supplement au Journal de Physique III de novembre 1997. Colloque C5. V. 7. 1997. P. 89–94.
- [99] Кашенко М. П., Нефедов А. В., Верещагин В. П., Летучев В. В. Зарождение кристаллов  $\alpha$  – мартенсита с габитусами (hhl) в упругих полях дислокационных петель // ФММ. 1998. Т. 85. № 4. С. 25 – 39.
- [100] Чащина В. Г. Зависимость относительного изменения объема при ОЦК–ГПУ мартенситном превращении от упругих свойств исходной фазы. XIX Уральская школа металловедов – термистов: «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов», посвященная 100-летию со дня рождения академика В.Д. Садовского. Екатеринбург, 4–8 февраля 2008г.: сборник материалов, Екатеринбург: УГТУ–УПИ. 2008. С. 152.
- [101] Кашенко М. П., Чащина В. Г. Кристаллодинамика ОЦК–ГПУ мартенситного превращения. I. Управляющий волновой процесс // ФММ. 2008. Т. 105. № 6. С. 571–577.
- [102] Кашенко М. П., Чащина В. Г. Кристаллодинамика ОЦК–ГПУ мартенситного превращения. II. Морфология мартенсита // ФММ. 2008. Т. 106. № 1. С. 16–25.
- [103] Кашенко М. П., Чащина В. Г. Критический размер зерна при зарождении кристалла мартенсита в упругом поле дислокации. XIX Уральская школа металловедов – термистов: «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов», посвященная 100-летию со дня рождения академика В.Д. Садовского. Екатеринбург, 4–8 февраля 2008г.: сборник материалов, Екатеринбург: УГТУ–УПИ. 2008. С. 42.
- [104] Кашенко М. П., Чащина В. Г. Соотношение пространственных масштабов при зарождении мартенсита в упругом поле дислокации.



- С. 242–249. В кн. : V Международная научная конференция «Прочность и разрушение материалов и конструкций»: Материалы конференции. Т.2, 12–14 марта 2008 г. Оренбург, Россия / Науч. ред. С. Н. Летута, Г. В. Клевцов: ИПК ГОУ ОГУ, 2008. 424с.
- [105] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Зависимость температуры начала мартенситного превращения от размера зерна / XLVII Международная конференции “Актуальные проблемы прочности”, 1–5 июля 2008 года, Нижний Новгород: материалы конференции. Часть 1.– Н. Новгород, 2008. С. 237–239.
- [106] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Проблема критического размера зерна при  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситном превращении. Термодинамический анализ с учетом пространственных масштабов, характерных для стадии зарождения мартенсита // Физ. мезомех. 2010. Т. 13. № 1. С. 29–35.
- [107] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Зависимость температуры начала  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситного превращения от размера зерна // Физ. мезомех. 2010. Т. 13. № 1. С. 37–45.
- [108] Кащенко М. П. Согласование концентрационной зависимости температур мартенситных превращений в системах Fe–Ni, Fe–Mn с условиями генерации в модели фононного мазера // ФММ. 1980. Т.50. № 3. С. 671–672.
- [109] Кащенко М.П. Сравнение двух источников неравновесности электронной подсистемы при учете затухания электронов // Изв. Вузов. Физика. 1982. № 3. С. 113–114.
- [110] Чащина В. Г., Федоровских Е. С., Кащенко М. П. Размер критического свободного объема для начала спонтанного  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситного превращения. I. Алгоритм расчета доли превращенного аустенита. С. 150–152 / X Международная научно–техническая Уральская школа–семинар. –Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ–УПИ. 2009. 428с.
- [111] Чащина В. Г., Федоровских Е. С., Кащенко М. П. Размер критического свободного объема для начала спонтанного  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситного превращения. II. Расчет температуры  $M_f$ . С. 147–149 / X Международная научно–техническая Уральская школа–семинар. –Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ–УПИ, 2009, 428с.

- [112] Kashchenko M. P., Chashchina V. G., Vikharev S. V. Wave model of forming of the martensite crystal in the heterogeneity medium // Arxiv. 1003. 2952. 5p.
- [113] Чащина В. Г. Кристаллодинамическая модель коротковолновой перетасовки при ГЦК – ГПУ мартенситном превращении/ XLVII Международная конференции “Актуальные проблемы прочности”, 1–5 июля 2008 года, Нижний Новгород: материалы конференции. Часть 1.– Н.Новгород, 2008. С. 240–242.
- [114] Barsch G. R., Horovitz B., Krumhansl J. A. Dynamical of twin boundaries in martensites // Phys. Rev. Letters. 1987. V. 59. № 11. P. 1251–1254.
- [115] Bales G. S., Gooding R. J. Interfacial dynamics at a first–order phase transition involving strain: dynamical twin formation // Phys. Rev. Letters. 1991. V. 67. № 24. P. 3412–3415.
- [116] Reid A. C. E., Gooding R. J. Hydrodynamic description of elastic solids with open boundary conditions undergoing a phase transition // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. № 6. P. 3558–3602.
- [117] Rao M., Sengupta S. Droplet fluctuations in the morphology and kinetics of martensites // Phys. Rev. Letters. 1997. V. 78. № 11. P. 2168–21714.
- [118] Theil F., Levitas V. I. A study of a hamiltonian model for martensitic phase transformations including microkinetic energy // arXiv: ptt-sol/9811006 v1 [cond-mat. mtrl-sci] 19 Nov 1998.
- [119] Fischer F. D. Mechanics and phase transformation // Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage. Proceedings of EUROMAT 2000. V.I. Amsterdam: Elsevier science Ltd. 2000. P. 41–52.
- [120] Wang L. X., Melnik R. V. N. Thermo–Mechanical Wave Propagation In Shape Memory Alloy Rod With Phase Transformations // arXiv: cond-mat/0702689v1 [cond-mat. mtrl-sci] 28 Feb 2007.
- [121] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Динамическая модель формирования мартенситных кристаллов при В2–В19–В19' превращениях. С. 153–155 / XVIII Петербургские чтения по проблемам прочности и роста кристаллов. Санкт-Петербург, 21–24 октября 2008г.: сборник материалов. Ч. II. СПб. 2008. 276с.

- [122] Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч.I. Структура, фазовые превращения и свойства. – Екатеринбург: УрО РАН, 2006. 439с.
- [123] Малыгин. Г. А. Размытые фазовые переходы и пластичность кристаллов с эффектом памяти формы // УФН. 2001. Т. 171. № 2. С. 187–212 .
- [124] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Аккомодационное мартенситное превращение в нанокристаллическом состоянии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2008. Т. 5. № 2. С. 40–44.
- [125] Малыгин. Г. А. Наноразмерные эффекты при дислокационной и мартенситной деформации металлов и сплавов / XLVII Международная конференции “Актуальные проблемы прочности”, 1–5 июля 2008 года, Нижний Новгород: материалы конференции. Часть 2. Н. Новгород, 2008. С. 11–14.
- [126] Чащина В. Г. Формирование кристаллов  $\alpha$ -мартенсита с габитусами {557}. С. 250–253. В кн. : V Международная научная конференция «Прочность и разрушение материалов и конструкций»: Материалы конференции. Т. 2. 12–14 марта 2008 г.– Оренбург, Россия / Науч. ред. С.Н. Летута, Г. В. Клевцов: ИПК ГОУ ОГУ. 2008. 424с.
- [127] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Механизм ГЦК – ОЦК мартенситного превращения с наибоыстрейшей перестройкой плотноупакованных плоскостей. I. Соотношение параметров решеток и габитусные плоскости // Известия вузов. Физика. 2008. № 7. С. 3–7.
- [128] Кащенко М. П., Чащина В. Г. Механизм ГЦК – ОЦК мартенситного превращения с наибоыстрейшей перестройкой плотноупакованных плоскостей. II. Ориентационные соотношения // Известия вузов. Физика. 2008. № 11. С. 42–47.
- [129] Кассан–Оглы Ф. А., Найш В. Е., Сагарадзе И. В. Диффузное рассеяние в металлах с ОЦК решеткой и кристаллогеометрия мартенситных фазовых переходов ОЦК–ГЦК и ОЦК–ГПУ // ФММ. 1988. Т. 65. № 3. С. 481–492.
- [130] Крапошин В.С. Атомный механизм мартенситных превращений в рамках алгебраической геометрии // Проблемы черной металлургии и материаловедения. 2008. № 1. С. 62 – 75.

- 
- [131] Кащенко М. П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа. – Изд. 2-е. испр. и дополн. – М. – Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Ижевский институт компьютерных исследований. 2010. 280с.

Научное издание

*Кащенко Михаил Петрович  
Чащина Вера Геннадиевна*

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ  
 $\gamma \rightarrow \alpha$  МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ  
В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА  
И РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ  
КРИТИЧЕСКОГО РАЗМЕРА ЗЕРНА

*Авторская редакция*

---

Подписано в печать 07.07.10. Формат 60×84  $\frac{1}{16}$ .  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 7,67. Уч. изд. л. 8,41.  
Гарнитура Times. Бумага офсетная №1. Заказ № 48.  
АНО «Ижевский институт компьютерных исследований»  
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.  
<http://shop.rcd.ru> E-mail: [mail@rcd.ru](mailto:mail@rcd.ru) Тел./факс: (+73412) 500–295

---