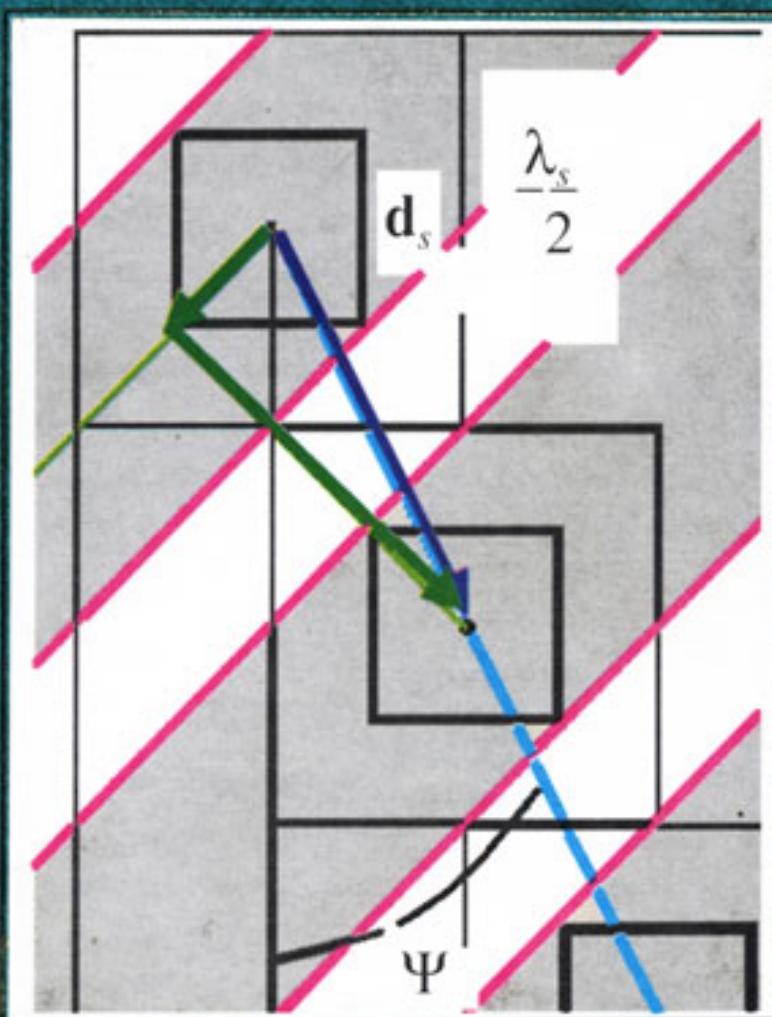


М.П. Кащенко, В.Г. Чашнина

---

**ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ  
ФОРМИРОВАНИЯ ДВОЙНИКОВЫХ  
МАРТЕНСИТНЫХ КРИСТАЛЛОВ  
ПРИ  $\gamma$ — $\alpha$ -ПРЕВРАЩЕНИИ  
В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА**



ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ЛЕСОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

М.П. Кащенко, В.Г. Чащина

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ  
ФОРМИРОВАНИЯ ДВОЙНИКОВЫХ  
МАРТЕНСИТНЫХ КРИСТАЛЛОВ  
ПРИ  $\gamma$ — $\alpha$ -ПРЕВРАЩЕНИИ  
В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА

ЕКАТЕРИНБУРГ  
2009

УДК 001.891.572:669.112.227.346.2

ББК 34.22—1

К31

Рецензент

главный научный сотрудник ИФМ УрО РАН,  
доктор физ.-мат. наук профессор **В.В. Кондратьев**

К 31 Кащенко М.П., Чащина В.Г. **Динамическая модель формирования двойниковых мартенситных кристаллов при  $\gamma$ - $\alpha$ -превращении в сплавах железа** / Урал. гос. лесотехн. ун-т. Екатеринбург, 2009. 98 с.

ISBN 978—5—94984—243—0.

На основе оригинальных исследований стадий зарождения и роста мартенсита рассматриваются динамические модели формирования пластин мартенсита с тонкой структурой двойников превращения, совместимые со сверхзвуковой скоростью роста мартенситных кристаллов. Управляющий волновой процесс наряду с относительно длинными квазипродольными волнами, задающими ориентацию габитусной плоскости, включает и относительно короткие продольные волны, которые, действуя синхронно, обеспечивают управление ростом основной компоненты регулярной двойниковой структуры. Предпочтение отдается модели, содержащей в начальный момент единственную активную динамическую ячейку, способную периодически воспроизводиться в межфазной области на стадии роста мартенситного кристалла. Обсуждаются условия, задающие соотношение компонент двойниковой структуры, оптимальное для минимизации времени превращения. Осуществляется переход к финишным деформациям, превышающим пороговые деформации на два-три порядка. Проводится сравнение расчета макроскопических морфологических признаков, полученных при динамическом рассмотрении, с экспериментальными данными и кристаллогеометрическими расчетами. Самостоятельный интерес представляют обсуждение результатов и выводы в заключительной части монографии.

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—94984—243—0 © Кащенко М.П.,

Чащина В.Г., 2009

© Уральский государственный  
лесотехнический университет,  
2009

**ВВЕДЕНИЕ**

---

Для реконструктивных мартенситных превращений достаточно распространено формирование тонкой структуры двойников превращения. Помимо обсуждения ряда общих проблем, связанных с протеканием мартенситного превращения, в качестве важного приложения развивающейся динамической теории роста кристаллов [1, 2] здесь рассматривается образование двойников при  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситном превращении в сплавах на основе железа в кристаллах с габитусными плоскостями типа  $\{3\bar{9}\,11\}_{\gamma} - \{3\,10\,15\}_{\gamma}$ . В этом случае наблюдается (см., например, [3, 4]) возникновение двойниковой структуры, включающей чередующиеся слои основной и двойниковой компонент с ортогональными (в исходной фазе) ориентировками главных осей сжатия  $\langle 001 \rangle_{\gamma}$  деформации Бейна. Обе компоненты двойниковой структуры имеют общую ось растяжения с направлением из совокупности  $\langle 001 \rangle_{\gamma}$ . Отношение  $\beta$  объемных долей компонент двойниковой структуры ориентировано лежит в интервале  $1 < \beta < 2$ , их распределение регулярное, а сочленение по плоскостям  $\{110\}_{\gamma}$ , переходящим в плоскости  $\{112\}_{\alpha}$ , считается близким к когерентному.

В связи с тем, что вопрос о механизме двойникования играет важную роль для развития теории мартенситных превращений, остановимся вкратце на основных подходах к его описанию.

В кристаллогеометрической теории (см., например, [5—9]) наличие двойников превращения рассматривается как один из вариантов неоднородной деформации с инвариантной решеткой, приводящей вместе с однородной деформацией к суммарной деформации с макроскопически инвариантной [5] или слабоискаженной [6—8] плоскостью, задающей ориентацию габитусной плоскости. Причем требование сведения результирующей деформации к деформации с инвариантной (или слабоискаженной) плоскостью выполняется лишь при определенном соотношении объемных долей двойниковых составляющих.

При термодинамическом подходе (см., например, [11—14]) основное внимание уделяется вопросу расчета термодинамиче-

ской движущей силы, т. е. разности значений химических свободных энергий начальной и конечной фаз. Наличие такой разности является необходимым условием для реализации полиморфизма. Суть же мартенситной реакции — в физической природе кооперативного механизма перестройки. Очевидно, что ответ на этот основной вопрос лежит вне компетенции равновесной термодинамики. Применительно к интерпретации морфологических признаков контакт исходной (аустенит) и конечной (мартенсит) фаз по инвариантной плоскости интерпретируется как необходимое условие для минимизации упругой энергии существующих фаз. Полисинтетическое двойникование при этом рассматривается как процесс, обеспечивающий эффективную релаксацию упругих напряжений, предпочтительный в области низких температур по сравнению с дислокационным скольжением в аустените. В случае высоких температур допускается неинвариантность габитусной плоскости в связи с облегчением релаксации напряжений за счет сдвигов в окружающем аустените.

При динамическом подходе, претендующем на описание процессов формирования мартенситных кристаллов и, в общем случае, интерпретирующем стадии зарождения, роста новой фазы и аккомодационные явления, отметим следующие направления:

- 1) дислокационные механизмы сдвига для описания как механического двойникования [15—17], так и мартенситной реакции в кристаллических телах [17—19];

- 2) трактовки, базирующиеся на использовании функционала Гинзбурга—Ландау [20] и его обобщениях применительно к различным (по пространственным размерностям и типам структурных перестроек) моделям (см., например, [21—30]);

- 3) анализ предпереходного состояния [31—35], включающий изучение эволюции коллективных возбуждений в системе при подходе к температуре начала мартенситного превращения  $M_s$  (для выявления возможных микроскопических параметров порядка [36]) и учет полей (главным образом упругих), создаваемых существующими дефектами, что принципиально важно для конкретизации механизма гетерогенного зарождения при фазовых переходах первого рода [37—39];

- 4) метод молекулярной динамики (см., например, [40—42]).

На каждом из указанных направлений исследования имеются существенные достижения. Однако, если руководствоваться требованием полноты описания всей совокупности на-

блюдаемых особенностей мартенситных превращений, то, по крайней мере, для упоминавшегося  $\gamma\rightarrow\alpha$  мартенситного превращения в сплавах на основе железа ни одно из этих направлений, взятое порознь, не приводит к теории, адекватной картине, наблюдаемой при мартенситном превращении в монокристаллах (содержащих, тем не менее, дислокации с плотностью порядка  $10^4 \text{ см}^{-2}$ ) или зернах аустенита, превышающих критический размер. В наибольшей степени критерию полноты описания  $\gamma\rightarrow\alpha$  мартенситного превращения удовлетворяет, на наш взгляд, вариант динамической теории, опирающийся на синтез концепций гетерогенного зарождения и управляемого волнового роста. Существенные этапы становления динамического подхода, помимо монографии [1] и легко доступного в Интернете ее перевода [2], ретроспективно отражаются, например, в работах [43—56] применительно к описаниям возникновения начального возбужденного состояния и механизма поддержания пороговых деформаций в волновых процессах, управляющих началом формирования кристаллов мартенсита охлаждения. Ключевыми моментами для развития этой теории послужили следующие экспериментальные факты: большая степень переохлаждения ниже температуры равновесия фаз; высокая скорость роста мартенситных кристаллов (превышающая скорость продольных волн в аустените); наличие однозначно связанных между собой макроскопических морфологических признаков (ориентация габитусной плоскости, макро-двиг, взаимная ориентация решеток исходной и конечной фаз), свидетельствующие о едином механизме кооперативной перестройки решетки.

Для детализации описания также существенно, что наблюдается смещение  $M_s$  при наложении внешних упругих напряжений. Это позволяет считать, что управляющий волновой процесс несет пороговые деформации, не превышающие предел упругости аустенита. Отсюда вытекает, в свою очередь, правомерность при рассмотрении модели управляющего волнового процесса использовать для суперпозиционного описания упругие волны исходной фазы. В результате возникает исключительное по простоте описание сложного явления.

Кроме того, уже в [48] сформулирована гипотеза, согласно которой управление формированием двойниковой структуры должно интерпретироваться как следствие согласованного распространения сравнительно коротковолновых и длинно-

волновых смещений атомов. Пары волн смещений (условно называемые здесь длинноволновыми, или, сокращенно, *l*-волнами (от «*long wave*»)), ответственные за формирование габитусной плоскости, имеют длины волн порядка толщины мартенситной пластины  $\lambda_l \sim (0.1—1)$  мкм. Пары продольных волн (условно называемые здесь коротковолновыми, или, сокращенно, *s*-волнами (от «*short wave*»)), бегущих вдоль ортогональных направлений  $\langle 100 \rangle_\gamma$  и  $\langle 010 \rangle_\gamma$ , задают границы  $\{110\}_\gamma$  (соответствующие границам  $\{112\}_\alpha$  двойников) и характеризуются длинами волн  $\lambda_s \sim 10^{-2}$  мкм (порядка толщины периода двойниковой структуры).

При ясном понимании физической сути согласования *l*- и *s*-волн, можно рассчитывать получить адекватные реальности ответы на вопросы, касающиеся: конкретизации процессов формирования основной и двойниковой составляющих; выявления динамических факторов, задающих отношение объемных долей двойниковых составляющих и характер их чередования включая вариант строгой регулярности; установления вкладов *l*- и *s*-волн в потерю устойчивости исходной  $\gamma$ -фазы.

Уместно подчеркнуть, что в известном обзоре [9], при кратком обсуждении данных о высокой скорости мартенситного превращения, само собой разумеющимся пределом считалась скорость звука. Более того, поскольку макросдвиг, вызывающий поверхностный рельеф, выступает явным признаком мартенситного превращения, в качестве предельной подразумевалась скорость поперечного звука. Для классического  $\gamma-\alpha$  мартенситного превращения в сплавах на основе железа фактор упругой анизотропии больше единицы и, следовательно, скорости поперечных упругих волн меньше скорости продольных. Поэтому объяснение сверхзвуковой (по отношению к продольным волнам) скорости роста мартенситных кристаллов имело принципиальный характер для прояснения физической природы мартенситного превращения и было достигнуто в рамках концепции управляющего волнового процесса. Очевидно, что в условиях сверхзвуковой скорости роста мартенситного кристалла особую остроту приобретает проблема описания механизма формирования регулярной структуры двойников превращения. Существенное продвижение в решении этой проблемы связано с анализом возможностей модели описания двойниковой структуры кристаллов как следствия распространения управляющих *l*-волн по решетке, обладающей регулярной прост-

ранственной структурой колеблющихся  $s$ -ячеек [57]. Принципиальную роль для развития модели сверхзвукового двойникования, не требующей наличия упорядоченной пространственной структуры колеблющихся  $s$ -ячеек, сыграла отмеченная в [57] (в качестве перспективного направления исследований) возможность подкачки энергии в  $s$ -ячейки за счет распространения волновых пучков вдоль взаимно ортогональных направлений  $[110]_{\gamma}$  и  $[1\bar{1}0]_{\gamma}$ . Эта возможность, как впервые показано в [58], позволяет уже при учете пороговых деформаций понять, каким образом может возникнуть регулярная структура двойников превращения в пределах мартенситного кристалла при наличии единственной исходной активной  $s$ -ячейки.

Кроме того, для полноты описания мартенситного превращения требуется ясное понимание пути перехода от пороговых деформаций, переносимых управляющим волновым процессом и лежащих в диапазоне упругих деформаций исходной фазы, к финишным деформациям, превышающим пороговые на два-три порядка. Ясно, что только после перехода к финишным деформациям можно вполне определенно интерпретировать такие наблюдаемые макроскопические морфологические признаки как макросдвиг и взаимная ориентация решеток исходной и конечной фаз. Заметим, что вопрос о переходе от пороговых деформаций к финишным в принципе решен в работах [59—64] на примере ОЦК—ГПУ- и ГЦК—ОЦК-мартенситных превращений для случая, когда управляющий волновой процесс обеспечивает наибыстрейшую перестройку плотнейших по степени упаковки плоскостей исходной фазы с последующей перетасовкой трансформированных плоскостей без учета двойникования кристаллов. Представляет интерес рассмотреть переход от пороговых деформаций к финишным и для случая двойниковых кристаллов мартенсита при  $\gamma$ — $\alpha$  мартенситном превращении, полагая, что управляющий волновой процесс стимулирует процесс деформации Бейна.

Цель данной работы — постараться в сжатой форме последовательно ответить на перечисленные вопросы. Порядок изложения включает: описание динамической модели формирования пластинообразных областей при распространении управляющего волнового процесса, ограниченных габитусными плоскостями и границами раздела двойников (глава 1); систему волновых уравнений (глава 2), сопоставляемых управляющему волновому процессу; качественное обсуждение предельных

случаев предпереходного состояния решетки аустенита (модулированного относительно коротковолновыми  $s$ -смещениями), допускающих формирование регулярной слоистой структуры (глава 3); типичные результаты распределения компонент регулярных слоистых структур для трех предельных случаев предпереходного состояния решетки в приближении пороговой деформации (глава 4); переход от пороговых деформаций к финишным с учетом тетрагональности решетки мартенсита и оценку вкладов в финишную деформацию, обусловленных воздействием  $l$ - и  $s$ -волн (глава 5); выяснение критерия реализации регулярных слоистых структур в качестве двойниковых структур; расчет ориентационных соотношений и макросдвига на примере кристаллов с габитусами  $(10\ 3\ 15)_y$ , обладающих регулярной двойниковидной структурой (глава 6); заключительное обсуждение результатов (глава 7).

Авторы выражают благодарность коллегам и специалистам, дискуссии с которыми способствовали критическому отбору значимой для анализа информации и инициировали исследования формирования двойников превращения.

**Глава 1**

**СВЕРХЗВУКОВОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ  
УПРАВЛЯЮЩЕГО ВОЛНОВОГО ПРОЦЕССА  
В МОДЕЛИ НАЛАГАЮЩИХСЯ ВОЛНОВЫХ ПУЧКОВ  
С ОРТОГОНАЛЬНЫМИ НАПРАВЛЕНИЯМИ СКОРОСТЕЙ**

---

Напомним, что в волновой теории роста мартенситного кристалла ориентация габитусной плоскости задается (заметается) движущейся линией пересечения фронтов волн (волновых пучков), распространяющихся в ортогональных направлениях. Как правило, управляющий волновой процесс несет пороговую деформацию (типа растяжение — сжатие), задавая габитусную плоскость как инвариантную (или слабоискаженную) плоскость. Таким образом, на мезомасштабе (порядка толщины кристалла) этот управляющий волновой процесс несет близкую к плоской и близкую к однородной деформацию. Синтез концепций гетерогенного зарождения и волнового роста достигается, если считать, что волновые нормали  $\mathbf{n}_{1l}$  и  $\mathbf{n}_{2l}$  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:

$$\mathbf{n}_{1l} \parallel \xi_1, \quad \mathbf{n}_{2l} \parallel \xi_2, \quad \mathbf{n}_{1l} \perp \mathbf{n}_{2l}, \quad |\mathbf{n}_{il}| = |\xi_i| = 1. \quad (1)$$

На рис. 1 приведена схема, иллюстрирующая эти процессы.

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

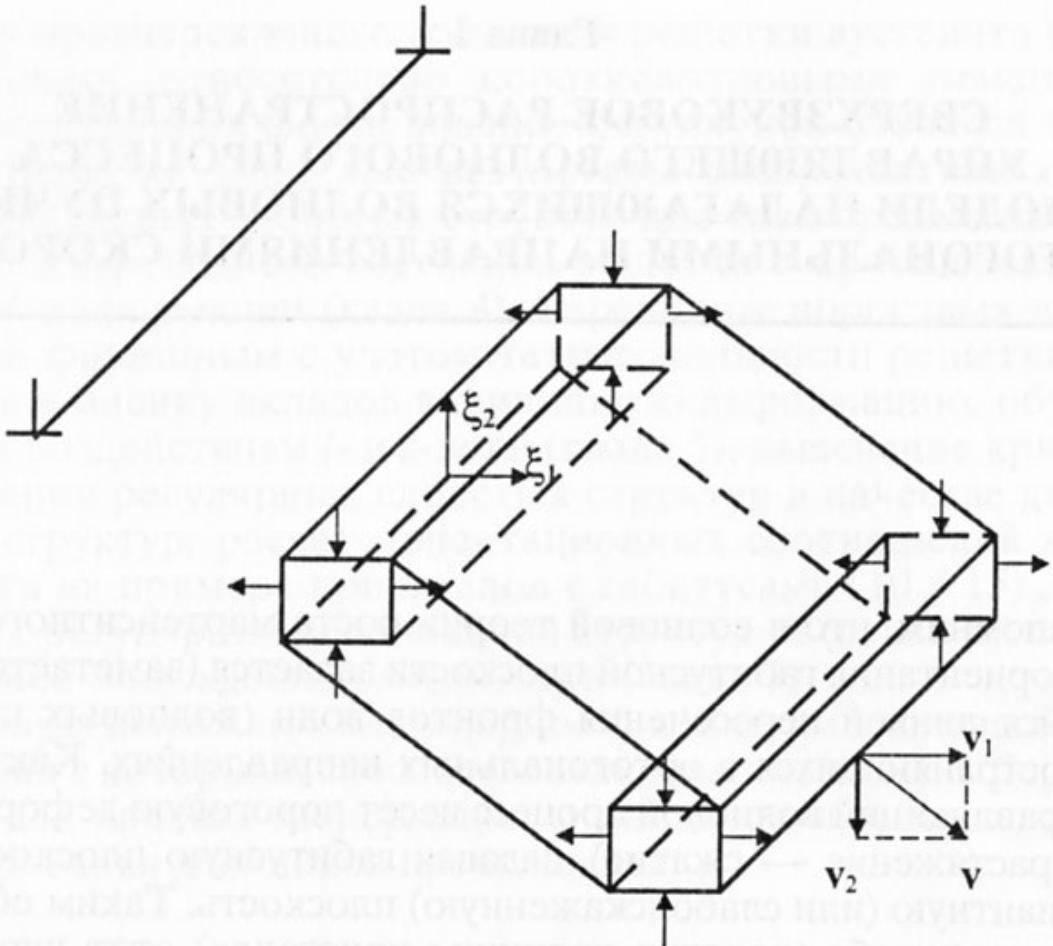


Рис. 1. Волновая модель управления ростом мартенситного кристалла

с благоприятным для реализации пороговой деформации полем смещений атомов. Формирование пластинчатого прообраза мартенситного кристалла естественно интерпретировать как перемещение параллелепипеда со скоростью  $v$ , являющейся векторной суммой скоростей  $v_1$  и  $v_2$  волновых пучков. Поскольку выделение энергии, необходимой для автокаталитической подпитки волны, происходит только в объеме, испытавшем пороговую деформацию, именно сверхзвуковая скорость  $v$  становится реальной скоростью роста кристалла. Начальное возбужденное состояние в форме колеблющегося параллелепипеда, представляющее собой развитие критической флуктуации поля смещений атомов, возникает в упругих полях, создаваемых дефектами. 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. Таким образом, направления распространения волновых пучков, а значит, и направ-

ление роста кристалла, генетически связаны с особенностями упругого поля дефекта в области зарождения. Следовательно, управляющий волновой процесс наследует информацию о направлениях главных осей деформации. Заметим, что в общем случае длинное ребро параллелепипеда на рис. 1 не параллельно линии дислокации.

Легко показать [1, 2], что нормаль  $\mathbf{N}_{wl}$  к плоскости габитуса, связанная с распространением управляющего волнового процесса, задается кинематическим соотношением

$$\mathbf{N}_{wl} \parallel \mathbf{n}_{2l} - \mathbf{n}_{1l} \alpha_l, \quad \alpha_l = \frac{v_{2l}}{v_{1l}}, \quad (2)$$

где  $v_{1l}$  и  $v_{2l}$  — модули скоростей распространения  $l$ -волн в  $\mathbf{n}_{1l}$ - и  $\mathbf{n}_{2l}$ -направлениях. Вместе с тем при плоской однородной деформации растяжения—сжатия нормали к инвариантным плоскостям имеют вид

$$\mathbf{N}_d \parallel \xi_2 \pm k \xi_1, \quad (3)$$

$$k = \frac{1 - |\epsilon_2|}{1 + \epsilon_1} \left( \frac{\epsilon_1}{|\epsilon_2|} \frac{(2 + \epsilon_1)}{(2 - |\epsilon_2|)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4)$$

Поскольку управляющий волновой процесс несет деформацию с инвариантной плоскостью, естественно считать, что имеет место совпадение кинематического и динамического описания габитусной плоскости при распространении управляющего волнового процесса, т. е. формулы (2) и (3) описывают один и тот же габитус, если значения  $\epsilon_i$  в (4) соответствуют пороговым. Тогда при учете (1) получаем важное условие

$$\alpha_l = k, \quad (5)$$

задающее связь между деформациями и скоростями распространения волн при распространении управляющего волнового процесса. Строго говоря, выполнение (5) 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 про-

дольными можно использовать как первое приближение для качественных оценок. К обсуждению этого вопроса мы вернемся в гл. 7, а пока будем считать условие (5) выполненным.

Учитывая, что пороговые деформации  $\varepsilon_{th}$  малы ( $\varepsilon_{th} \sim 10^{-3}$ ), условие (5) записываем в виде

$$\alpha_l = \frac{v_{2l}}{v_{1l}} = k \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}, \quad (6)$$

где скорости  $v_{2l}$  и  $v_{1l}$  можно рассчитывать с помощью уравнения Кристоффеля [65], используя модули упругости исходной кристаллической решетки (желательно при температуре  $M_s$ ).

Легко понять, как изложенный формализм может приводить к описанию границы контакта компонент двойника с ортогональными (в исходной фазе) направлениями главных осей сжатия, стимулируя варианты микроскопически однородной деформации Бейна. Напомним (рис. 2, взятый из [3]), что деформация Бейна включает сжатие вдоль одной из осей  $\langle 001 \rangle_\gamma$  и синхронные растяжения вдоль пары ортогональных осей  $\langle 100 \rangle_\gamma, \langle 010 \rangle_\gamma$  (либо  $\langle 110 \rangle_\gamma, \langle \bar{1}10 \rangle_\gamma$ ).

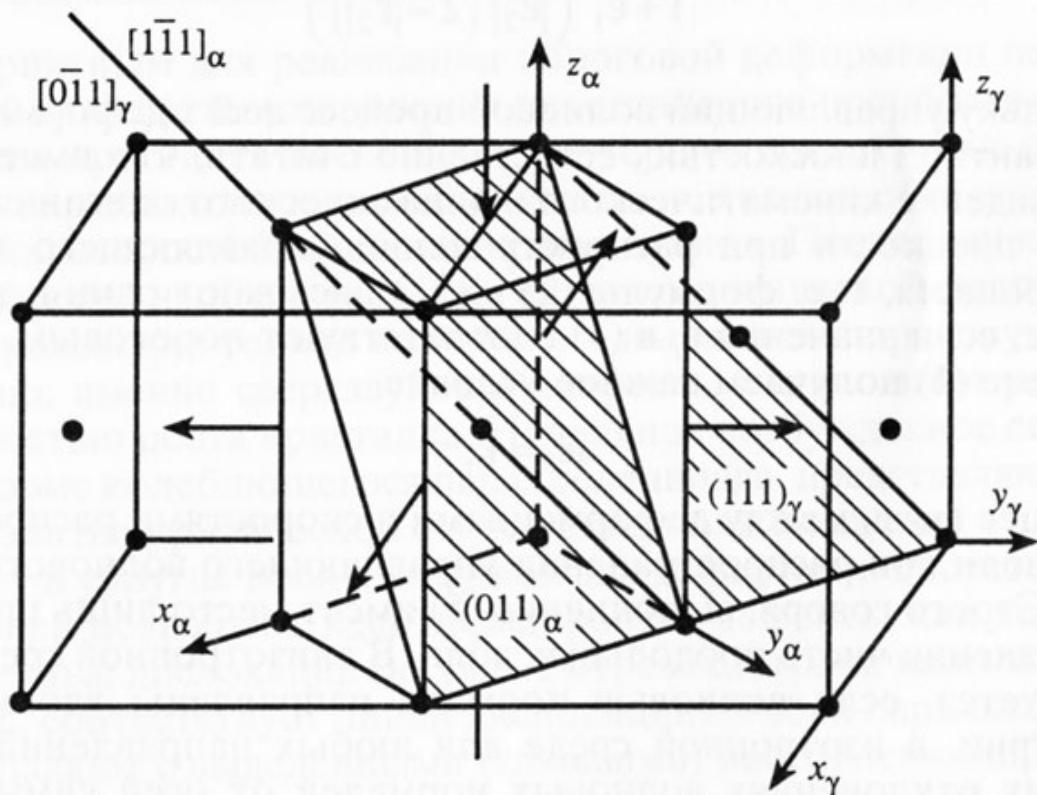


Рис. 2. Схема, поясняющая деформацию Бейна и кристаллографическое соответствие плоскостей и направлений [3]

Очевидно, что в кубической решетке возможны три варианта такой деформации. Допустим (подробнее в следующем разделе), что в предпереходном состоянии имеются неоднородности в форме вытянутых прямоугольных параллелепипедов с ребрами вдоль осей симметрии  $\langle 001 \rangle_\gamma$ . Причем размер длинного ребра порядка  $\lambda_s$ , а два других ребра имеют равные размеры порядка  $\lambda_t$ . Если деформации вдоль коротких ребер имеют разный знак, то возникновение возбужденного состояния в форме колеблющегося параллелепипеда приведет к излучению волновых пучков в ортогональных направлениях  $\mathbf{n}_{1s}$  и  $\mathbf{n}_{2s}$ . Полагая, например,  $\mathbf{n}_{1s} = [010]_\gamma$  и  $\mathbf{n}_{2s} = [100]_\gamma$  и подставляя в (2)  $\mathbf{n}_{1,2s}$  вместо  $\mathbf{n}_{1,2t}$  и  $\alpha_s = 1$  вместо  $\alpha_t$ , находим  $\mathbf{N}_{ws} \parallel [1\bar{1}0]_\gamma$ . При смене направления нормали  $\mathbf{n}_{1s} = -[010]_\gamma$  получим  $\mathbf{N}_{ws} \parallel [110]_\gamma$ . Значит, границы между компонентами двойников превращения имеют ориентировки  $\{110\}_\gamma$ . Подчеркнем, что скорость роста компоненты двойника  $\mathbf{v}_s$ , являясь векторной суммой одинаковых по модулю скоростей  $\mathbf{v}_{1,2s}$ , в  $\sqrt{2}$  раз больше скорости продольной волны вдоль оси  $\langle 001 \rangle_\gamma$ . Поскольку  $\lambda_s$  хотя бы в несколько раз превышает параметр решетки, волновые векторы  $s$ -волн лежат в области, где дисперсия еще сказывается не сильно, и, значит, скорости  $\mathbf{v}_{1,2s}$  можно считать близкими к скорости продольного звука в направлении  $\langle 001 \rangle_\gamma$ . Тогда скорость роста компоненты двойника  $\mathbf{v}_{tw}$  дается соотношением

$$\mathbf{v}_{tw} = \mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{1s} + \mathbf{v}_{2s} \parallel \langle 110 \rangle_\gamma, \quad v_{tw} = \sqrt{2} v_{1,2s} \approx \sqrt{2(C_{11}/\rho)}, \quad (7)$$

где  $\rho$  — плотность материала, а  $C_{11}$  — упругий модуль второго порядка кубического кристалла. В обсуждаемом случае сплавов на основе железа коэффициент упругой анизотропии  $A > 1$ , и, значит, скорости продольных упругих волн превышают скорости поперечных волн. Заметим, что во всех моделях, не учитывающих эффект суперпозиции волновых пучков, приводящий к интерпретации нелинейной волны превращения как модифицированной волны переключения [1, 2, 52], скорости роста самого кристалла и двойника не могут превышать скорости поперечного звука. Поэтому результаты, базирующиеся на традиционном использовании функционала Гинзбурга—Ландау (не говоря уже о варианте, связанном с движением дислокаций) неприменимы для интерпретации механизма формирования мартенситного кристалла со сверхзвуковой скоростью.

**Глава 2****СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ, ЗАДАЮЩИХ УПРАВЛЯЮЩИЙ ВОЛНОВОЙ ПРОЦЕСС ПРИ РЕКОНСТРУКТИВНЫХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ**

Несмотря на геометрическую простоту и наглядность приведенной в гл. 1 физической картины, полезно сформулировать адекватную ей систему волновых уравнений, уточнив заодно и расчет объема области локализации решетки, теряющей устойчивость при распространении управляющего волнового процесса, несущего пороговую деформацию.

Будем считать, в соответствии с анализом, выполненным в [1, 2, 66], что в области решетки, теряющей устойчивость под действием управляющего волнового процесса, неравновесная электронная подсистема обеспечивает сохранение высокого уровня амплитуд колебаний и соответствующих деформаций. Тогда, оставляя «за кадром» микроскопический механизм генерации (усиления) волн, можно полагать, что в области наложения деформаций растяжения и сжатия происходит компенсация затухания управляющих волн. Возьмем за основу пару простейших волновых уравнений для волн, бегущих в ортогональных  $\mathbf{n}_1$ - и  $\mathbf{n}_2$ -направлениях, которые без ограничения общности можно принять в качестве  $x$  и  $y$  направлений:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + b_1(\varepsilon_1, \varepsilon_2)u_1 = 0, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + v_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} + b_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2)u_2 = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где  $u_{1,2}$  — смещения от положений равновесия;  $v_{1,2}$  — модули скоростей продольных (квазипродольных) упругих волн, а  $b_{1,2}$  — коэффициенты, учитывающие «эффективные» затухания ( $b_{1,2}$  в общем случае могут менять знак, в частности обращаться в нуль) волн соответственно в  $x$ - и  $y$ -направлениях.

Следует иметь в виду, что параметры  $b_{1,2}$  в отсутствие механизма усиления положительны, но удовлетворяют требованию  $b_{1,2} \leq 0$  при выполнении условий генерации волн в области наложения управляющих волн с деформациями  $\varepsilon_1 > 0$  и  $\varepsilon_2 < 0$ . Очевидно, что простейший случай компенсации усиления и потерь соответствует  $b_{1,2} = 0$ . В реальности компенсация затухания будет лишь в области выделения энергии, поэтому взаимодействие волн отражается в системе (8) через зависимости коэффициентов  $b_{1,2}$  от деформаций  $\varepsilon_{1,2}$ . В простейшем случае эти зависимости удобно записать в виде

$$b_i(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \alpha_i (1 - \Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_{\text{п1}})\Theta(\varepsilon_{\text{п2}} - \varepsilon_2)), \quad (9)$$

где  $i = 1,2$  и деформации  $\varepsilon_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x}$ ,  $\varepsilon_2 = \frac{\partial u_2}{\partial y}$ .

В (9)  $\varepsilon_{\text{п1}}$  и  $\varepsilon_{\text{п2}}$  — пороговые значения деформаций  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ , параметры  $\alpha_i > 0$  задают затухания волн в отсутствие механизмов усиления, а  $\Theta(\varepsilon)$  — ступенчатая функция Хевисайда:

$$\Theta(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \text{при } \varepsilon < 0, \\ 1, & \text{при } \varepsilon > 0. \end{cases}$$

Пренебрегая зависимостью  $b_i$  от пространственных координат, берем производные по  $x$  и по  $y$  и представляем систему (8) в виде

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_1 + v_1 \varepsilon'_1 + b_1(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \varepsilon_1 = 0, \\ \dot{\varepsilon}_2 + v_2 \varepsilon'_2 + b_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \varepsilon_2 = 0, \end{cases} \quad (10)$$

где  $\dot{\varepsilon}_{1,2} \equiv \frac{\partial \varepsilon_{1,2}}{\partial t}$ ,  $\varepsilon'_1 = \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial x}$ ,  $\varepsilon'_2 = \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial y}$ .

Поскольку при рассмотрении пороговых деформаций приемлемым считается упругое описание среды, для оценок поперечных размеров  $d_{1,2}$  области возбужденного состояния (в форме параллелепипеда) уместно использовать гармоническое описание для смещений и деформаций:

$$u_1(x, t) = -(u_1)_{\max} \sin(\omega_1 t - k_1 x), \quad \varepsilon_1 = (u_1)_{\max} k_1 \cos(\omega_1 t - k_1 x), \quad (11)$$

$$u_2(y, t) = (u_2)_{\max} \sin(\omega_2 t - k_2 y), \quad \varepsilon_2 = -(u_2)_{\max} k_2 \cos(\omega_2 t - k_2 y), \quad (12)$$

где  $(u_{1,2})_{\max}$  — амплитуды, а  $\omega_{1,2}$  — частоты колебаний, связанные с волновыми числами  $k_{1,2}$  стандартным соотношением  $\omega_{1,2} = v_{1,2}k_{1,2}$ .

Чтобы оценить значения  $d_{1,2}$ , естественно начать с рассмотрения области возбужденного состояния с поперечными размерами, равными  $\lambda_{1,2}/2$ , где  $\lambda_{1,2}$  — длины соответствующих волн, т. е. фактически выделяя прямоугольную ячейку. Из (11), (12) очевидно, что в начальный момент времени ( $t = 0$ ) деформации достигают максимальных по величине значений  $|\varepsilon_{1,2}|_{\max} = (u_{1,2})_{\max}k_{1,2}$  в центре ячейки, выбранном за начало отсчета  $x$  и  $y$  координат. Отметим, что  $\varepsilon_1 = 0$  при  $x = \pm\lambda_1/4$  и  $\varepsilon_2 = 0$  при  $y = \pm\lambda_2/4$ . Следовательно, величины  $d_{1,2}$  удовлетворяют неравенству  $d_{1,2} < \lambda_{1,2}/2$ .

Представляется разумным выбор значений  $d_{1,2}$  близкими к  $\lambda_{1,2}/4$ , при этом, как легко убедиться, на границах такой эффективной ячейки, отстоящих от центра на  $\lambda_{1,2}/8$ , уровень деформации снизится по сравнению с центральной точкой приблизительно на 29 %. При описании деформаций начального возбужденного состояния в области зарождения естественно считать, что пороговая деформация реализуется уже на границах эффективной ячейки, внутри которой выполняются неравенства:  $\varepsilon_1 > \varepsilon_{1\text{th}}$ ,  $|\varepsilon_2| > |\varepsilon_{2\text{th}}|$ . Таким образом, начальные условия для деформации принимают вид

$$(\varepsilon_1)_{\max} \cos(k_1 x) \geq \varepsilon_{1\text{th}} \text{ при } -\frac{\lambda_1}{8} \leq x \leq \frac{\lambda_1}{8}, \quad (13)$$

$$|\varepsilon_2|_{\max} \cos(k_2 y) \geq |\varepsilon_{2\text{th}}| \text{ при } -\frac{\lambda_2}{8} \leq y \leq \frac{\lambda_2}{8}.$$

Легко убедиться, что в области наложения деформаций сжатия и растяжения, для которой следует считать  $b_{1,2}$  равными нулю, из (10) с учетом начальных условий (13) следует

$$\begin{cases} \varepsilon_1(\zeta_1, \zeta_2) = (\varepsilon_1)_{\max} \cos(k_1 \zeta_1) \varphi(\zeta_1, \zeta_2), \\ \varepsilon_2(\zeta_1, \zeta_2) = (\varepsilon_2)_{\max} \cos(k_2 \zeta_2) \varphi(\zeta_1, \zeta_2), \end{cases} \quad (14)$$

где  $\zeta_1 = x - v_1 t$ ,  $\zeta_2 = y - v_2 t$ , а функция

$$\varphi(\zeta_1, \zeta_2) = \left[ \Theta\left(\zeta_1 - \frac{d_1}{2}\right) - \Theta\left(\zeta_1 + \frac{d_1}{2}\right) \right] \left[ \Theta\left(\zeta_2 - \frac{d_2}{2}\right) - \Theta\left(\zeta_2 + \frac{d_2}{2}\right) \right] \quad (15)$$

описывает движение возбужденной области со скоростью  $v = v_1 + v_2$ , в соответствии с картиной, представленной на рис. 1 и рис. 3.

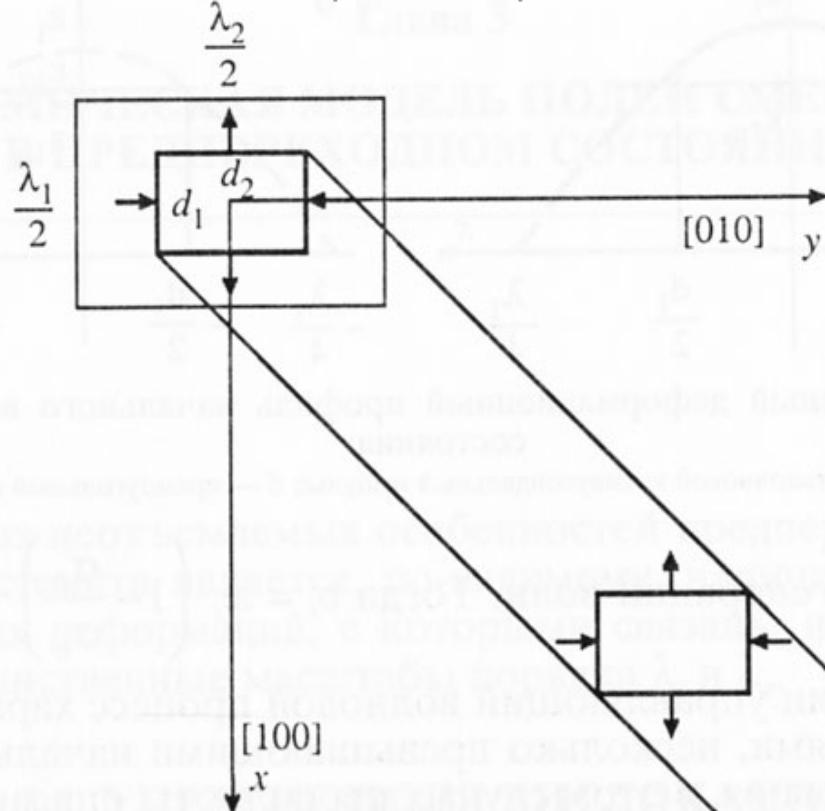


Рис. 3. Формирование пластинообразной области, теряющей устойчивость при распространении пороговой деформации

Сделаем несколько замечаний.

1. Максимального упрощения можно достичь, заменив в (14) множители  $(\varepsilon_{1,2})_{\max} \cos(k_{1,2}\zeta_{1,2})$  на константы  $\varepsilon_{10}$  и  $\varepsilon_{20}$  такие, что  $\varepsilon_{10} > \varepsilon_{n1}$ ,  $|\varepsilon_{20}| > |\varepsilon_{n2}|$ . Такая замена соответствует введению однородных деформаций в ортогональных  $x$ - и  $y$ -направлениях в объеме движущегося возбужденного состояния в форме прямоугольного параллелепипеда. В частности, для  $x$ -направления на рис. 4 этой замене соответствует переход от четвертьволнового косинусоидального деформационного профиля на рис. 4, *a* к прямому угольному профилю на рис. 4, *b*.

2. Выражение для эффективного затухания (9) легко обобщить:

$$b_i(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \alpha_i \left( 1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_n} \Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_{n1}) \Theta(\varepsilon_{n2} - \varepsilon_2) \right),$$

где  $\sigma_0$  и  $\sigma_n$  — значения начальной и пороговой инверсных населенностей (см. [1, 2, 52]). Ясно, что при  $\sigma_0 < \sigma_n$  в области наложения волновых пучков происходит лишь частичная компенсация потерь так, что  $0 < b_i = \alpha_i \left( 1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_n} \right) < \alpha_i$ . При  $\sigma_0 > \sigma_n$  реализу-

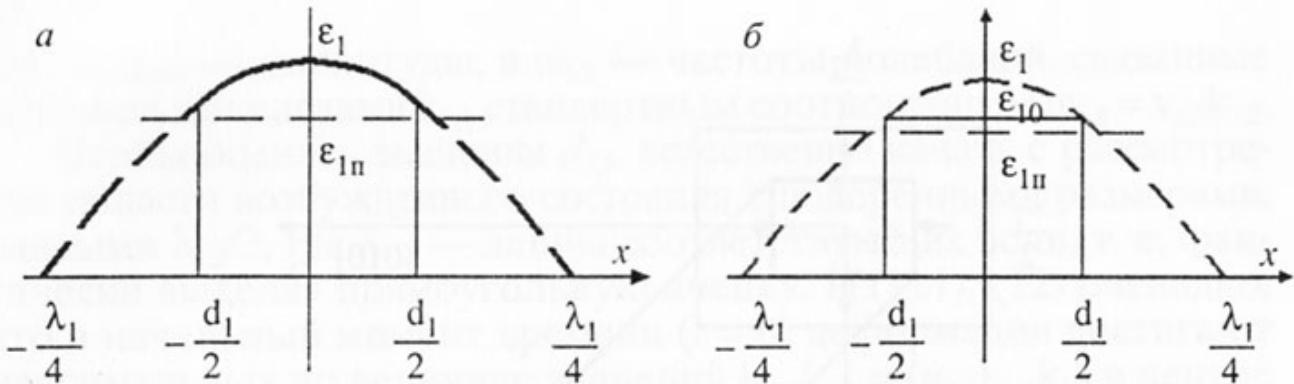


Рис. 4. Одномерный деформационный профиль начального возбужденного состояния:

*a* — четвертьволновой косинусоидальный импульс; *б* — прямоугольный импульс

ется процесс генерации волн. Тогда  $b_i = \alpha_i \left(1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_n}\right) < 0$ , и в ре-

жиме генерации управляющий волновой процесс характеризуется деформациями, несколько превышающими начальные значения. Строго говоря, в этом случае для полноты описания в системе (8) необходимо добавить и нелинейную по  $u_{1,2}$  составляющую, отражающую вклад отрицательных обратных связей, стабилизирующих уровень амплитуд. Рассмотренный случай, очевидно, соответствует равенству  $\sigma_0$  и  $\sigma_n$ .

3. Распространение управляющего волнового процесса должно сопровождаться излучением затухающих волновых пучков в  $x$ - и  $y$ -направлениях, поскольку, согласно (9), вне области наложения волновых пучков, несущих деформацию сжатия—растяжения, параметры  $b_{1,2} = \alpha_{1,2} > 0$ .

4. Следует отметить, что формирование двойниковых мартенситных кристаллов можно рассматривать как согласованное распространение пар длинноволновых и коротковолновых смещений [1, 2, 48, 57, 58], каждая из которых может быть описана уравнениями рассмотренного типа.

5. При записи системы (8) использованы волновые уравнения первого порядка, описывающие распространение управляющего волнового процесса в направлении, принадлежащем одному квадранту ( $x > 0, y > 0$ ). Очевидно, что использование классического волнового уравнения второго порядка приведет к появлению возможности распространения управляющего волнового процесса из начального возбужденного состояния во всех квадрантах. Вырождение может сниматься в условиях действия внешних и внутренних полей (в частности упругих полей дефектов в области зарождения).

**Глава 3****ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЙ  
В ПРЕДПЕРЕХОДНОМ СОСТОЯНИИ**

Одной из неотъемлемых особенностей предпереходного состояния аустенита является, по-видимому, наличие неоднородных упругих деформаций, с которыми связаны интересующие нас пространственные масштабы порядка  $\lambda_l$  и  $\lambda_s$ .

### **3.1. УПРУГИЕ ПОЛЯ ДИСЛОКАЦИЙ И ПРОСТРАНСТВЕННЫЙ МАСШТАБ $\lambda_l$**

Простая оценка порядка величины  $\lambda_l$  сразу вытекает из представлений о зарождении в упругом поле отдельной дислокации [38, 54, 55]. Действительно, как показывают расчеты упругих полей прямолинейных дислокаций, соответствующие главные значения  $\varepsilon_1$  и  $|\varepsilon_2|$  тензора деформации в области зарождения могут не только удовлетворять условию плоской деформации с парой инвариантных (слабоискаженных) плоскостей

$$\varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 < 0, \varepsilon_3 \approx 0, \quad (16)$$

но и принимать близкие к максимальным значения  $\varepsilon_1$  ( $\Theta_0$ ),  $|\varepsilon_2(\Theta_0)|$  (экстремумы отыскиваются 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. Угловая локализация этой области определяется окрестностью  $\Delta\Theta \sim d/r$  вблизи полярного угла  $\Theta_0$ , в которой выполняются условия (16) и изменение удельного объема  $\delta$  имеет определенный знак.

Обсудим теперь вопросы о расстоянии  $r$  от линии дислокации до места локализации начального возбужденного состояния (до

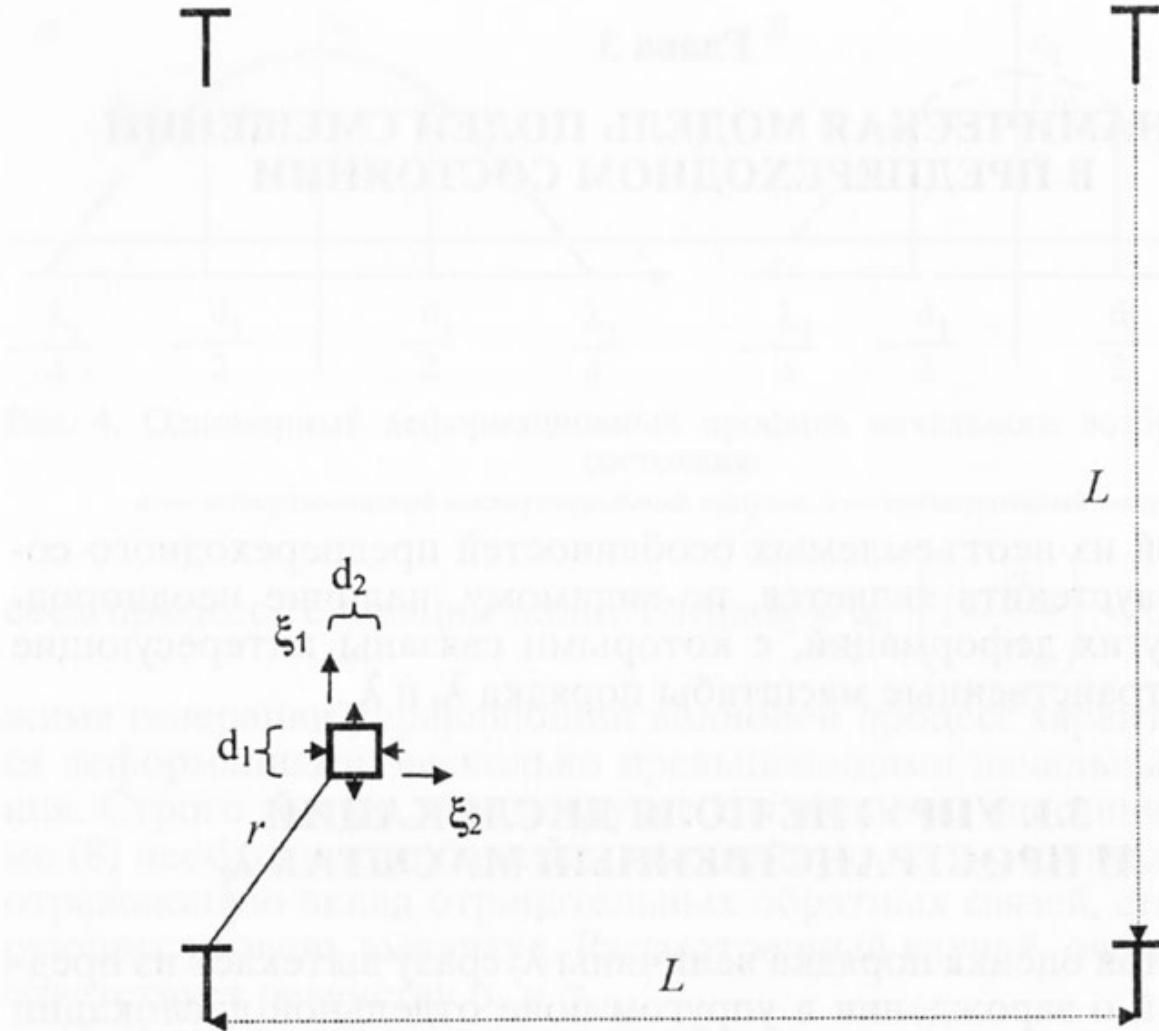


Рис. 5. Область локализации начального возбужденного состояния в упругом поле отдельной дислокации: соотношение масштабов  $L$  и  $r$

оси параллелепипеда на рис. 1), а также о величине  $d$  его поперечного размера (см. рис. 5, 6).

Очевидно, что упругое поле дефекта по сечению параллелепипеда (на масштабе  $d$ ) можно считать приблизительно однородным, если выполняется условие

$$d/r \leq 0,1. \quad (17)$$

Будем считать также, что прямолинейный сегмент отдельной дислокации может играть роль центра зарождения.

Полагая, что среднее расстояние между дислокациями равно  $L$ , влиянием упругих полей других дислокаций можно пренебречь, если

$$r \sim 0,1L. \quad (18)$$

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

$$L \sim 1/\sqrt{\rho}. \quad (19)$$

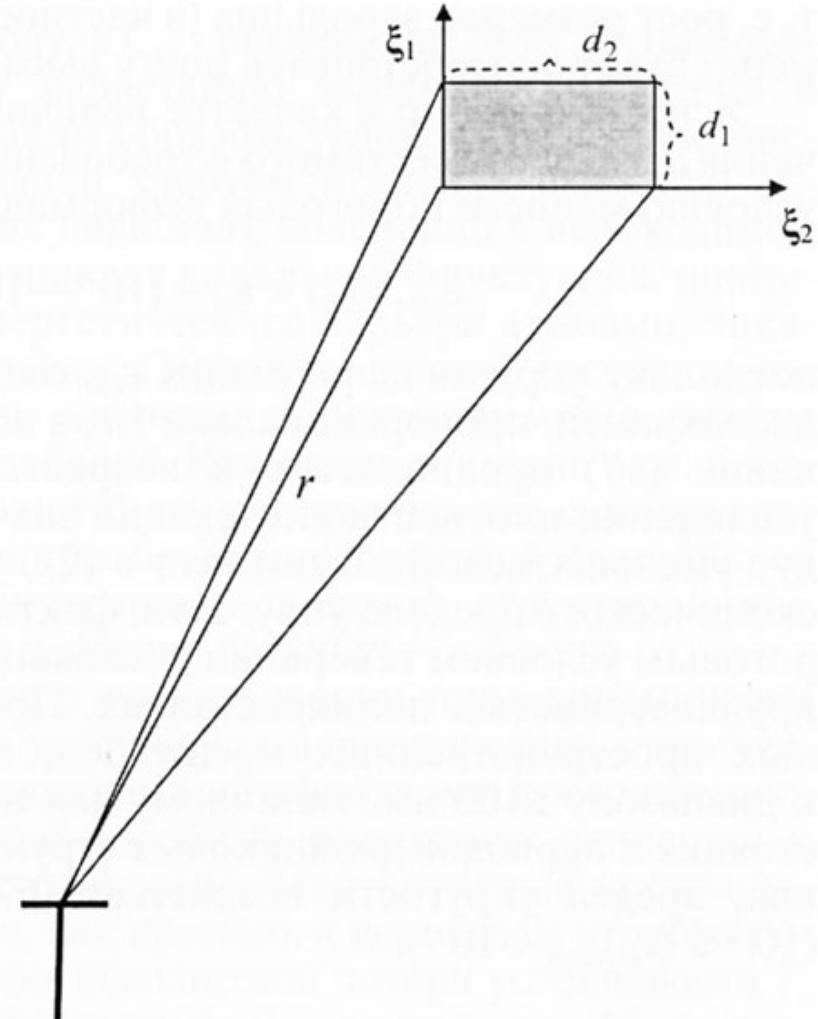
Рис. 6. Область локализации начального возбужденного состояния в упругом поле отдельной дислокации: соотношение масштабов  $r$  и  $d$

Из (17)–(19) ясно, что

$$d \sim 10^{-2} \rho^{-1/2}. \quad (20)$$

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 (20) получаем  $d \sim 1 \text{ мкм}$ . Напомним, что размеры  $d_{1,2}$  порядка половины 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). Подчеркнем, что условию (17) 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 (17). Дело в том, что при переходе первого рода высвобождающаяся энергия тем больше, чем меньше отношение площади поверхности зародыша  $S_N$  к его объему  $V_N$ . Для интересующего нас зародыша в форме прямоугольного параллелепипеда с длинами ребер  $d_1, d_2, l$  получаем

$$S_N/V_N = 2(1/d_1 + 1/d_2 + 1/l), \quad (21)$$



т. е. 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 (17), не противоречит условию малости пороговых деформаций  $\varepsilon_{1,2\text{th}}$ :

$$\varepsilon_{1\text{th}}, |\varepsilon_{2\text{th}}| < \varepsilon_{el} \sim (10^{-4}—10^{-3}) \ll 1, \quad (22)$$

поскольку упругая деформация  $\varepsilon_{ed}$ , создаваемая прямолинейной дислокацией, пропорциональна  $1/r$ , а возрастание  $d_m$  при выполнении (17) предполагает и возрастание  $r$ . Разумеется, при увеличении плотности дислокаций значения  $L(\rho)$ ,  $r(\rho)$  и  $d(\rho)$  будут уменьшаться. Заметим, что в (22) указано значение макроскопического предела упругости, фактически обусловленное пороговым условием генерации дислокаций в монокристаллах или крупнозернистых поликристаллах. При уменьшении характерных пространственных масштабов, например, при переходе к диапазону  $\leq 100$  нм, типичному для нанокристаллического состояния и периодов двойниковых структур двойников превращения, предел упругости возрастает [67] по порядку величины ( $10^{-2} \leq (\varepsilon_{el})_{\text{nano}} < 10^{-1}$ ).

### **3.2. ВОЗМОЖНЫЕ ПРИЧИНЫ ФОРМИРОВАНИЯ УПРУГИХ ПОЛЕЙ, ЗАДАЮЩИХ ПРОСТРАНСТВЕННЫЙ МАШТАБ $\lambda_s$**

Отметим прежде всего, что в пользу выбора (см. гл. 2) динамической ячейки в форме параллелепипеда с ребрами вдоль осей  $\langle 001 \rangle_y$ , способной инициировать излучение волновых пучков в тех же направлениях (а значит, и деформацию Бейна в области формирования основной компоненты двойниковой структуры), свидетельствуют эксперименты [68]. Действительно, в [68] показано, что в достаточно широком температурном интервале, предшествующем началу  $\gamma$ — $\alpha$  мартенситного превращения, среди продольных колебаний с повышенными амплитудами в широком диапазоне волновых векторов фиксируются только смещения вдоль осей  $\langle 001 \rangle_y$ . Это связано с тем, что при  $A > 1$  в направлениях  $\langle 001 \rangle_y$  скорости продольного звука минимальны. Кроме того, в сплавах с составами (например Fe — 31Ni), при которых образуются кристаллы с габитусами  $\{3\ 10\ 15\}_y$ , температуре  $M_s$  предшествует магнитное упорядочение, сопровождающееся

уменьшением упругого модуля  $C_{11}$  примерно на 20 %, что способствует дополнительному нарастанию амплитуд колебаний в  $\langle 001 \rangle_\gamma$  — направлениях. Таким образом, условия для возникновения, по крайней мере, одной требуемой ячейки имеются, поскольку за счет наложения подобных колебаний с необходимой фазировкой смещений возникает локальная флуктуация, инициирующая преодоление энергетического барьера атомами, локализованными в объеме ячейки. Скачок же в новое состояние сопровождается выделением энергии, выражаящимся в резком возрастании амплитуд колебаний. Как будет показано в гл. 4, одной такой ячейки уже может быть достаточно для самоорганизующегося формирования прообраза мартенситной пластины со строгого периодической внутренней слоистой структурой как следствия согласованного действия бегущих  $l$ - и  $s$ -волн.

Обсудим теперь вопрос о существовании термодинамически выгодных метастабильно устойчивых периодических статических смещений, предшествующих мартенситному превращению. Наибольшее число работ о подобных состояниях относится к сплавам с эффектом памяти формы. Мартенситные превращения в таких сплавах близки, как правило, к переходам второго рода, для них существует точка абсолютной потери устойчивости  $T_c < T_0$  ( $T_0$  — температуры равновесия фаз), а температура  $M_s$  удовлетворяет неравенствам:  $T_c < M_s < T_0$ . Следует сразу констатировать, что в предпереходной области (в случае мартенситного превращения с ожидаемой микроскопической однородной деформацией типа деформации Бейна) наблюдались так называемые «твидовые структуры» [35], фактически представляющие собой достаточно регулярные совокупности вытянутых прямоугольных параллелепипедов с ребрами вдоль осей симметрии четвертого порядка и, по-видимому, с чередующимися вариантами деформаций двойникового типа. Исследование условия существования подобных структур на примере двумерной модели для перехода «квадрат—прямоугольник» были проведены в [25] с использованием функционала Гinzбурга—Ландау ( $\phi^6$ -модель по деформациям и квадратичный по градиентам деформаций), дополненного квадратами вторых пространственных производных от деформаций  $(\Delta_x \varepsilon)^2$  и  $(\Delta_y \varepsilon)^2$  и перекрестным вкладом  $H_\alpha$  в полный гамильтониан:

$$H_\alpha = \alpha(\Delta_x \varepsilon)(\Delta_y \varepsilon)/8, \quad (23)$$

где  $\Delta_x$ ,  $\Delta_y$  — символы вторых производных по координатам  $x$  и  $y$  соответственно. Существенно, что градиентная часть гамильтониана

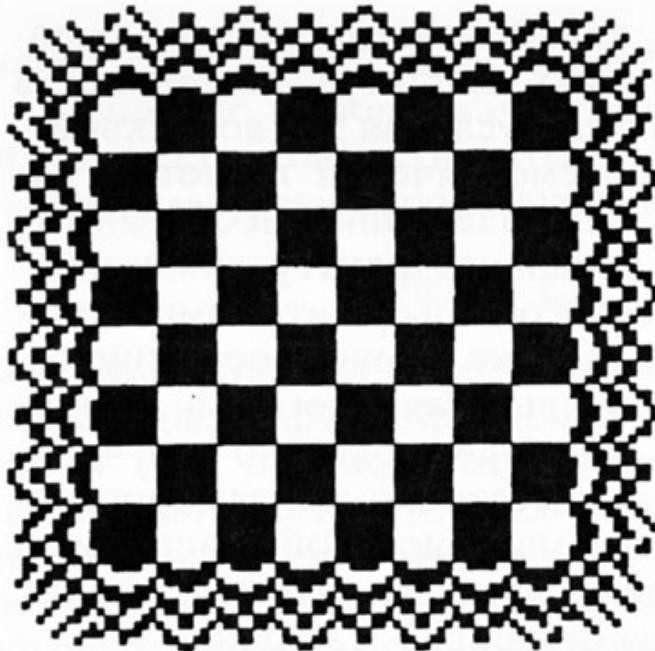


Рис. 7. Упорядоченная структура статических двойниковых смещений (типа «шахматной доски») [25]

ниана, не включающая  $H_\alpha$  (23), дает вклад в энергию, связанную с энергией границ между аустенитом и мартенситом и разными вариантами мартенсита (двойниковые границы), но не благоприятствует пересечениям границ. Напротив,  $H_\alpha$  не дает вклад в энергию протяженных границ, но способствует пересечениям границ. В итоге эти конкурирующие градиентные вклады приводят к формированию структуры типа «шахматной доски» из контактирующих прямоугольных ячеек (близких к квадратным) с чередующимися вариантами искажений решетки (сжатия и растяжения вдоль ортогональных направлений меняются местами). Причем между крупноячеичным «твидом», возникающим в области будущего мартенситного кристалла, и аустенитом возможно образование промежуточной иерархической зоны с убывающим размером ячеек, как это отражено на рис. 7.

Показано, что «твидовая» структура, устойчиво существует выше  $T_0$  и ниже некоторой  $T_{up}$ . Выше  $T_{up}$  устойчив аустенит, а ниже  $T_0$  — двойники. Интересующий нас случай — температуры ниже  $T_0$ , когда статического «твида» нет, а двойники есть. Показательно, однако, что именно твидовая структура предшествует двойникованию. Поэтому имеет смысл обсудить сценарий двойникования на фоне динамически модулированного кристалла с системой синхронно колеблющихся («дышащих») ячеек, способных после преодоления энергетического барьера превращаться в излучатели волновых пучков, наложение которых создает двойники со сверхзвуковой скоростью (см. п. 1). Именно такой постулат и был по существу использован ранее в [57], где формирование двойниковой структуры рассматривалось как следствие роста основных компонент двойника при пробеге  $l$ -волн по решетке с «дышащими ячейками».

На рис. 8 показана использовавшаяся в [57] структура, представленная как суперпозиция пары стоячих волн вдоль ортогональных  $[100]_\gamma$ - и  $[010]_\gamma$ -направлений, образующих в плоскости

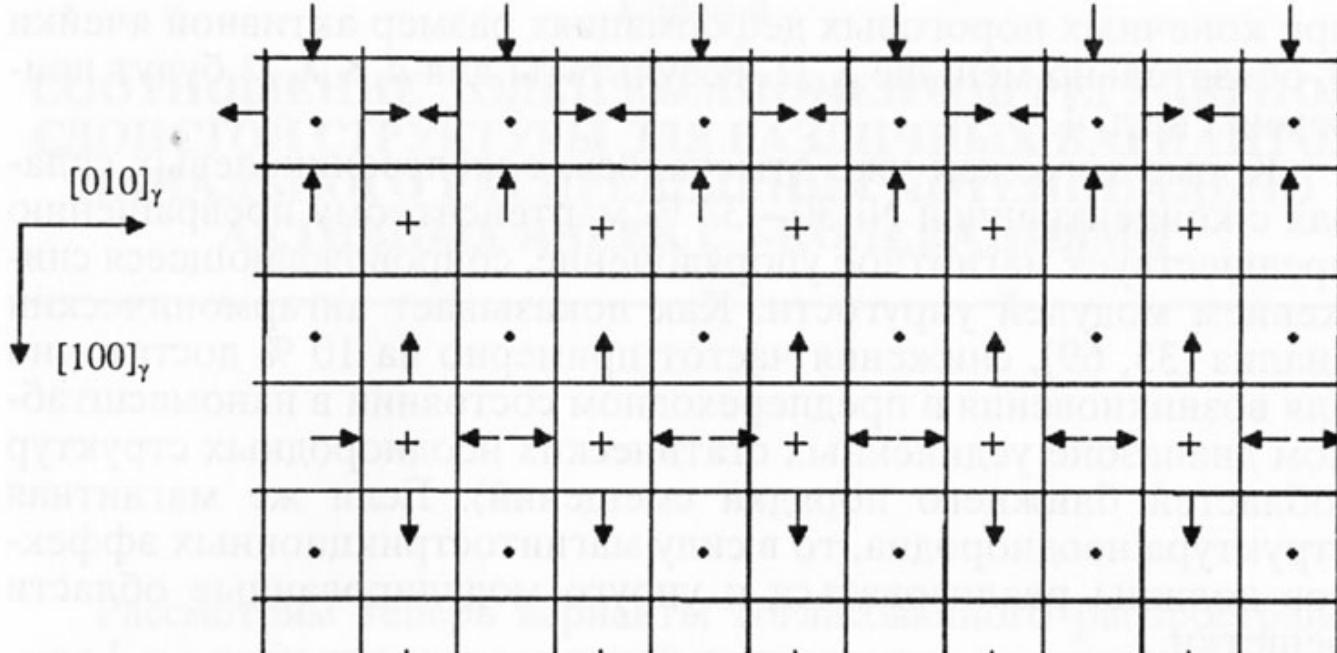


Рис. 8. Пространственное распределение потенциально активных ячеек, возникающих при суперпозиции пары стоячих волн вдоль ортогональных  $[100]_{\gamma}$  и  $[010]_{\gamma}$ -направлений

$(001)_{\gamma}$  квадратные «ячейки» с деформацией типа «сжатие—растяжение» (с точностью до упругих деформаций стороны ячейки равны  $\lambda_s/2$ ). Возникает пространственное распределение ячеек типа «шахматной доски». Показан фиксированный момент времени, когда во всех ячейках, помеченных точками, реализуется сжатие в  $[100]_{\gamma}$ - и растяжение в  $[010]_{\gamma}$ -направлениях, тогда как ячейки, помеченные крестами, имеют противоположные по знаку деформации вдоль осей  $[100]_{\gamma}$  и  $[010]_{\gamma}$ .

Очевидно, что через время, равное половине периода  $s$ -колебаний, точки и кресты меняются местами. Неотмеченные ячейки испытывают либо чистое растяжение, либо чистое сжатие и не могут рассматриваться как потенциально активные для формирования двойниковой структуры с чередованием направлений  $[100]_{\gamma}$  и  $[010]_{\gamma}$  в качестве главных осей сжатия при деформации Бейна.

Следует отметить, что в [57] при анализе соотношений долей основной и двойниковой составляющих в качестве  $s$ -ячеек, теряющих устойчивость, выбирались ячейки с ребром квадратного основания, равным  $\lambda_s/2$ , т. е. ячейки, отмеченные на рис. 8, возбуждались целиком, порождая пластинчатые области с толщиной  $\lambda_s/\sqrt{2}$ . Это приближение, строго говоря, применимо лишь для случая абсолютной потери устойчивости, так как на расстоянии  $\lambda_s/4$  от центра ячейки деформация обращается в нуль, т. е.

при конечных пороговых деформациях размер активной ячейки  $d_s$  обязательно меньше  $\lambda_s/2$ . Результаты для  $d_s \leq \lambda_s/2$  будут приведены в гл. 4.

Кроме того, как уже отмечалось, в железоникелевых сплавах с концентрацией Ni 30—33 % мартенситному превращению предшествует магнитное упорядочение, сопровождающееся снижением модулей упругости. Как показывает ангармонический анализ [35, 69], снижения частот примерно на 10 % достаточно для возникновения в предпереходном состоянии в наномасштабном диапазоне уединенных статических неоднородных структур (областей ближнего порядка смещений). Если же магнитная структура неоднородна, то в силу магнитострикционных эффектов должны реализоваться и упруго модулированные области решетки.

Подчеркнем также: в [25] показано, что в присутствии внешних или внутренних напряжений статическая «твидовая» структура существует и ниже  $T_0$ . Поскольку началу мартенситного превращения предшествует зачастую появление закалочных напряжений и, кроме того, существуют внутренние напряжения, обусловленные дефектами, уместно рассмотреть пробег  $l$ -волн по решетке как с «дышащими», так и с «замороженными» твидовыми ячейками.

Интересно отметить, что структуры распределения напряжений типа «шахматной доски» играют существенную роль при развитии пластической деформации [70].

# СООТНОШЕНИЕ ДОЛЕЙ КОМПОНЕНТОВ РЕГУЛЯРНОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ВАРИАНТОВ НАЧАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНО АКТИВНЫХ ЯЧЕЕК С $s$ -КОЛЕБАНИЯМИ

---

Рассмотрим теперь варианты согласованного распространения  $l$ - и  $s$ -волн для расчета долей компонентов регулярной слоистой структуры на примере мартенситных кристаллов с габитусами  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ , принадлежащих к совокупности  $\{hkl\}_\gamma$ , наблюдаемых габитусов, у которых заметно различаются три индекса Миллера. Согласно литературным данным [3], помимо  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$  к этой совокупности относятся и габитусы, близкие  $\{259\}_\gamma$ ,  $\{3\ 9\ 11\}_\gamma$ ,  $\{157\}_\gamma$ . Выполненные ранее расчеты упругих полей как прямолинейных дислокаций [55], так и дислокационных петель [71] показывают, что в неоднородных упругих полях центров зарождения имеются условия для начала роста мартенситных кристаллов со всеми наблюдаемыми габитусами. Например, дислокационная петля со сторонами  $L_1$  и  $L_2$  вдоль направлений  $[11\bar{2}]_\gamma$  и  $[111]_\gamma$  (и размерами  $L_1 \approx 7000a$ ,  $L_2 \approx 10000a$ ,  $a$  — параметр решетки) при векторе Бюргерса  $b = [01\bar{1}]_\gamma a/2$  создает благоприятные условия для старта быстрого роста кристаллов с габитусами, близкими к  $(3\ 15\ 10)_\gamma$ . Выберем в качестве модельного набора упругие модули (в ТПа)  $C_L = 0.2180$ ,  $C' = 0.0270$ ,  $C_{44}^0 = 0.1120$  (соответствующие, согласно [72], сплаву Fe—31.5%Ni при температуре начала мартенситного превращения  $M_s = 239$  К). Тогда на расстоянии  $r \approx 1200a$  от центра стороны  $L_1$  вдоль луча, составляющего с плоскостью петли угол  $\approx 117.5^\circ$ , условию (1) отвечают направления волновых нормалей  $l$ -волн:

$$\mathbf{n}_{1l} = [0.057158 \ -0.987456 \ 0.147188]_\gamma, \quad (24)$$

$$\mathbf{n}_{2l} = [0.273879 \ 0.157282 \ 0.948816]_\gamma.$$

С помощью уравнения Кристоффеля [65] для нормалей (24) получаем отношение модулей скоростей  $\alpha_l = v_{2l}/v_{1l} \approx 1.08861$ , при

котором из (2) и (24) находим ориентацию нормали к ожидаемому габитусу:

$$\mathbf{N}_{wl} \parallel [0.14318 \ 0.833617 \ 0.533462]_{\gamma}, \quad (25)$$

отличающуюся от  $[3 \ 15 \ 10]_{\gamma}$  на  $1.509^\circ$ . Ясно, что любому из 24 габитусов семейства  $\{3 \ 10 \ 15\}_{\gamma}$  можно сопоставить пары нормалей, получающиеся из (24) перестановками проекций и сменой их знаков. Так, габитусу, близкому к  $(10 \ 3 \ 15)_{\gamma}$ , сопоставляются нормали

$$\mathbf{n}_{1l} = [0.147188 \ 0.057158 \ -0.987456]_{\gamma}, \quad (26)$$

$$\mathbf{n}_{2l} = [0.948816 \ 0.273879 \ 0.157282]_{\gamma}$$

Хотя указанная информация важна при детальной интерпретации (и еще будет использована), для иллюстрации сути применяемого динамического подхода достаточно рассмотреть более симметричные ориентации:

$$\mathbf{n}'_{1l} = [0 \ 0 \ \bar{1}]_{\gamma}, \quad (27)$$

$$\mathbf{n}'_{2l} = [\cos \psi \ \sin \psi \ 0]_{\gamma}$$

где  $\psi$  — угол между  $\mathbf{n}_{2l}$  и осью  $[100]_{\gamma}$  в плоскости  $(001)_{\gamma}$ . Из (2) и (27) следует

$$\mathbf{N}_{wl} \parallel [\cos \psi \ \sin \psi \ \alpha_l]_{\gamma} \quad (28)$$

Если требовать  $\mathbf{N}_{wl} \parallel [10 \ 3 \ 15]_{\gamma}$ , то из (28) получим  $\psi = \arctg(0.3) \approx 16.7^\circ$ ,  $\alpha_l = 1.5 \cos \psi \approx 1.437$ , т. е. описание габитуса возможно, но значение  $\alpha_l$  явно завышено по сравнению с известными значениями  $\alpha_l$  для сплавов Fe—Ni, в которых такие габитусы наблюдаются. Заметим, что проекция нормали  $\mathbf{n}_{2l}$  на плоскость  $(001)_{\gamma}$  незначительно отклоняется от  $\mathbf{n}'_{2l}$ . Поэтому на рассматриваемой в данном разделе процедуре отбора активных ячеек и сопоставлении вычисляемого соотношения компонент регулярной слоистой структуры с реально наблюдаемым значением указанное небольшое отклонение практически не сказывается.

Выбор ориентировок (27) позволяет не учитывать вклад волны вдоль  $\mathbf{n}_{1l}$ , несущей деформацию растяжения, в отбор ячеек по ориентации главной оси сжатия в плоскости  $(001)_{\gamma}$ . Этот отбор осуществляет волна, бегущая вдоль  $\mathbf{n}_{2l}$  и несущая деформацию

сжатия. Поскольку угол  $\psi$  острый, то очевидно, что в качестве основной компоненты регулярной слоистой структуры должны отбираться ячейки с осью сжатия [100]<sub>y</sub> (помеченные на рис. 8 точками). Естественно считать, что локальная потеря устойчивости происходит в ячейках, для которых выполняется пороговое условие

$$|\varepsilon_{[100]}| = |\varepsilon_{2l}| + |\varepsilon_{2s}| \geq |\varepsilon_{2\text{th}}|, \quad (29)$$

где  $\varepsilon_{2l,s}$  — вклады в деформацию сжатия  $\varepsilon_2$  от  $l$ - и  $s$ -волн. Таким образом, задавая значения  $|\varepsilon_{2\text{th}}|$  и отслеживая фазировку деформаций в ячейках, можно провести отбор потенциально активных ячеек и оценить соотношение компонент регулярной слоистой структуры на этапе пороговой деформации в рамках плоской задачи.

#### **4.1. ОТБОР АКТИВНЫХ ЯЧЕЕК ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ $l$ -ВОЛНЫ СЖАТИЯ ПО РЕШЕТКЕ С «ЗАМОРОЖЕННЫМИ» $s$ -ЯЧЕЙКАМИ**

Начнем с простейшего случая, полагая, что решетка промодулирована статическими деформациями, представленными на рис. 8. Видно, что потенциально активные  $s$ -ячейки расположены достаточно плотно, так что при любом направлении  $\vec{n}'_{2l}$  найдутся ячейки в ближней окрестности от центра пучка. Поэтому в рассматриваемом случае нет необходимости накладывать специальные требования на степень однородности деформации вдоль фронта пучка. Тем не менее для анализа более сложных вариантов распределения  $s$ -ячеек будем полагать, что уровень деформации  $\varepsilon_s$  максимальен в центре фронта пучка  $l$ -волны. Поэтому, при прочих равных условиях, целесообразно рассматривать «ячейки», расположенные в ближней окрестности от центра пучка.

В качестве дополнительного упрощения, естественного при гармоническом описании деформации (см. гл. 2), примем, вслед за [57], что потеря устойчивости ячейки происходит в момент, когда центр ячейки (с максимальным значением  $|\varepsilon_{2s}|$ ) пересекается областью максимума деформации сжатия, переносимой  $l$ -вольной. В результате в центре ячейки суммируются максимальные деформации  $|\varepsilon_{2l}|_{\max}$  и  $|\varepsilon_{2s}|_{\max}$ , что обеспечивает наилучшие шансы для выполнения порогового условия (29). Следует иметь в виду, что деформацию сжатия  $\varepsilon_{2l}$ , налагающуюся в момент потери устойчивости  $s$ -ячейки, на масштабе  $d_s$  можно считать однородной и равной  $|\varepsilon_{2l}|_{\max}$ , в силу неравенства  $\lambda_s \ll \lambda_l$ .

При указанном упрощении отбор ячеек, помеченных на рис. 8 точками из окрестности, примыкающей к центру волнового пучка (отстоящей от центра пучка на расстоянии порядка  $\lambda_s/2$ ), проводится тривиальным образом, что иллюстрируется рис. 9.

На рис. 9 фронт  $l$ -пучка представлен в виде утолщенного отрезка, движущегося в направлении  $\mathbf{n}'_{2l}$ , составляющем с осью [100] угол  $\psi$ . Две жирные линии, ортогональные  $\mathbf{n}'_{2l}$ , отстоят друг от друга на расстояние  $d_l < \lambda_s/2$  и указывают мгновенные положения точек, в которых деформация  $\varepsilon_{2l}$  достигает пороговых значений. Деформация  $|\varepsilon_{2l}|$  максимальна в точках, лежащих на пунктирной линии. В общем случае фронт пучка с конечными размерами неоднороден, и наибольшее значение деформации достигается в центральной точке фронта. Однако для простоты фронт считается однородным на масштабе 2D, т. е. пренебрегается отличием деформации  $\varepsilon_{2l}$  от максимального значения в точках, лежащих на штриховой линии и удаленных от центра пучка на расстояния, не превышающие  $D$ , т. е. попадающих (в процессе распространения  $l$ -волны) в полосу шириной 2D между штрихпунктирными линиями на рис. 9, параллельными  $\mathbf{n}'_{2l}$ .

В выбранный на рис. 9 момент времени теряет устойчивость ячейка, отмеченная дискретными значениями координат (0, 0) своей центральной точки, задаваемыми для нумерации ячеек вдоль осей  $[100]_y$  и  $[010]_y$  с шагом  $\lambda_s/2$ . Полагая  $D \approx \lambda_s/2$ , рассмотрим  $s$ -ячейки, помеченные точками, центры которых удалены от прямолинейной траектории центра волнового пучка не далее чем на  $\lambda_s/2$ . На рис. 9 этому требованию соответствует значительное сужение полосы, ограниченной штрихпунктирными линиями.

Легко убедиться, что для ориентировки  $\mathbf{n}'_{2l}$  из (27) отбор ячеек, удовлетворяющих такому требованию, приводит к строго периодической системе чередующихся областей, разделенных плоскими границами  $(110)_y$  (важный вопрос о предпочтительном выборе ориентировки  $(110)_y$  по сравнению с  $(\bar{1}\bar{1}0)_y$  обсуждается ниже в п. 4.3). Отождествим области, содержащие отобранные (потенциально активные) ячейки с размером  $d_s < \lambda_s/2$ , с основной компонентой слоистой структуры, а прослойки между такими областями — с дополнительной компонентой. Тогда для отношения  $\beta$  долей компонент (основной к дополнительной) получаем

$$\beta(d_s) = 2 d_s / (\lambda_s - 2d_s), \quad 1 \leq \beta(d_s) < \infty. \quad (30)$$

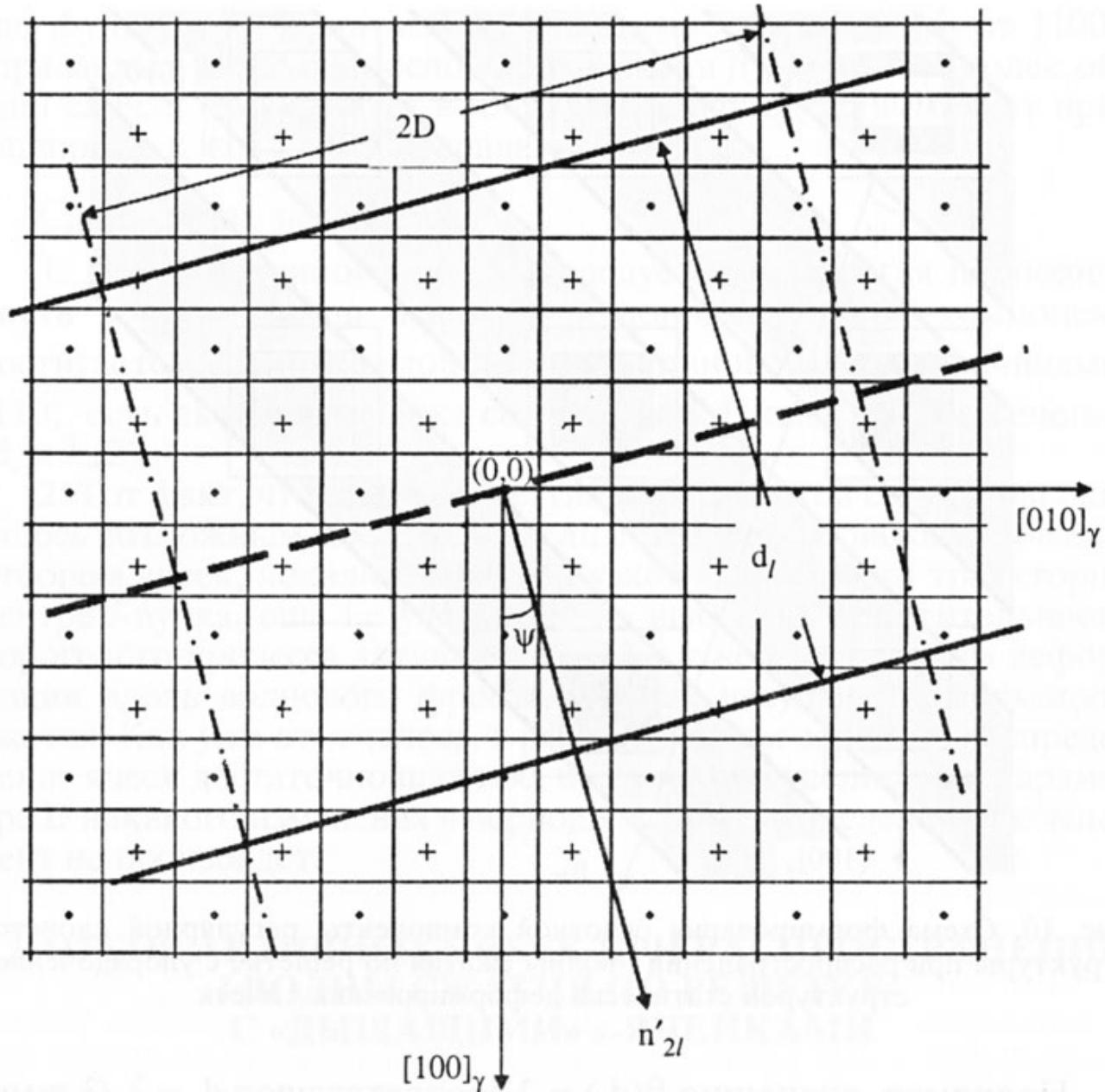


Рис. 9. Потенциально активные статически деформированные ячейки (отмечены точками) в окрестности, прилегающей к траектории центра волнового пучка, несущего деформацию сжатия. Фиксированному моменту времени отвечает процесс активации (0,0)-ячейки

Из (30) очевидно, что в предельном случае максимально возможных размеров  $d_s \rightarrow \lambda_s/2$ , когда  $|\varepsilon_{2\text{th}}| \rightarrow 0$ , значение  $\beta(d_s) \rightarrow \infty$ , т. е. основные компоненты смыкаются и дополнительная компонента исчезает.

Нижняя граница значений  $d_{s\min} = \lambda_s/4$  следует из условия  $\beta(d_{s\min}) = 1$  (по определению, основная доля не должна быть меньше дополнительной). При этом из (11) и (12) следует, что на границах ячейки модуль статической деформации снижается в  $\sqrt{2}$  раз по сравнению с  $|\varepsilon_{2s}|_{\max}$ , т. е.  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)| = |\varepsilon_{2s}|_{\max}/\sqrt{2}$ .

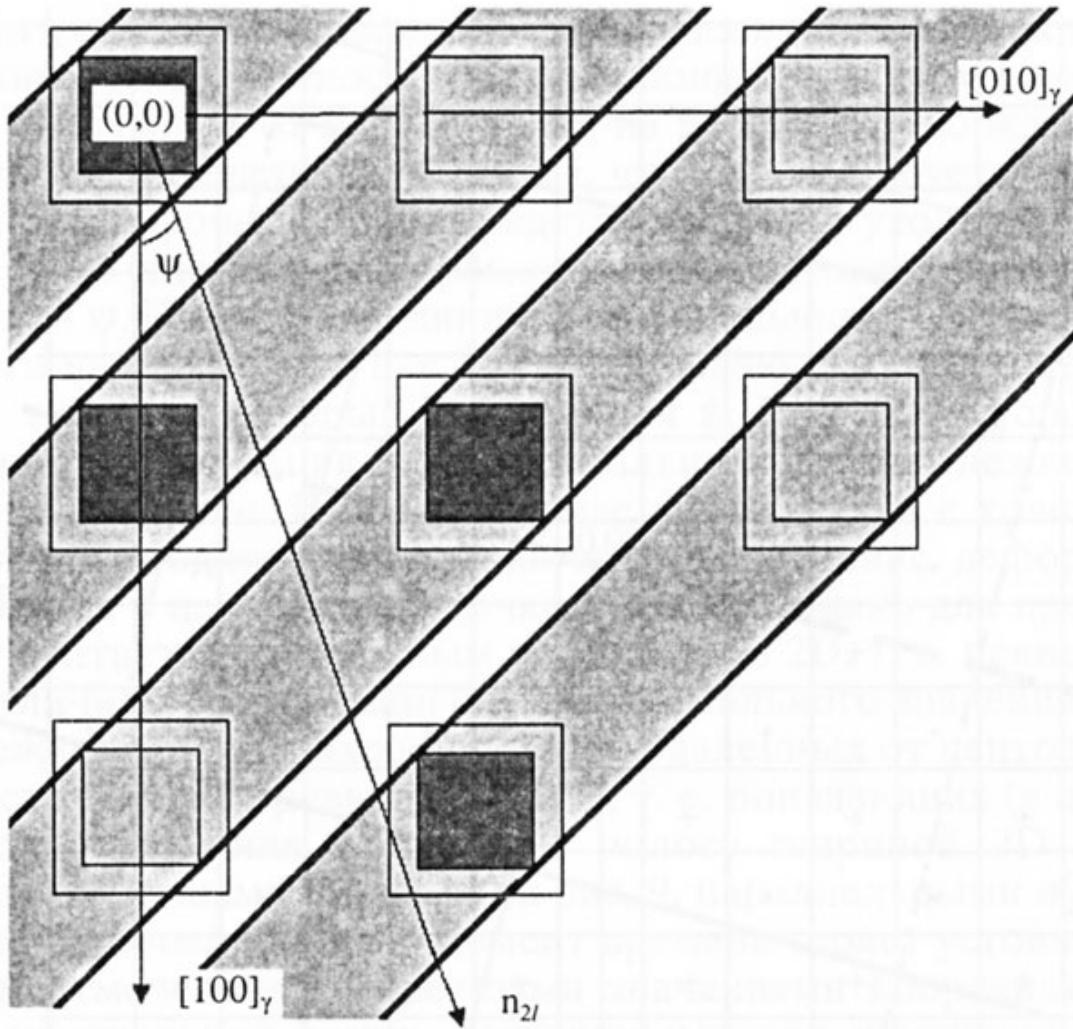


Рис. 10. Схема формирования основной компоненты регулярной слоистой структуры при распространении  $l$ -волны сжатия по решетке с упорядоченной структурой статически деформированных ячеек

Например, значению  $\beta(d_s) = 2$  соответствуют  $d_s = \lambda_s/3$  и модуль начальной статической деформации на границе ячейки  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)| = |\varepsilon_{2s}|_{\max}/2$ . Этот случай иллюстрируется на рис. 10. Ближайшие к линии  $n_{2l}$  активирующиеся  $l$ -вольной сжатия  $s$ -ячейки затемнены, соответственно серым фоном выделены полосы основной компоненты регулярной слоистой структуры, а промежуточные светлые полосы сопоставляются с дополнительными компонентами.

Напомним, что деформацию сжатия  $\varepsilon_{2l}$ , налагающуюся в момент потери устойчивости  $s$ -ячейки, на масштабе  $d_s$  можно считать однородной и равной  $|\varepsilon_{2l}|_{\max}$ , в силу неравенства  $\lambda_s \ll \lambda_l$ . Так что на границе ячейки деформация в направлении  $[100]_\gamma$  задается значением

$$|\varepsilon_2(d_s/2)| = |\varepsilon_{2l}|_{\max} f(\psi) + |\varepsilon_{2s}(d_s/2)|, \quad (31)$$

где функция  $f(\psi)$  учитывает отклонение нормали  $\mathbf{n}'_{2l}$  от [100] $_\gamma$  (при малых  $\psi$  для одноосной деформации  $f(\psi) \approx \cos^2 \psi$ , более общий случай обсуждается в п. 5.3). Именно  $|\varepsilon_2(d_s/2)|$  следует приравнивать к  $|\varepsilon_{[100]}|$  в (29) и сравнивать с  $|\varepsilon_{2\text{th}}|$ .

Сделаем два замечания.

1. Из проведенного анализа следует, что строгая периодичность в чередовании основной и дополнительной компонент достигается, если в каждой полосе шириной  $\lambda_s/\sqrt{2}$  с границами (110) $_\gamma$  есть активная ячейка со стороной  $d_s$  квадратного сечения ( $d_s < \lambda_s/2$ ).

2. Тот факт, что описание регулярной слоистой структуры оказалось возможным связать в модели статических твидовых ячеек с отбором ячеек, локализованных в узкой окрестности траектории центра  $l$ -пучка, еще не указывает на высокую чувствительность порогового процесса активации  $s$ -ячеек к неоднородности деформации вдоль волнового фронта  $l$ -пучка, несущего деформацию сжатия. Как уже отмечалось, в рассмотренном варианте распределение ячеек достаточно плотное, поэтому при увеличении параметра D никакого изменения в периодическом распределении компонент не произойдет.

## 4.2. ОТБОР АКТИВНЫХ ЯЧЕЕК ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ $l$ -ВОЛНЫ СЖАТИЯ ПО РЕШЕТКЕ С «ДЫШАЩИМИ» $s$ -ЯЧЕЙКАМИ

Напротив, активация  $s$ -ячеек при распространении  $l$ -пучка по решетке с «дышащими» ячейками, как показывает анализ [57, 73], существенно зависит от параметра D. Допустим, как и ранее в [57, 73], что для активации (0,0) ячейки в начальный момент времени  $t = 0$  существует оптимальное наложение деформаций, т. е. деформация в центре ячейки задается суммой  $|\varepsilon_{2l}|_{\max} + |\varepsilon_{2s}|_{\max}$ . Тогда легко рассчитать разность фаз  $\Delta\phi_{ij}$  между фазами  $s$ -колебаний в нулевой ячейке при  $t = 0$  и в ячейке с произвольным номером  $(i,j)$  в момент времени  $t_{ij}$ , соответствующий наименьшему расстоянию между центром  $(i, j)$ -ячейки и движущегося центра  $l$ -пучка с максимальной деформацией:

$$\Delta\phi_{ij} = \frac{\pi(i + j \operatorname{tg} \psi)}{\alpha \sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \psi}}, \quad (32)$$

где  $\alpha = v_{2l}/v_{2s}$ . Не накладывая ограничения на величину  $D$ , в каждой из полос шириной  $\lambda_s/\sqrt{2}$  с границами  $(110)_\gamma$  можно указать  $(i, j)$ -ячейку, для которой  $\Delta\phi_{ij}$  с заданной точностью оказывается близкой к числу, кратному  $2\pi$ , и, следовательно,  $\cos \Delta\phi_{ij} \approx 1$ . Внутри одной и той же полосы индексы ячеек связаны соотношением

$$j = 2m - i, m = 0, 1, 2, \dots, \quad (33)$$

где  $m$  нумерует полосы начиная от  $m = 0$ , для полосы, содержащей  $(0,0)$  ячейку, принятую за отсчетную (из (32) для  $(0,0)$  ячейки имеем  $\Delta\phi_{00} = 0$ ).

Сказанное иллюстрирует табл. 1, где приведены данные об активных ячейках в первых шести полосах для случая  $\operatorname{tg}\psi = 0.3$  и  $\alpha = 1.1$  при выполнении условия  $0.997 < \cos \Delta\phi_{ij}$ . Значения  $D_{ij}$  равны кратчайшим расстояниям от центров  $(i, j)$ -ячеек до прямолинейной траектории центральной точки фронта  $l$ -пучка (в табл. 1  $D_{ij}$  даны в единицах  $\lambda_s/2$ ):

$$D_{ij} = \frac{|j - i \operatorname{tg}\psi|}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \psi}} \frac{\lambda_s}{2}. \quad (34)$$

Как следует из табл. 1, для однородного фронта  $l$ -пучка с размерами  $D \gg \lambda_s$ , бегущего по решетке с пространственно упорядоченными «дышащими» ячейками, существуют активные ячейки, приводящие практически к тем же стартовым условиям, что и в случае инициации периодически расположенных статических ячеек и, соответственно, к аналогичной периодической тонкой слоистой структуре.

Заметим, что  $\Delta\phi_{ij}$  пропорциональны  $t_{ij}$ . Тогда из данных для  $\Delta\phi_{ij}$  видно, что упорядоченному (по нарастанию) набору значений моментов времени начала формирования шести полос соответствует набор значений номеров полос ( $m = 0, 3, 1, 4, 2, 5$ ), не совпадающий с последовательностью их нумерации в пространстве (например, вслед за началом формирования отсчетной 0-полосы стартует рост не прилегающей к ней полосы 1 и даже не полосы 2, а сразу 3). Тот факт, что стартовые ячейки могут быть в момент активации локализованы на значительных расстояниях от центра  $l$ -пучка, не обязательно играет критическую роль при описании основной компоненты слоистой структуры, если

**Информация об активных  $s$ -ячейках в модели  $l$ -пучка, бегущего по решетке с упорядоченными «дышащими» ячейками**

$m$	0	1	2	3	4	5
$(i, j)$	(0,0)	(9,-7)	(18,-14)	(4,2)	(13,-5)	(22,-12)
$\Delta\phi_{ij}$	0	$6.0082\pi$	$12.0164\pi$	$4.0055\pi$	$10.0136\pi$	$16.0218\pi$
$\cos \Delta\phi_{ij}$	1	0.9997	0.9987	0.9998	0.9991	0.9976
$D_{ij}$	0	9.29	18.58	0.77	8.52	17.82

Примечание.  $m$ -номер полосы основной компоненты регулярной слоистой структуры;  $(i, j)$  — координаты  $s$ -ячейки;  $\Delta\phi_{ij}$  — сдвиг фаз  $s$ -колебаний в  $(i, j)$ -ячейке относительно (0,0)-ячейки;  $D_{ij}$  — ближайшее расстояние (в единицах  $\lambda_s/2$ ) центра  $(i, j)$ -ячейки от траектории центра  $l$ -пучка.

полагать, что при  $D$  порядка ширины мартенситного кристалла условие  $D > \lambda_s$  должно выполняться с запасом. Тем не менее, если допустить, что в действительности при динамической реализации регулярной слоистой структуры (и, в частности, двойниковой структуры) согласованно востребуются все имеющиеся возможности для локального выполнения пороговых условий (чувствительных, в том числе, и к неоднородности деформации вдоль волнового фронта  $l$ -пучка), основную роль должен играть механизм, позволяющий воспроизводить активную ячейку непосредственно в центральной области фронта  $l$ -пучка. Назовем этот случай вариантом «тонкой настройки» пороговых условий.

Уязвимыми для критики представляются и использованные выше допущения о существовании упорядоченных структур «твидового» типа на больших пространственных, а для варианта «дышащих» ячеек, дополнительно, и временных масштабах. Подобное рассмотрение, по-видимому, еще можно оправдать для переходов первого рода, близких к переходам второго рода с долгоживущими флуктуациями параметров порядка при подходе к температуре  $M_s$  в окрестности точки  $T_c$  абсолютной потери устойчивости решетки. Для ярко выраженных переходов первого рода предположение об упорядоченной в пространстве структуре упругих модуляций «твидового» типа, обладающей долгоживущими сравнительно коротковолновыми «дышащими» ячейками, представляется искусственным из-за больших значений затухания для коротковолновых фононов. Поэтому в п. 4.4 будет рассмотрен вариант формирования основной компоненты регулярной слоистой структуры, свободный от допущения о долгоживущей структуре упорядоченных смещений в объеме кристаллического образца.

### 4.3. СНЯТИЕ ВЫРОЖДЕНИЯ ПО ОРИЕНТАЦИЯМ ГРАНИЦ РЕГУЛЯРНОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ, ВКЛЮЧАЯ ДВОЙНИКОВУЮ СТРУКТУРУ, ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ *l*-ВОЛНЫ СЖАТИЯ

Полезно прояснить, каким образом *l*-волна, несущая деформацию сжатия, осуществляет отбор в пользу одной из двух возможных ориентаций  $(110)_\gamma$  и  $(\bar{1}\bar{1}0)_\gamma$  границ раздела слоистой структуры. Действительно, от отдельной колеблющейся ячейки должны распространяться волновые пучки со скоростями  $v_s \parallel \pm \sqrt{[100]_\gamma}$  и  $v_s \parallel \pm \sqrt{[010]_\gamma}$ . Считаем, как и в гл. 1, что сжатие несет пучок, бегущий вдоль  $[100]_\gamma$ , а растяжение — пучок, бегущий вдоль  $[010]_\gamma$  или вдоль  $[\bar{1}00]_\gamma$ . При конечных деформациях в стесненных условиях, как отмечено в [59, 62, 64], имеет место поворот превращающейся решетки, связанный (вполне определенно) с направлениями распространения управляющих волн и характером переносимой ими деформации (сжатие—растяжение в ортогональных направлениях). Из сравнения вариантов *a* и *b* на рис. 11 очевидно, что при переходе от пар направлений  $\mathbf{n}_{2s} = [100]_\gamma$  и  $\mathbf{n}_{1s} = [010]_\gamma \rightarrow (\mathbf{N}_{ws} \parallel [\bar{1}\bar{1}0]_\gamma)$  к  $\mathbf{n}'_{2s} = \mathbf{n}_{2s} = [100]_\gamma$  и  $\mathbf{n}'_{1s} = -\mathbf{n}_{1s} = -[010]_\gamma \rightarrow (\mathbf{N}_{ws} \parallel [110]_\gamma)$  ориентация оси поворота  $\mathbf{n}_s$  (коллинеарная  $[001]_\gamma$ ) меняется на противоположную.

В обоих случаях  $\mathbf{n}_s$  задается векторным произведением нормалей:

$$\mathbf{n}_s = [\mathbf{n}_{2s}, \mathbf{n}_{1s}]_\gamma. \quad (35)$$

Отсюда понятно, что при учете поворота решетки должен выигрывать тот вариант, при котором в ходе поворота растет величина проекции оси бейновского сжатия на направление  $\mathbf{n}_{2s}$  сжатия в *l*-пучке, поскольку при этом будет реализоваться положительная обратная связь для развития процесса сжатия решетки. В анализируемом примере такое возрастание проекции на  $\mathbf{n}_{2s}$  поворачивающейся оси  $\mathbf{n}_{2s}$  (принимающей ориентацию  $[100]'_\gamma$ ) имеется в случае *a*, т. е. при  $\mathbf{N}_{ws} \parallel [110]_\gamma$ . Напротив, если в ходе поворота величина проекции оси  $\mathbf{n}_{2s}$  на  $\mathbf{n}_{2s}$  убывает, то для развития процесса сжатия решетки реализуется отрицательная обратная связь. Значит, ориентировка  $\mathbf{N}_{ws} \parallel [\bar{1}\bar{1}0]_\gamma$  (случай *b*) нормали к границе раздела регулярной слоистой структуры, включая двойниковую структуру, подавляется, тогда как ориентировка  $\mathbf{N}_{ws} \parallel [110]_\gamma$  активируется. Таким образом, происходит снятие имевшегося двухкратного вырождения по воз-

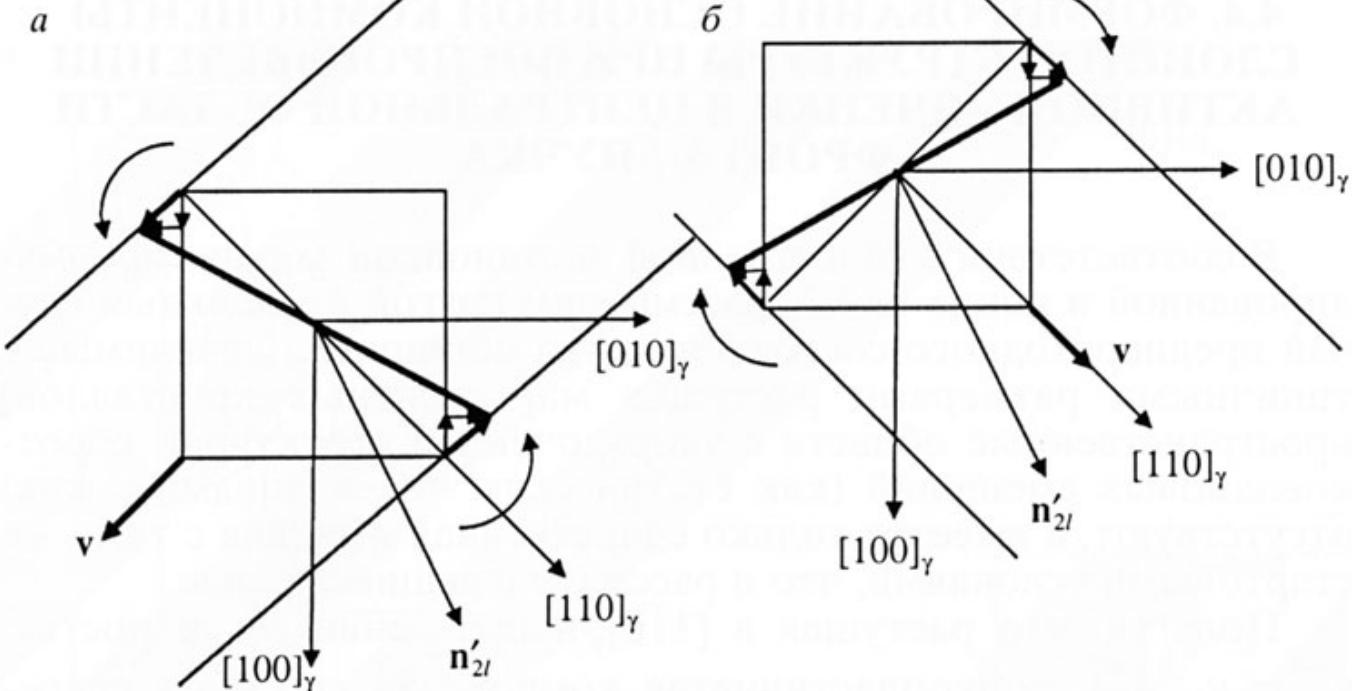


Рис. 11. Различие направлений разворотов решетки при разных ориентациях границ компонент регулярной слоистой структуры, сопровождающихся изменением угла между осью  $[100]_{\gamma}'$  и  $n'_{2l}$ : уменьшение в случае *a* и увеличение в случае *b*

мозговым ориентациям границ раздела регулярной слоистой структуры, включая двойниковую структуру. Очевидно, что при ориентации  $n_{2l}$  строго вдоль  $n_{2s} = [100]_{\gamma}$  (исходного направления оси бейновского сжатия)  $l$ -пучок не снимает вырождение в ориентации границ.

Итак, в силу запрета, обусловленного обратной связью, области наложения пучков, распространяющиеся в  $[110]_{\gamma}$ -направлении, перпендикулярном к направлению роста  $[110]_{\gamma}$ , основной компоненты регулярной слоистой структуры, формирующиеся при активации  $l$ -пучком стартовой ячейки, не могут инициировать формирование слоистой структуры с границами  $(1\bar{1}0)_{\gamma}$ . Однако существует интереснейшая возможность: в ходе роста основной компоненты излучение  $s$ -волновых пучков и их суперпозиция в  $[110]_{\gamma}$ -направлении обязательно приведет к наложению  $s$ -пучков на область  $l$ -пучка с максимальным значением деформации (таким же, как и в стартовой  $(0,0)$  ячейке). Тогда следует ожидать возникновения новой стартовой ячейки для роста основной компоненты регулярной слоистой структуры с ориентацией границы  $(110)_{\gamma}$ . Следовательно, появившись один раз, активная коротковолновая ячейка способна периодически возрождаться в межфазной области, теряющей устойчивость при распространении управляющего волнового процесса, обеспечивая самоорганизацию формирования основной компоненты регулярной слоистой структуры.

#### **4.4. ФОРМИРОВАНИЕ ОСНОВНОЙ КОМПОНЕНТЫ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ВОСПРОИЗВЕДЕНИИ АКТИВНОЙ $s$ -ЯЧЕЙКИ В ЦЕНТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ФРОНТА $l$ -ПУЧКА**

В соответствии с качественной постановкой задачи, сформулированной в конце п. 4.3, рассмотрим другой предельный случай предпереходного состояния, когда обширные (сравнимые с типичными размерами растущих мартенситных кристаллов) пространственные области с упорядоченной структурой коротковолновых смещений (как статических, так и динамических) отсутствуют, а имеется только единственная  $s$ -ячейка с теми же стартовыми условиями, что и рассматривавшиеся ранее.

Полагая, что растущая в  $[1\bar{1}0]_{\gamma}$ -направлении со скоростью  $v_{tw} = v_{1,2s} \sqrt{2}$  тонкопластинчатая компонента способна непрерывно излучать суперпозиционные волновые пучки в  $[110]_{\gamma}$ -направлении (подобно тому, как это постулируется в принципе Гюйгенса), легко получить условие воспроизведения активной коротковолновой ячейки в оптимальной для реализации пороговых условий области внутри волнового фронта управляющего волнового процесса. А именно, центр коротковолновой ячейки совмещается с центральной точкой фронта управляющего волнового процесса при соотношении фаз коротковолновых и длинноволновых колебаний, соответствующих максимумам требуемых деформаций расстояния и сжатия. Для этого достаточно потребовать равенства, с одной стороны, времени прохождения со скоростью  $v_l$  длинноволновой компонентой управляющего волнового процесса (несущей деформацию сжатия) расстояния, проекция которого на плоскость  $(001)_{\gamma}$  совпадает с гипотенузой прямоугольного треугольника, и, с другой стороны, времени прохождения двух катетов этого треугольника распространяющимися коротковолновыми пучками со скоростью  $v_{tw} = v_{1,2s} \sqrt{2}$ .

Сохраним принятое в (25) обозначение  $\psi$  для угла между проекцией вектора скорости  $v_{2l}$  компоненты управляющего волнового процесса, несущей деформацию сжатия, на плоскость  $(001)_{\gamma}$ . Тогда условие воспроизведения наилучших условий для активизации коротковолновой ячейки в области волнового фронта управляющего волнового процесса имеет простой вид

$$v_{1s} = v'_{2l}(\psi) \cos(\psi), \quad (36)$$

где  $v'_{2l}(\psi)$  является проекцией скорости  $v_{2l}$  на плоскость  $(001)_{\gamma}$ .

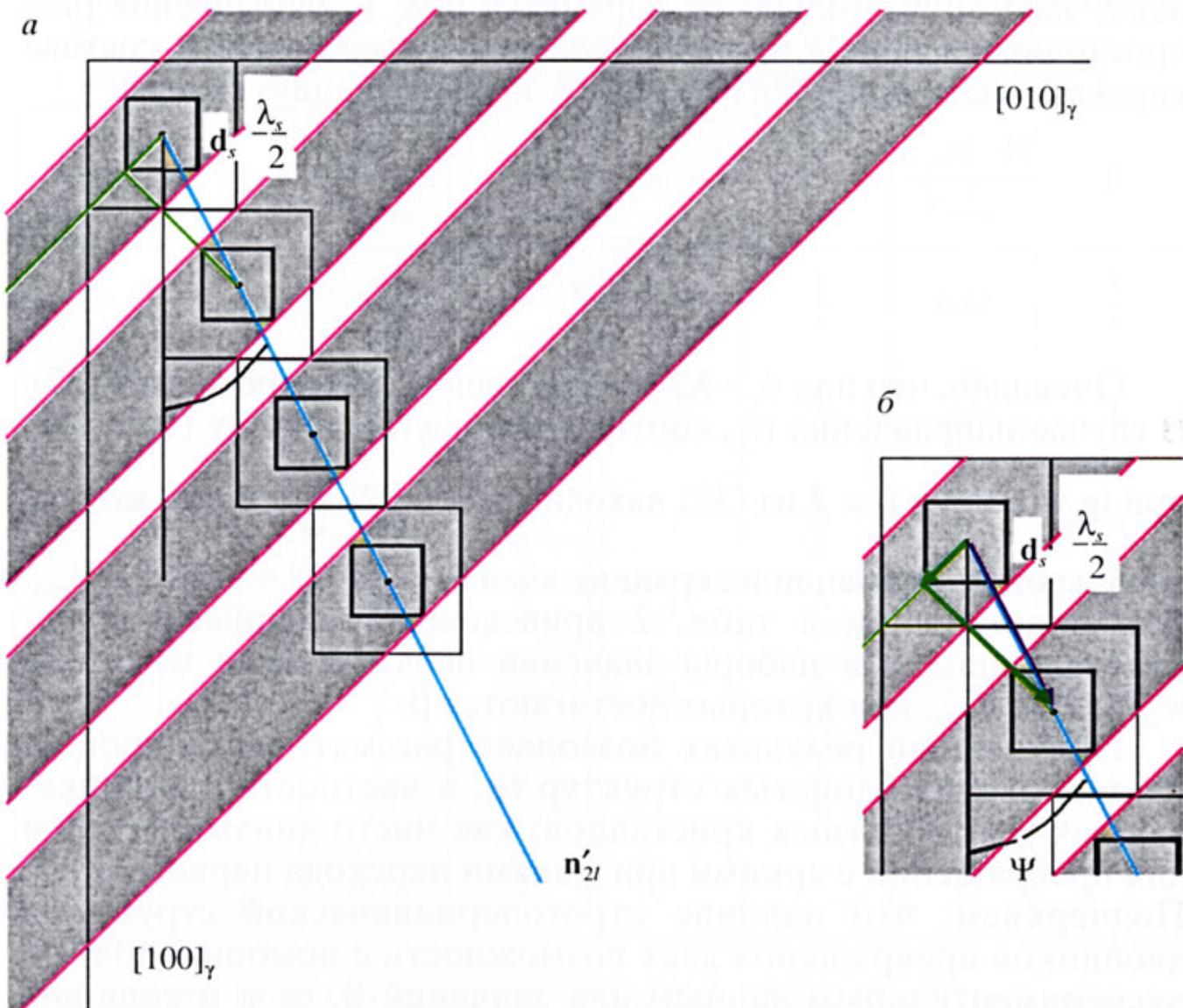


Рис. 12. Динамическая модель формирования регулярной слоистой структуры

Значения  $v_{2l}$  при известных упругих модулях материала находятся из уравнений Кристоффеля [65]. На рис. 12, *а* для иллюстрации показано распределение основных (закрашенные области) и дополнительных (незакрашенные области) компонент возникающей структуры, при  $d_s = \lambda_s/4$  и  $\psi = 26,6^\circ$ . На рис. 12, *б* увеличен фрагмент рис. 12, *а*, демонстрирующий описанное выше условие воспроизведения активной коротковолновой ячейки. Характерный признак структуры — строгая периодичность распределения компонент (в рассмотренном примере отношение объемов компонент  $\beta = 2$ ). Легко убедиться, что при  $d_s = \lambda_s/4$  и  $0 \leq \psi \leq \pi/4$  параметр

$$\beta = \operatorname{ctg} \psi. \quad (37)$$

В общем случае возникающая строго периодическая слоистая структура характеризуется соотношением объемов компо-

нент, зависящим только от параметра  $d_s/\lambda_s$  и направления распространения волны, отвечающей на мезомасштабе в составе управляющего волнового процесса за деформацию сжатия:

$$\beta = \frac{4 \frac{d_s}{\lambda_s}}{1 + \operatorname{tg} \psi - 4 \frac{d_s}{\lambda_s}}. \quad (38)$$

Очевидно, что при  $d_s = \lambda_s/4$  соотношение (38) переходит в (37). В случае направления  $\mathbf{n}'_{2l}$ , соответствующего габитусу (10 3 15)<sub>y</sub>, при  $\operatorname{tg} \psi = 0.3$  и  $\beta = 2$  из (38) находим  $d_s \approx 0.87 \frac{\lambda_s}{4}$ . Тогда модуль

начальной деформации на границе ячейки  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)| \approx 0.7755 |\varepsilon_{2s}|_{\max}$ . Для иллюстрации в табл. 2 приведены «реперные» значения величины  $\beta$  и наборы значений параметров  $\operatorname{tg} \psi$ ,  $d_s/\lambda_s$  и  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)|/|\varepsilon_{2s}|_{\max}$ , при которых достигаются  $\beta$ .

Полученный результат позволяет рассматривать процесс формирования слоистых структур (и, в частности, двойниковых мартенситных кристаллов) как чисто динамический и для превращений с яркими признаками перехода первого рода. Подчеркнем, что наличие строгопериодической структуры двойников превращения дает возможность с помощью (38) по экспериментальным данным для значений  $\beta$ ,  $\operatorname{tg} \psi$  и толщине основной компоненты двойника (равной  $d_s \sqrt{2}$ ) определить длину волны  $\lambda_s$ :

$$\lambda_s = \frac{4d_s(1+\beta)}{(1+\operatorname{tg} \psi)\beta} = \frac{2\sqrt{2}(d_s\sqrt{2})(1+\beta)}{(1+\operatorname{tg} \psi)\beta}. \quad (39)$$

Так, при типичной толщине  $d_s \sqrt{2} = 10^{-8}$  м,  $\beta = 3/2$  и  $\operatorname{tg} \psi = 0.3$  из (39) получаем  $\lambda_s \approx 3.626 \cdot 10^{-8}$  м, т. е. толщина  $d_s \sqrt{2} \approx 0.2758 \lambda_s$ , размер исходной  $s$ -ячейки  $d_s \approx 0.195 \lambda_s$ , а  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)| \approx 0.81815 |\varepsilon_{2s}|_{\max}$ .

Следует отметить, что периодическое восстановление активной  $s$ -ячейки в центральной области фронта  $l$ -пучка обеспечивает старт роста каждой новой тонкопластинчатой компоненты от центра к краям мартенситного кристалла, при этом, естественно, последовательности нумерации полос и моментов времени

**Наборы значений параметров  $\operatorname{tg} \psi$ ,  $d_s/\lambda_s$  и  $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)|/|\varepsilon_{2s}|_{\max}$ ,  
задающие «реперные» значения  $\beta$**

$\operatorname{tg} \psi$	$\frac{d_s}{\lambda_s}$	$\frac{ \varepsilon_{2s}(d_s/2) }{ \varepsilon_{2s} _{\max}}$	$\beta$	$\operatorname{tg} \psi$	$\frac{d_s}{\lambda_s}$	$\frac{ \varepsilon_{2s}(d_s/2) }{ \varepsilon_{2s} _{\max}}$	$\beta$
0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\infty$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{5}$	0.81	$\frac{3}{2}$
0	$\frac{1}{6}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	2	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1
0	$\frac{3}{20}$	0.89	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	0	$\infty$
0	$\frac{1}{8}$	0.92	1	1	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	2
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\infty$	1	$\frac{3}{10}$	0.59	$\frac{3}{2}$
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	3	1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	1
$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{9}$	0.77	2				

стартов их роста совпадают, отражая процесс согласованного действия бегущих  $s$ - и  $l$ -пучков.

Разделив суммарную длину катетов треугольника, показанного на рис. 12, на скорость  $v_{tw} = v_{1,2s} \sqrt{2}$ , находим интервал времени  $\Delta t_1$  между двумя ближайшими стартами роста полос, который удобно выразить через период  $s$ -колебаний  $T_s = \lambda_s/v_s$ :

$$\Delta t_1 = T_s \frac{\tilde{d}_s(1+\beta)}{(1+\operatorname{tg} \psi)\beta}, \quad \tilde{d}_s = \frac{2d_s}{\lambda_s} \leq 1. \quad (40)$$

Заметим, что при распространении вдоль катета в направлении  $[1\bar{1}0]_\gamma$  роста основной компоненты двойника затухание как минимум компенсируется (см. п. 4.2), но при распространении вдоль катета в направлении  $[110]_\gamma$ , ортогональном направлению роста, излучаемые волновые  $s$ -пучки не поддерживаются неравновесной электронной подсистемой и необходимо учитывать за-

затухание в процессе распространения. Время  $\Delta t_2$  распространения вдоль катета в направлении [110]<sub>γ</sub>:

$$\Delta t_2 = T_s \frac{\tilde{d}_s (1 + \beta)}{2\beta} \leq \Delta t_1, \quad (41)$$

где равенство возможно лишь в случае  $\operatorname{tg} \psi = 1$  при  $\psi = \pi/4$ .

Характеризуя затухание постоянной времени  $\tau_s$ , напомним, что ближайшим по порядку величины к предельному значению является  $\tau_s \approx 10T_s$ , когда в течение периода колебания амплитуда падает примерно на 10 %. Для относительно длинноволновых  $l$ -смещений, как подробно обсуждалось в [1, 2], выполняется соотношение  $\tau_l \sim (10^4 - 10^3)T_l$ , и процесс генерации волн неравновесными электронами вполне реализуем. Для  $s$ -смещений (с волновыми векторами, по порядку величины еще превышающими наибольшие бриллюэновские векторы) следует ожидать величин  $\tau_s$  из диапазона  $\tau_s \sim (10^2 - 10^1)T_s$ , причем верхняя граница  $\tau_s$  достигается, скорее всего, при снижении температуры, когда существенно уменьшается вклад в затухание, обусловленный рассеянием на коротковолновых фононах.

Таким образом, динамический процесс формирования основной компоненты слоистой структуры, неотъемлемой составляющей которого является участие  $s$ -пучков, на наш взгляд, непосредственно связан с возможностью генерации таких пучков в неравновесных условиях. Воспроизведение же активных  $s$ -ячеек на фронте  $l$ -пучка без значительного снижения величины деформации в  $s$ -пучках в условиях затухания, не компенсируемого процессами генерации, оказывается возможным в силу малости времени  $\Delta t_2$  (и, соответственно, длины катета вдоль [110]<sub>γ</sub>, равной  $v_{tw}\Delta t_2 \sim \lambda_s$ ), как это следует из (41), поскольку  $s$ -ячейки воспроизводятся в ближней волновой зоне от растущей основной компоненты двойника. Стандартная экспоненциальная оценка амплитуды деформации

$$|\varepsilon_{2s}(\Delta t)|_{\max} = |\varepsilon_{2s}(0)|_{\max} \exp(-\Delta t/\tau_s) \quad (42)$$

при  $\Delta t = \Delta t_2 \approx T_s/2$  и  $\tau_s \approx (10^2 - 10^1)T_s$  дает

$$|\varepsilon_{2s}(\Delta t_2)|_{\max} \approx (0.995 - 0.951)|\varepsilon_{2s}(0)|_{\max}. \quad (43)$$

Из (43) следует, что снижение уровня деформации оказывается порядка процента, что вполне приемлемо.

## КАЧЕСТВЕННАЯ СХЕМА ЭТАПОВ ФОРМИРОВАНИЯ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

---

### 5.1. ФОРМИРОВАНИЕ ПРОСЛОЙКИ ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ К ОСНОВНОЙ КОМПОНЕНТЕ РЕГУЛЯРНОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

До сих пор мы не касались вопроса о механизме формирования дополнительной к основной компоненте регулярной слоистой структуры, оказывающейся в роли прослойки между основными компонентами. При тонкой двойниковой структуре контакт решеток компонент по границам  $\{112\}_\alpha$  (генетически связанным с  $\{110\}_y$ ) считается когерентным. Поэтому характер образования подобной прослойки естественно считать следствием превращения контактирующих с нею областей. В п. 6.2 будет предложена простая аргументация для отбора значения  $\beta$ , оптимального для наибыстрейшего формирования двойниковой структуры с типичной для ОЦК (либо ОЦТ)-плоскостью двойникования.

Естественно, не каждая регулярная слоистая структура способна осуществить быструю трансформацию в двойниковую структуру. Заметим, что смена типа  $s$ -ячеек может модифицировать регулярную слоистую структуру, изменив плоскость контакта основной и дополнительной компонент. Ясно, что при больших  $\beta$  тонкая дополнительная компонента испытывает значительную деформацию сдвига, индуцированного окаймляющими основными компонентами. При условии сохранения когерентности решеток компонент регулярной слоистой структуры в общем случае  $1 \leq \beta(d_s) < \infty$  имеем

$$\operatorname{tg}\varphi_{\text{com}} = -\beta \operatorname{tg}\varphi_{\text{bas}}, \quad (44)$$

т. е. в прослойке, ограниченной превращающимися полосами главных компонент, индуцируется противоположный по знаку сдвиг  $\operatorname{tg}\varphi_{\text{com}}$  (сокращение «com» от «complementary» относится к дополнительной компоненте регулярной слоистой структуры), превышающий по величине в  $\beta$  раз сдвиг  $\operatorname{tg}\varphi_{\text{bas}}$  в основной ком-

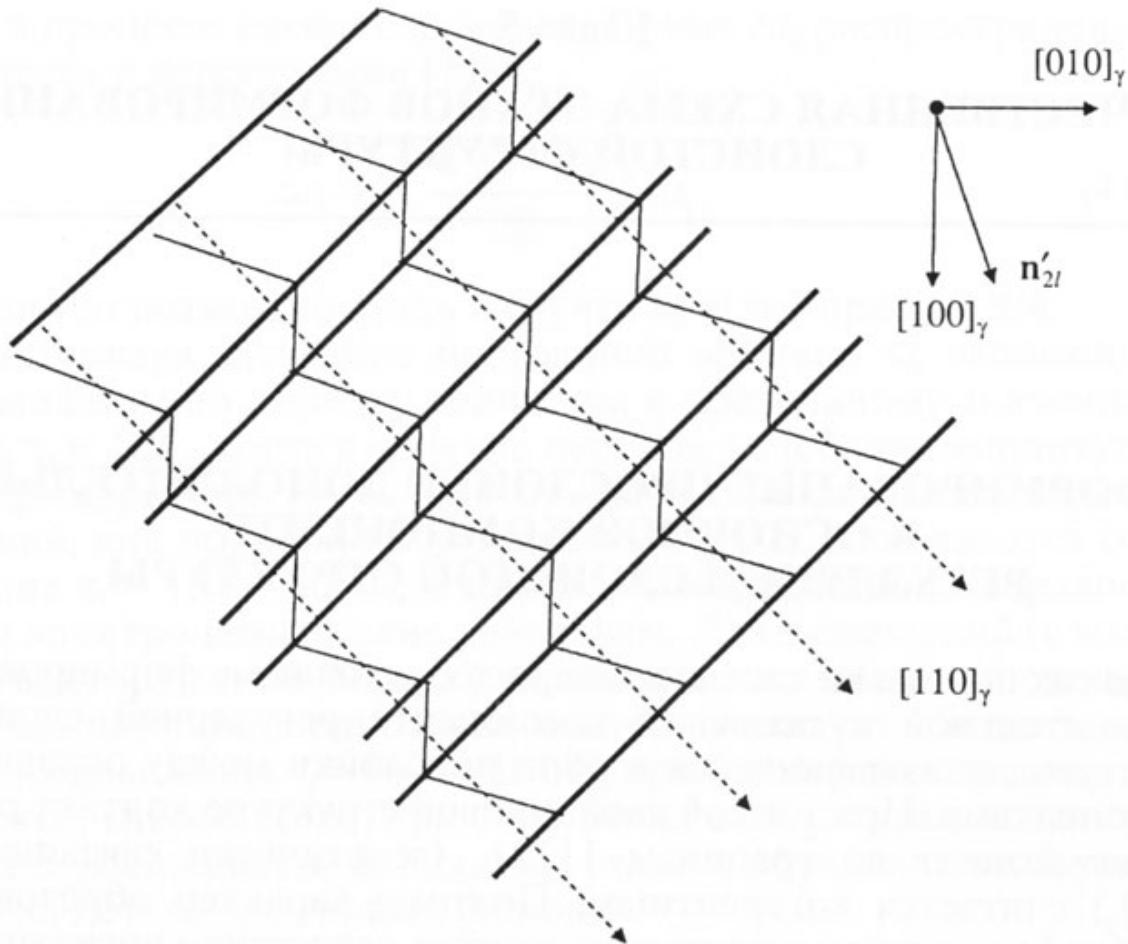


Рис. 13. Система чередующихся сдвигов в основной и дополнительной компонентах регулярной слоистой структуры при  $\beta = 2$

поненте (сокращение «bas» от «basic»). Рис. 13 иллюстрирует сказанное для регулярной слоистой структуры при  $\beta = 2$ . Для наглядности величины смещений явно преувеличены. Очевидно также, что направлению  $[110]_\gamma$ , совпадающему до реализации деформации со штриховой линией, после чередующихся сдвигов сопоставляется ломаная линия .

Ясно, что значительные пластические сдвиги в тонких прослойках могут вообще блокировать мартенситное превращение в них. Тогда регулярная слоистая структура будет представлять собой набор подобных пластинок, разделенных прослойками аустенита, однако сам набор может быть пространственно упорядочен в форме макропластины с граничной («габитусной») плоскостью, намеченной  $l$ -волнами в составе управляющего волнового процесса.

Возвращаясь к возникновению двойниковой структуры, еще раз подчеркнем, что образование двойниковой прослойки является следствием формирования основных компонент и когерентности сочленения. Причем рост двойниковой прослойки начинается в центральной области пластины вслед за потерей устойчивости ре-

шетки в обрамляющих прослойку областях и, следовательно, не обусловлен минимизацией упругой энергии на границе контакта с аустенитом вдоль плоскости габитуса. Малость времени запаздывания  $\Delta t_1$  между стартами процессов превращения в обрамляющих областях обеспечивает практическую синхронность для создания вынужденного чистого сдвига в двойниковой прослойке. Изложенная интерпретация существенно детализирует картину двойникования как последовательно разворачивающегося в пространстве и времени деформационного процесса, что вполне естественно для концепции близкодействия в физике.

Полезно напомнить, что сдвиг при двойниковании запускается вслед за распространением  $s$ -волн в составе управляющего волнового процесса в стесненных условиях деформации потерявшей устойчивость решетки и, следовательно, идет со сверхзвуковой скоростью (по отношению к продольным волнам). Этот сдвиг, как и сдвиг вдоль габитусной плоскости, не следует отождествлять с перечными волнами, имеющими существенно меньшую скорость.

Очевидно, что в изложенной картине соотношение объемов компонент  $\beta$  диктуется, согласно (38), пороговым условием потери устойчивости решетки исходной фазы (задающим соотношение  $d/\lambda_s$ ) и направлением распространения  $l$ -пучка, а не требованием подбора варианта деформации при инвариантной решетке для выполнения постулата о габитусе как макроскопически инвариантной плоскости, используемом в кристаллогеометрическом и термодинамическом подходах. Собственно, и появление габитусов с характерными кристаллографическими ориентациями является следствием распространения управляющего волнового процесса, т. е. динамического механизма, нарушающего устойчивость решетки. Значит, реализация регулярной слоистой структуры в форме двойниковой структуры происходит в случае, когда из-за изменения температуры и состава сплава при наличии подходящего дислокационного центра зарождения выполняются условия «тонкой настройки», согласующей действие  $l$ - и  $s$ -волн, приводящее к значениям  $\beta$  в регулярной слоистой структуре, обеспечивающим деформацию  $\text{tg}\varphi_{tw}$  в прослойке, оптимальную для быстрой трансформации прослойки в двойниковую составляющую тонкой двойниковой структуры.

## 5.2. ПЕРВЫЙ ЭТАП ФОРМИРОВАНИЯ ОСНОВНОЙ КОМПОНЕНТЫ ДВОЙНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ, СВЯЗАННЫЙ С ДОСТИЖЕНИЕМ ФИНИШНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ДЕФОРМАЦИЯМИ $\varepsilon_{1,2s}$

Приведенная на рис. 13 схема, если учесть указанные направления растяжения и сжатия вдоль осей  $[100]_y$  и  $[010]_y$ , отражает первый этап формирования решетки мартенсита, обусловленный главным образом развитием неустойчивости решетки на пространственном масштабе  $d_s < \lambda_s/2$ , связанном с  $s$ -пучками и, следовательно, с масштабом времени  $\Delta t_s < T_s/2$ . Поскольку  $\lambda_s \ll \lambda_l$  и, аналогично,  $T_s \ll T_l$ , можно считать, что на первом этапе за время  $\Delta t_s$  развиваются деформации вдоль  $[100]_y$  и  $[010]_y$ . В соответствии с (6), отношение значений пороговых деформаций сжатия и растяжения задается отношением квадратов скоростей волн, и, значит, при равенстве скоростей  $v_{1s} = v_{2s}$  равны и значения деформаций  $\varepsilon_{1s} = |\varepsilon_{2s}|$ . На этом этапе, в силу неравенства  $T_s \ll T_l$ , можно считать, что деформации, переносимые  $l$ -пучками, остаются на уровне пороговых  $|\varepsilon_{1,2l}|_{th}$ , тогда как равные по величине деформации  $|\varepsilon_{1,2s}|$  могут достичь финишных значений  $|\varepsilon_{1,2s}|_f$  порядка деформаций Бейна. При этом, согласно (35), решетка испытывает поворот вокруг оси  $[001]_y$  на финишный угол  $\phi_{sf}$ . Как показано в [59, 62, 64], для угла поворота  $\phi$  в стесненных условиях деформации имеет место равенство

$$\phi = \arccos \left\{ \frac{\Gamma + \alpha^2}{\sqrt{(1 + \alpha^2)(\Gamma^2 + \alpha^2)}} \right\}, \quad \Gamma = \frac{1 + \varepsilon_1}{1 - |\varepsilon_2|}. \quad (45)$$

Заметим, что эквивалентная (45) формула имеет вид

$$\phi = \operatorname{arctg} \alpha - \operatorname{arctg} \frac{\alpha}{\Gamma}. \quad (46)$$

Полагая  $\alpha = 1$ , для  $\varepsilon_{1s} = |\varepsilon_{2s}|$  из (45) находим

$$\phi_{sf} = \arccos \left\{ \frac{\Gamma + 1}{\sqrt{2(\Gamma^2 + 1)}} \right\} = \arccos \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon_{1s}^2}} \right\} = \operatorname{arctg} (\varepsilon_{1s}). \quad (47)$$

Чтобы уточнить возможные значения  $|\varepsilon_{1,2s}|_f$ , полезно напомнить значения деформации Бейна  $\varepsilon_{ib}$  ( $i = 1, 2, 3$ ). Например, для случая перехода от ГЦК- к ОЦК-решетке с параметром решет-

ки  $a_\alpha = 0.8a_\gamma$  деформация сжатия  $\varepsilon_{2B}$  вдоль одной из осей  $<001>_\gamma$  составляет  $\varepsilon_{2B} = -0.2$ , а синхронные растяжения вдоль пары ортогональных осей  $<100>_\gamma$ ,  $<010>_\gamma$  (либо  $<110>_\gamma$ ,  $<1\bar{1}0>_\gamma$ )  $\varepsilon_{1B} = \varepsilon_{3B} = 0.8\sqrt{2}-1 \approx 0.13137085$ . Отметим, однако, что типичным является переход от ГЦК- к тетрагональной ОЦТ-фазе с тетрагональностью  $t = c_\alpha/a_\alpha > 1$ . В сплавах внедрения тетрагональность естественно связывается с преимущественным попаданием внедренного элемента в одну из подрешеток октаэдрических междоузлий и возрастает с увеличением его концентрации [3]. Количество описание, для определенности, будет иллюстрироваться сравнением с морфологическими данными для  $\alpha$ -мартенсита сплава Fe—22Ni—0.8C:  $t = c_\alpha/a_\alpha = 1.045$ , а относительное изменение объема  $\delta = 0.0384$ . Именно для этого состава в [74] удалось впервые достаточно точно (на крупных мартенситных кристаллах) провести измерения всех макроскопических морфологических признаков. Из кристаллогеометрии следуют очевидные соотношения

$$\delta = (V_\alpha - V_\gamma)/V_\gamma = (1 + \varepsilon_{1B})(1 + \varepsilon_{2B})(1 + \varepsilon_{3B}) - 1,$$

$$t = c_\alpha/a_\alpha = \sqrt{2}(1 + \varepsilon_{2B})/(1 + \varepsilon_{1B}), \quad (48)$$

позволяющие по известным значениям  $t$ ,  $\delta$ , при  $\varepsilon_{1B} = \varepsilon_{3B}$  найти  $\varepsilon_{2B}$  и  $\varepsilon_{1,3B}$ . В частности, для сплава Fe—22Ni—0.8C из (48) получаем:  $\varepsilon_{1,3B} \approx 0.12011$ ,  $\varepsilon_{2B} \approx -0.17232$ . При концентрациях углерода (и особенно азота), превышающих 1 мас. %, величина  $t$  может быть и заметно больше. Как правило, увеличение концентрации внедренного элемента сопровождается ростом  $t$  за счет увеличения  $c_\alpha$  и более медленного снижения  $a_\alpha$  и, соответственно, понижением значений  $\varepsilon_{iB}$  (в предельном случае  $\varepsilon_{iB} \rightarrow 0$  из (48) ясно, что  $\delta \rightarrow 0$ , а  $t \rightarrow \sqrt{2}$ , т. е. исходную ГЦК-решетку можно считать ОЦТ-решеткой с тетрагональностью  $t = \sqrt{2}$ ). Уместно отметить, что в сплавах на основе железа  $\alpha$ -мартенсит ферромагнитен, а ферромагнетизм несовместим с идеальной кубической симметрией решетки [75], поэтому и в сплавах замещения свежеобразованный мартенсит может обнаруживать слабую тетрагональность. Кроме того, при значительных концентрациях второго компонента сплава возможно формирование областей ближнего порядка (кластеров), модифицирующих характеристики ионов в кластере, что, в свою очередь, будет сказываться на величине тетрагональности. Наблюдаются и варианты

ромбической решетки мартенсита с тремя различающимися параметрами решетки  $c_\alpha$ ,  $a_\alpha$  и  $b_\alpha$ . Значит, при динамическом описании следует пояснить возможности описания и таких решеток.

Поскольку  $|\varepsilon_{2B}| > |\varepsilon_{1,3B}|$ , для наибыстрейшего сценария превращения естественно считать, что деформация  $\varepsilon_{1B}$  достигается уже на первом этапе:

$$\varepsilon_{1s}|_f = \varepsilon_{1B}, \quad (49)$$

как и часть деформации  $|\varepsilon_2| = |\varepsilon_{2s}|_f + |\varepsilon_{2l}|_{th} < |\varepsilon_{2B}|$ . Дальнейшее возрастание  $|\varepsilon_2|$  до  $|\varepsilon_{2B}|$ ,

$$|\varepsilon_{2B}| = |\varepsilon_{2s}|_f + |\varepsilon_{2l}|_f, \quad (50)$$

происходит на втором этапе деформации, связанном с масштабом времени  $\Delta t_s$ :  $\Delta t_s \ll \Delta t_l < T/2$ . Второй этап отвечает и за развитие деформации  $\varepsilon_3$  от  $|\varepsilon_{1l}|_{th}$  до  $|\varepsilon_{3B}|$ .

После сделанных замечаний финишный угол  $\Phi_{sf}$  поворота вокруг оси [001]<sub>γ</sub> для сплава Fe—22Ni—0.8C находим из (46) при  $|\varepsilon_{1s}|_f \approx 0.12011$ :  $\Phi_{sf} \approx 6.849025^\circ$ . Отсюда, в частности, следует, что угол между осями сжатия в основной и двойниковой компонентах тонкой двойниковой структуры (первоначально ортогональных между собой) уменьшается на величину  $\sim(1 + \beta)\Phi_{sf}$  и составляет при  $\beta$ , близких к 3/2, около 73°.

### **5.3. ВТОРОЙ ЭТАП ФОРМИРОВАНИЯ ОСНОВНОЙ КОМПОНЕНТЫ ДВОЙНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ, СВЯЗАННЫЙ С ДОСТИЖЕНИЕМ ФИНИШНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ДЕФОРМАЦИЯМИ $\varepsilon_{1,2l}$**

Напомним, что  $s$ -ячейка (в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда) должна иметь один из размеров вдоль оси <001><sub>γ</sub> порядка  $\lambda_s/2$ , во много больший поперечного размера порядка  $\lambda_s/2$ . Вполне естественно считать, что в стартовый момент активации  $s$ -ячейки возникают колебания, порождающие волновые пучки, несущие деформацию растяжения с некоторым значением  $|\varepsilon_{1s}|_{th}$  (смешанный индекс  $sl$  символизирует принадлежность деформации  $|\varepsilon_{1s}|_{th}$  к  $s$ -ячейке на масштабе, характерном для поперечного размера  $l$ -ячейки, а символ  $|_{th}$  — то, что эти пучки способны дать вклад в деформацию, необходимую для преодоления порогового значения). Такие пучки распространяются практически синхронно с волновым  $l$ -пучком в составе управляющего волнового процесса, также несущем деформацию

растяжения  $\varepsilon_{1l}|_{th}$  и бегущим вблизи оси  $<001>_\gamma$  (нормаль  $\mathbf{n}_{1l}$  в (24) и (26)) или строго вдоль  $<001>_\gamma$  при более симметричном описании (27). В результате эффективное значение пороговой деформации растяжения  $\varepsilon'_{lef}|_{th}$  вдоль оси  $<001>_\gamma$  задается суммой

$$\varepsilon'_{lef}|_{th} = \varepsilon_{1s}|_{th} + \varepsilon'_{1l}|_{th}, \quad (51)$$

где обозначение  $\varepsilon'_{1l}|_{th}$  относится к вкладу в растяжение, обусловленному деформациями, переносимыми  $l$ -пучками. Заметим, что  $\varepsilon'_{1l}|_{th}$  может совпадать с  $\varepsilon_{1l}|_{th}$  только при коллинеарности  $\mathbf{n}_{1l}$  и  $<001>_\gamma$  (и, соответственно, при ортогональности  $\mathbf{n}_{2l}$  к  $<001>_\gamma$ ). Согласно условию неизменности отношения деформаций сжатия и растяжения после потери устойчивости решетки аустенита, должно выполняться равенство:

$$|\varepsilon'_{1l}|_{th}/|\varepsilon'_{2l}|_{th} = |\varepsilon'_{1l}|_f/|\varepsilon'_{2l}|_f, \quad (52)$$

т. е. отношение вкладов пороговых деформаций, обусловленных влиянием  $l$ -пучков, совпадает с отношением их вкладов  $|\varepsilon'_{1l}|_f/|\varepsilon'_{2l}|_f$  в финишные деформации. Следует ожидать и выполнения равенств

$$(\varepsilon'_{lef}|_{th})/|\varepsilon'_{2l}|_{th} = (\varepsilon'_{lef}|_f)/|\varepsilon'_{2l}|_f, \quad \varepsilon'_{lef}|_f = \varepsilon'_{1l}|_f + \varepsilon_{1s}|_f = \varepsilon_{1B}. \quad (53)$$

Теперь, используя известные соотношения для деформаций, по данным о  $\varepsilon_{1B}$ ,  $\varepsilon_{1s}|_f = |\varepsilon_{2s}|_f$  можно установить абсолютные значения всех финишных деформаций и, разумеется, любые долевые вклады.

Действительно, финишная деформация  $|\varepsilon'_{2l}|_f$  дается разностью

$$|\varepsilon'_{2l}|_f = |\varepsilon_{2B}| - |\varepsilon_{2s}|_f, \quad (54)$$

откуда для сплава Fe—22Ni—0.8C находим  $|\varepsilon'_{2l}|_f \approx 0.17232 - 0.12011 = 0.05221$ . Поскольку направления  $l$ -волн отклонены от осей бейновской деформации, то деформации в направлениях, близких к волновым нормалям, будут иметь значения, превышающие  $|\varepsilon'_{2l}|_f$ , так как  $|\varepsilon'_{2l}|_f$  в действительности является результирующим значением вкладов от деформаций с разным знаком.

Чтобы найти  $|\varepsilon_{2l}|_f$ , воспользуемся формулой (см., например, [76]) для деформации  $\eta_{\theta,\phi}$  в произвольном направлении  $\mathbf{n}_{\theta,\phi}$ , задаваемом углами  $(\theta, \phi)$  в сферической системе координат:

$$\begin{aligned} \eta_{\theta,\phi} = 1 + \varepsilon_{\theta,\phi} &= \eta_x \eta_y \eta_z [\eta_y^2 \eta_z^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + \\ &+ \eta_x^2 \eta_z^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + \eta_x^2 \eta_y^2 \cos^2 \theta]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (55)$$

Выберем ось  $z$  вдоль  $\mathbf{n}_{1l}$ , ось  $x$  — вдоль  $\mathbf{n}_{2l}$ , а ось  $y$  — вдоль  $[\mathbf{n}_{1l}, \mathbf{n}_{2l}]$ . Учтем, что направление  $[100]_\gamma$  после первого этапа деформации испытalo разворот вокруг оси  $[001]_\gamma$ , так что его ориентация  $[100]'_\gamma$  составляет угол  $\phi_{sf}$  с  $[001]_\gamma$ :

$$\mathbf{n}_{\theta,\varphi} = [100]'_\gamma = [\cos\phi_{sf} \sin\phi_{sf} 0]_\gamma \quad (56)$$

При оценке  $|\varepsilon_{2l}|_f$  для простоты будем считать, что управляющий волновой процесс обеспечивает чисто продольные деформации в направлениях  $\mathbf{n}_{1l}$  и  $\mathbf{n}_{2l}$ , а  $\eta_y = 1$ . Тогда

$$\eta_x = 1 - |\varepsilon_{2l}|_f, \eta_y = 1, \eta_z = 1 + \varepsilon_{1l|f} = 1 + (\alpha_l)^2 |\varepsilon_{2l}|_f. \quad (57)$$

Значения  $(\theta, \varphi)$  для направления  $\mathbf{n}_{\theta,\varphi} = [100]'_\gamma$  в новой системе координат  $\{xyz\}$  легко находятся из скалярных произведений:

$$\cos\theta = (\mathbf{n}_{1l}, \mathbf{n}_{\theta,\varphi}), \cos\varphi = (\mathbf{n}_{2l}, \mathbf{n}_{\theta,\varphi} - \cos\theta \cdot \mathbf{n}_{1l})/\sin\theta = (\mathbf{n}_{2l}, \mathbf{n}_{\theta,\varphi})/\sin\theta. \quad (58)$$

Следовательно, подставляя в (55) значения  $(\theta, \varphi)$ , значения (57) и  $\eta_{\theta,\varphi} = 1 + \varepsilon_{\theta,\varphi} = 1 - |\varepsilon_{2l}|_f$ , получаем уравнение для определения  $|\varepsilon_{2l}|_f$ . Затем из требования (6) находим  $\varepsilon_{1l|f} = (\alpha_l)^2 |\varepsilon_{2l}|_f$ . Тогда для сплава Fe—22Ni—0.8C при  $\phi_{sf} \approx 6.849025^\circ$  и  $\alpha_l \approx 1.088651$  (см. начало гл. 4) получаем

$$|\varepsilon_{2l}|_f \approx 0.056325, \varepsilon_{1l|f} \approx 0.0667542. \quad (59)$$

Используя значения (59) и полагая  $\eta_{\theta,\varphi} = 1 + \varepsilon'_{1l|f}$ ,  $\mathbf{n}_{\theta,\varphi} = [001]_\gamma$  в той же системе координат  $\{xyz\}$  из (55) и (58) найдем  $\varepsilon'_{1l|f}$ , а затем из (53) и  $\varepsilon_{1sl|f}$ :

$$\varepsilon'_{1l} \approx 0.06315, \varepsilon_{1sl|f} = \varepsilon_{1B} - \varepsilon'_{1l|f} \approx 0.12011 - 0.06315 = 0.05686. \quad (60)$$

В (53) и (60) явно учтено требование тетрагональной симметрии решетки мартенсита

$$\varepsilon_{1s|f} = \varepsilon'_{1l|f} + \varepsilon_{1sl|f} = \varepsilon_{1B}. \quad (61)$$

Очевидно, что при отличии  $\varepsilon_{1sl|f}$  от найденного значения 0.05686 для сплава Fe—22Ni—0.8C реализовалась бы ромбическая решетка.

Полученная для сплава Fe—22Ni—0.8C величина  $\varepsilon_{1sl|f}$  свидетельствует о сравнительной близости вкладов деформаций  $\varepsilon'_{1l|f}$  и  $\varepsilon_{1sl|f}$  в результирующую деформацию расширения вдоль оси  $\langle 001 \rangle_\gamma$  (52.62 и 47.38 % соответственно).

Поскольку деформация  $\varepsilon_{1s/l_f}$  развивается синхронно с  $\varepsilon_{1l/l_f}$  и  $|\varepsilon_{2l/l_f}|$ , удобно ввести эффективную деформацию в направлении  $\mathbf{n}_{1l}$ :

$$\varepsilon_{1l/l_f}^{ef} \approx \varepsilon_{1l/l_f} + \varepsilon_{1s/l_f} \cos^2 \phi, \cos \phi = (\mathbf{n}_{1l}, \mathbf{n}_z), n_z = [001]_\gamma \quad (62)$$

Тогда, полагая  $\alpha_l \approx 1.088651$ , для сплава Fe—22Ni—0.8C из (45) и (46) при  $\varepsilon_{1l/l_f}^{ef} \approx 0.125068$  и  $|\varepsilon_2| = |\varepsilon_{2l/l_f}| = 0.056325$  находим

$$\Gamma = \frac{1 + \varepsilon_{1l/l_f}^{ef}}{1 - |\varepsilon_{2l/l_f}|} \approx 1.1922044, \quad \phi_l^{ef} \approx 5.03029^\circ. \quad (63)$$

Используя приближение продольных волн, ось поворота на угол  $\phi_l$ , аналогично (33), задаем векторным произведением

$$\mathbf{n}_l = [\mathbf{n}_{2l}, \mathbf{n}_{1l}]_\gamma \quad (64)$$

Подставляя в (64)  $\mathbf{n}_{2l}$  и  $\mathbf{n}_{1l}$  из (26), получаем

$$\mathbf{n}_l \approx [-0.279433 \ 0.960064 \ 0.013921]_\gamma \quad (65)$$

Для дальнейшего анализа полезно отметить, что если в (55) вместо  $\eta_{\theta,\phi} = 1 + \varepsilon_{\theta,\phi}$  подставить 0.8277, считая полное бейновское сжатие вдоль направления  $\mathbf{n}_{\theta,\phi} = [100]_\gamma'$  реализованным исключительно за счет вклада деформаций в направлениях  $\mathbf{n}_{1l}$  и  $\mathbf{n}_{2l}$ , то получим

$$|\varepsilon_2|_f \approx 0.18126, \quad \varepsilon_{1l/l_f} \approx 0.214822.$$

Ясно, что для направления  $\mathbf{n}_{\theta,\phi} = [100]_\gamma$ , составляющего с  $\mathbf{n}_{2l}$  больший угол (по сравнению с  $\mathbf{n}_{\theta,\phi} = [100]_\gamma'$ ), значения  $|\varepsilon_{2l/l_f}|$  и  $\varepsilon_{1l/l_f}$  возрастают. Так, для  $\mathbf{n}_{\theta,\phi} = [100]_\gamma$  находим

$$|\varepsilon_{2l/l_f}| \approx 0.18852, \quad \varepsilon_{1l/l_f} \approx 0.22343. \quad (66)$$

Эта оценка полезна как для понимания условий формирования недвойникованного мартенсита (и расчета макродеформации сдвига в нем), так и для оценки результирующего макросдвига двойникованного мартенсита, если пороговые условия для генерации s-волн будут жесткими, и двойникование разыгрывается на фоне развивающихся деформаций в направлениях  $\mathbf{n}_{1l}$  и  $\mathbf{n}_{2l}$  (в общем случае возможен и такой сценарий).

**Глава 6****ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ И МАКРОСДВИГ**

При отсутствии  $s$ -волн взаимосвязь ориентационных соотношений и макросдвига в условиях распространения пороговой деформации кратко пояснялась в [62]. Для дальнейшего полезно провести более подробное обсуждение. На рис. 14, взятом из [62], показано, что распространение управляющего волнового процесса (для случая наложения чисто продольных волновых пучков) сопровождается образованием «канала» внутри метастабильно устойчивого аустенита. 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  $\phi$  (описываемый (45) и (46)), отраженный на рис. 14, б изменением ориентации  $\mathbf{d}$  на  $\mathbf{d}'$ . Этот поворот задает макросдвиг и ориентационные соотношения. Направления векторов смещений  $\Delta\mathbf{S}_{1,2}$  на рис. 14, б, в относятся, соответственно, к вариантам уменьшения и увеличения удельного объема при превращении.

### **6.1. ОБЩАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ОРИЕНТАЦИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ**

Рис. 15 в явной форме демонстрирует формирование ориентационных соотношений при распространении управляющего волнового процесса, несущего деформацию сжатия—растяжения в ортогональных направлениях.

Подчеркнем, что при мартенситном превращении величина угла поворота в стесненных условиях определяется главным образом ресурсом собственной деформации решетки, потерявшей устойчивость (в частности бейновской деформации при  $\gamma$ — $\alpha$  мартенситном превращении). При  $\gamma$ — $\alpha$  мартенситном превращении деформация элементарной ячейки происходит при сохранении ортогональности ее ребер (см. рис. 2). Приведем простой алгоритм расчета величины разориентации  $\phi$ — $\phi_0$  соответ-

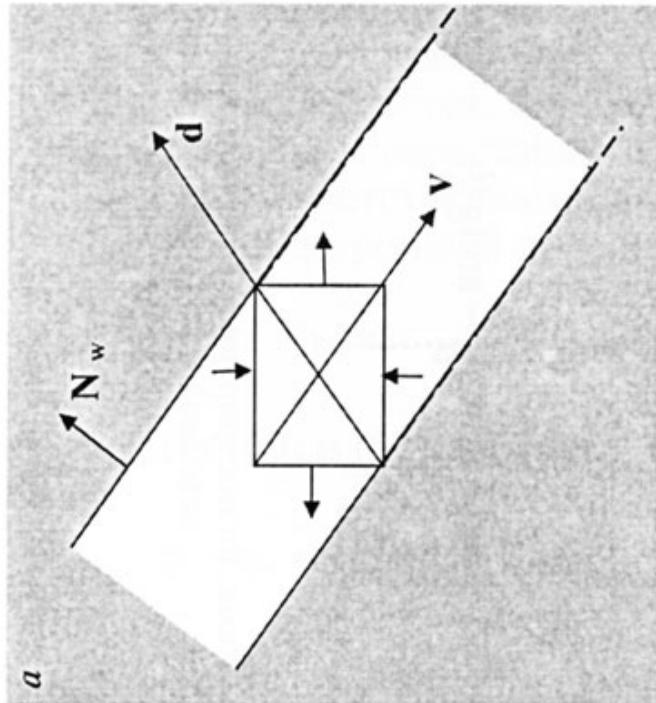
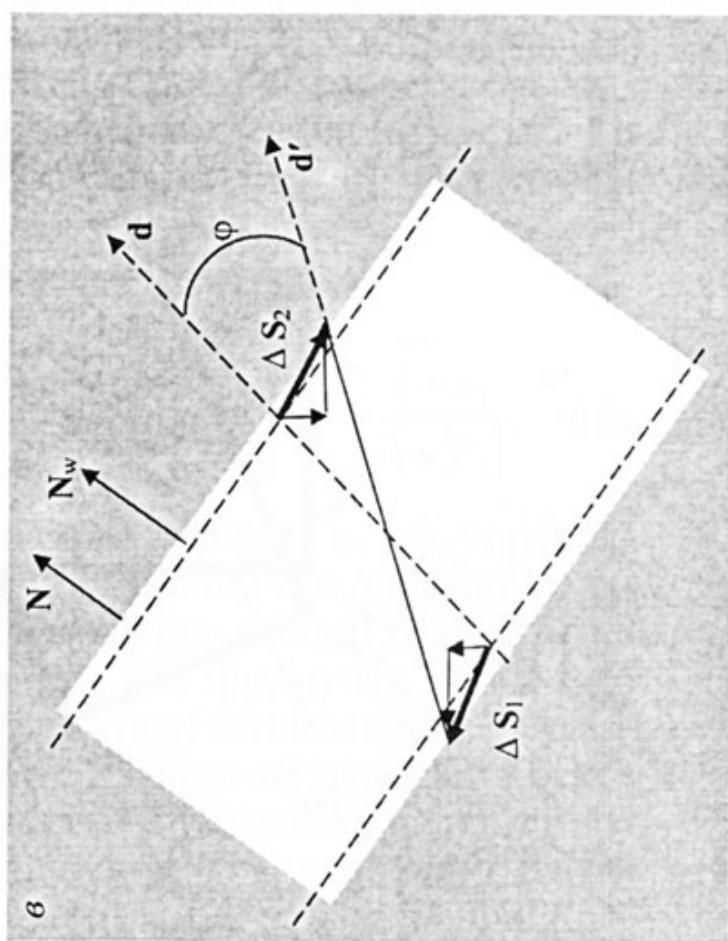
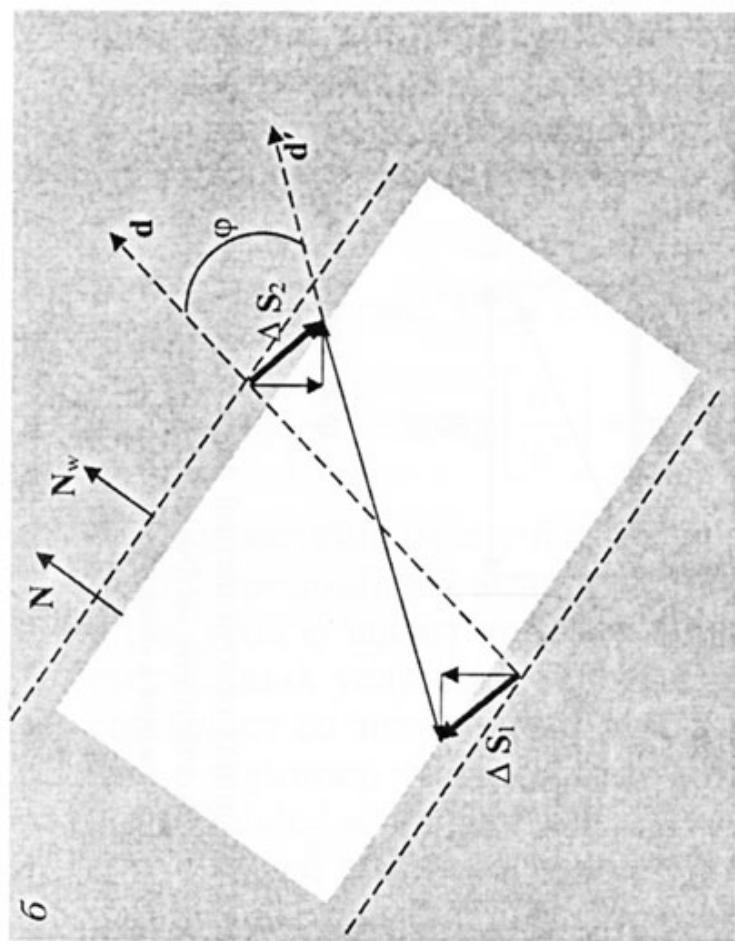


Рис. 14. Модель формирования «канала»  
превращения в метастабильно устойчи-  
вом аустените:

*a* — сечение плоского канала, образующегося при рас-  
пространении управляющего волнового процесса; *b* —  
фрагмент сечения «канала» превращающегося материала при де-  
формации, существенно превышающих пороговые в  
случае отрицательного объемного эфекта; *c* — то  
же в случае положительного объемного  
эффекта

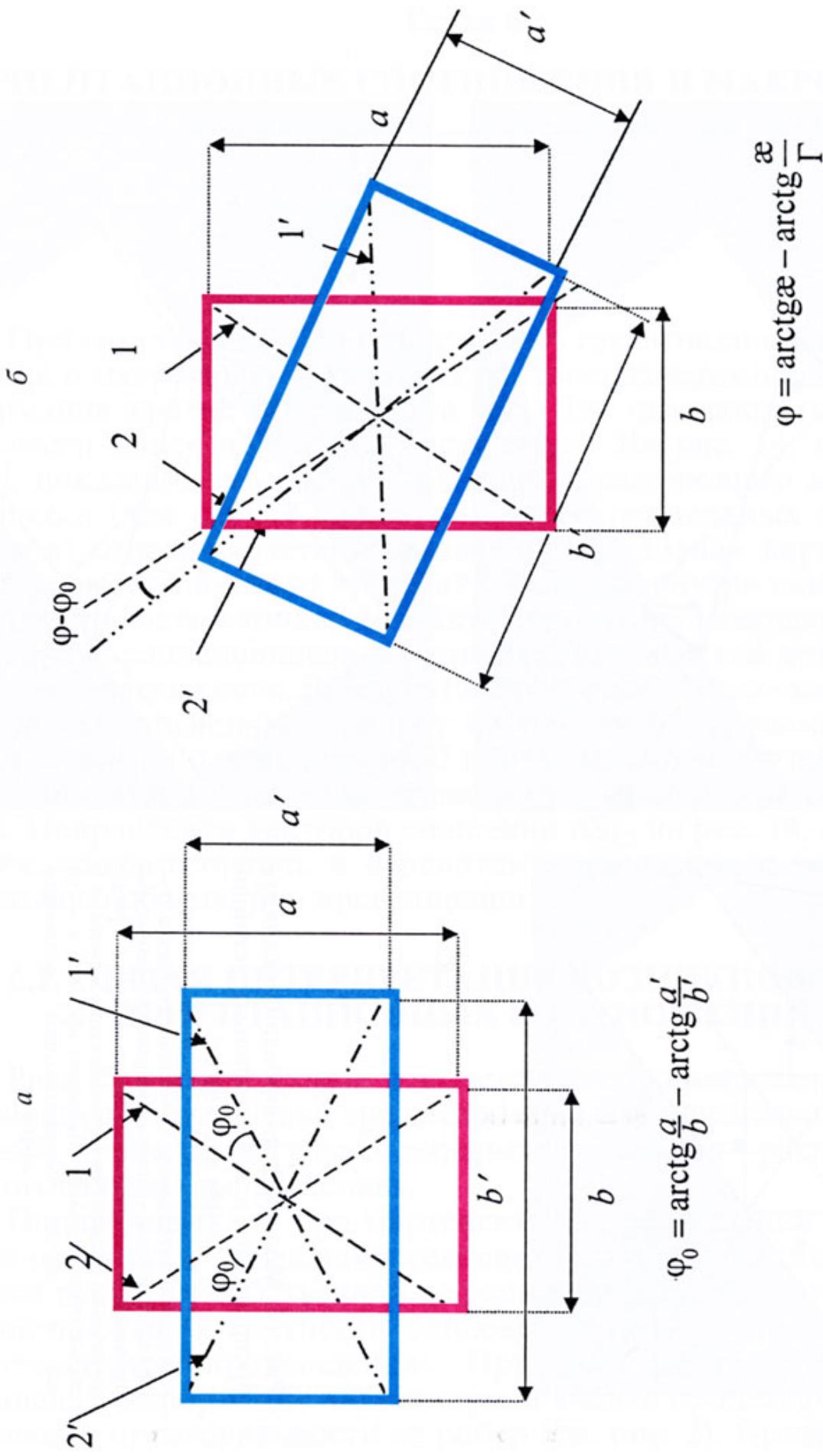


Рис. 15. Схема, иллюстрирующая формирование ориентационных соотношений для соответственных направлений исходной и конечной фазы (для наглядности значения деформаций увеличены):  
 $a$  — деформация в нестесненных условиях;  $\delta$  — деформация в «канале», стесненные условия

ственных направлений (задаваемых матрицей соответствия решеток) после плоской деформации растяжения—сжатия. Как видно из рис. 14, *a*, угол  $\varphi_0$  задает изменение ориентаций диагоналей кристаллографического прямоугольника ( $1$  и  $1'$ ,  $2$  и  $2'$  — соответственные направления), стороны  $a$  и  $b$  которого испытывают в нестесненных условиях деформации сжатия (сторона  $a$ ) и растяжения (сторона  $b$ ), принимая размеры

$$a' = (1 - |\varepsilon_2|)a, b' = (1 + \varepsilon_1)b. \quad (67)$$

Из (67) и рис. 15, *a* очевидно, что

$$\varphi_0 = \operatorname{arctg} \left[ \frac{a}{b} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{a'}{b'} \right] = \operatorname{arctg} \left[ \frac{a}{b} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{a}{b\Gamma} \right], \quad \Gamma = \frac{1 + \varepsilon_1}{1 - |\varepsilon_2|}. \quad (68)$$

В простейшем случае, когда волновые нормали  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  управляющих продольных волн коллинеарны сторонам  $a$  и  $b$  прямоугольника, угол  $\varphi$  задает поворот превращающейся ячейки как целого в стесненных условиях, причем величина  $\Gamma$  в формулах (45) и (46) совпадает со значением  $\Gamma$  в (68). Более того, отношение деформаций с хорошей точностью совпадает с квадратом отношения скоростей  $\varepsilon_1/|\varepsilon_2| \approx \alpha^2$ . Это условие совместно с условием, налагаемым симметрией решетки исходной и конечной фаз, позволяет найти финишные значения деформаций. Допустим, что управляющий волновой процесс стимулирует поворот по часовой стрелке, как это изображено на рис. 14, *b*, *v*. Тогда, как видно из рис. 15, *b*, угол между соответственными направлениями  $1$  и  $1'$  нарастает, а между  $2$  и  $2'$  уменьшается. Очевидно, что смена направления поворота привела бы к нарастанию угла между  $2$  и  $2'$  и уменьшению угла между соответственными направлениями  $1$  и  $1'$ . Опуская, в общем случае, подстрочный индекс  $l$ , выпишем (46) еще раз:

$$\varphi = \operatorname{arctg} [\alpha] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{\alpha}{\Gamma} \right]. \quad (69)$$

Из (69) и (68) следует

$$\varphi - \varphi_0 = \left\{ \operatorname{arctg} [\alpha] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{a}{b} \right] \right\} - \left\{ \operatorname{arctg} \left[ \frac{\alpha}{\Gamma} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{a}{b\Gamma} \right] \right\}, \quad (70)$$

и, значит, выполнение условия  $\varphi - \varphi_0 = 0$  возможно лишь при  $\alpha = \frac{a}{b}$ . Поскольку ориентация соответственных линий задается

пересечением плоскостей, то разориентациям линий будут отвечать и разориентации соответственных плоскостей. Размеры  $a$  и  $b$  прямоугольника непосредственно связаны с выбором элементарной ячейки, способной перестроиться кратчайшим путем при наличии управляющего волнового процесса, нарушающего устойчивость исходного состояния. При экспериментальном описании ориентационных соотношений обычно стараются найти и указать соответственные плоскости и направления, имеющие наименьшие разориентировки. Таким образом, ориентационные соотношения являются следствием кристаллодинамики превращения и через параметр  $\alpha$  зависят от упругих свойств исходной фазы. Последнее обстоятельство позволяет именовать ориентационные соотношения [59, 60, 62, 64] как материальные ориентационные соотношения.

Если  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  неколлинеарны сторонам  $a$  и  $b$  прямоугольника, то очевидно, что величина  $\Gamma$  в (69) будет превышать аналогичный параметр в (68). Используя, однако, (55), можно провести пересчет от деформаций в ортогональных направлениях  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  к деформациям вдоль осей деформированной элементарной ячейки. Такой пересчет для пороговых деформаций в направлениях  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  позволяет связать отношение деформаций вдоль ребер элементарной ячейки с параметром  $\alpha$  — отношением скоростей волн, имеющих волновые нормали  $\mathbf{n}_2$  и  $\mathbf{n}_1$ .

Ясно, что формирование регулярной слоистой структуры соответствует более сложному случаю, когда управляющий волновой процесс имеет в своей структуре не одну, а две совокупности  $s$ - и  $l$ -волн. Однако суть изложенной интерпретации сохраняется.

Для отыскания ориентационных соотношений в основной и дополнительной компонентах регулярной слоистой структуры удобно от двух поворотов вокруг осей  $\mathbf{n}_s$  и  $\mathbf{n}_l$  (см. (33) и (64)) на углы  $\varphi_s$  и  $\varphi_l$  перейти к результирующему повороту с осью поворота  $\mathbf{n}_r$  и углом поворота  $\varphi_r$ . Результирующий поворот находится по теореме о сложении (см., например, [77]):

$$\cos \frac{\varphi_r}{2} = \cos \left( \frac{\varphi_s}{2} \right) \cos \left( \frac{\varphi_l}{2} \right) - (\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_l) \sin \left( \frac{\varphi_s}{2} \right) \sin \left( \frac{\varphi_l}{2} \right), \quad (75)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_r \sin \frac{\varphi_r}{2} = & \mathbf{n}_s \sin \left( \frac{\varphi_s}{2} \right) \cos \left( \frac{\varphi_l}{2} \right) + \\ & + \mathbf{n}_l \sin \left( \frac{\varphi_l}{2} \right) \cos \left( \frac{\varphi_s}{2} \right) - [\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_l] \sin \left( \frac{\varphi_s}{2} \right) \sin \left( \frac{\varphi_l}{2} \right), \end{aligned} \quad (76)$$

где символы (,) и [,] соответствуют операциям скалярного и векторного произведения векторов.

Очевидно, что в общем случае операции поворотов некоммутативны. В нашем случае физически обоснован выбор в качестве первой оси поворота  $n_s$ . Этот выбор обусловлен принципом наименее затратной реализации мартенситного превращения и выполнением сильного неравенства для характерных масштабов времени:  $T_s \ll T_r$ .

Для отыскания ориентационных соотношений необходимо: выбрать ориентировки нормалей к плоскостям и несколько характерных направлений в решетке исходной фазы; действовать на выбранные векторы операцией, соответствующей трансформации элементарной ячейки (при  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситном превращении это деформация Бейна); осуществить операцию поворота преобразованных векторов вокруг оси  $n_r$  (см. (75) и (76)); сравнить полученные ориентации векторов с исходными, установив величину разориентировки.

## 6.2. ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ КОМПОНЕНТ ДВОЙНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ НА ПРИМЕРЕ СПЛАВА Fe—22Ni—0.8C

Продолжая обсуждение кристаллов мартенсита с габитусами (10 3 15) $_{\gamma}$ , напомним, что ориентация оси бейновского сжатия в основной компоненте двойниковой структуры совпадает с [100] $_{\gamma}$ , а в двойниковой — с [010] $_{\gamma}$ . Тогда в базисе [100] $_{\gamma}$ , [010] $_{\gamma}$ , [001] $_{\gamma}$  деформации Бейна в основной компоненте двойниковой структуры соответствует матрица  $\hat{B}_{bas}$ , а в двойниковой —  $\hat{B}_{tw}$ :

$$\hat{B}_{bas} = \begin{vmatrix} \eta_2 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{vmatrix}, \quad \hat{B}_{tw} = \begin{vmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_1 \end{vmatrix}, \quad (77)$$

где для сплава Fe—22Ni—0.8C  $\eta_1 \approx 1.12011$ ,  $\eta_2 \approx 0.8275796$ .

Заметим, что для определения ориентации нормали к плоскости после деформации Бейна на исходную нормаль необходимо действовать обратной операцией  $\hat{B}^{-1}$ .

### 6.2.1. Ориентационные соотношения для основной компоненты двойниковой структуры

Полагая в (75) и (76), согласно (33) и (65),  $\mathbf{n}_s = [001]_\gamma$ ,  $\mathbf{n}_r \approx [-0.279433 \ 0.960064 \ 0.013921]_\gamma$  и, соответственно,  $\Phi_s = \Phi_{sf} \approx 6.849025^\circ$ ,  $\varphi_r = \varphi_r^e \approx -5.03029^\circ$ , получим

$$\mathbf{n}_r \approx [0.132153 \ -0.581510 \ 0.802734]_\gamma, \varphi_r = 8.43938^\circ. \quad (78)$$

Матрица поворота имеет вид

$$\hat{\Phi} = \cos\varphi_r \hat{\Phi}_1 + \sin\varphi_r \hat{\Phi}_2 + (1 - \cos\varphi_r) \hat{\Phi}_3, \quad (79)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_1 &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \hat{\Phi}_2 = \begin{vmatrix} 0 & -n_{r3} & n_{r2} \\ n_{r3} & 0 & -n_{r1} \\ -n_{r2} & n_{r1} & 0 \end{vmatrix}, \\ \hat{\Phi}_3 &= \begin{vmatrix} n_{r1}^2 & n_{r1}n_{r2} & n_{r1}n_{r3} \\ n_{r1}n_{r2} & n_{r2}^2 & n_{r2}n_{r3} \\ n_{r1}n_{r3} & n_{r2}n_{r3} & n_{r3}^2 \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (80)$$

где  $n_{ri}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) — компоненты единичного вектора  $\mathbf{n}_r$  (78), задающего ориентацию оси поворота.

Выбирая те же, что и в [74], плоскость  $(111)_\gamma$  и направления  $[1\bar{1}0]_\gamma$ ,  $[2\bar{1}1]_\gamma$ ,  $[10\bar{1}]_\gamma$ , лежащие в этой плоскости, после действия бейновской деформации  $\hat{B}_{bas}$  и поворота  $\hat{\Phi}$  получаем результаты, приведенные во второй колонке табл. 3. В первой колонке приведены экспериментальные данные [74], а в третьей — данные кристаллографических расчетов [5].

Таблица 3

**Сравнение ориентационных соотношений, найденных в приближении продольных волновых пучков, с результатами измерений [74] и кристаллографического расчета [5]**

Соответственные плоскости и направления	Эксперимент	Результаты расчета ОС	
	Данные Г—Т [74]	Настоящая работа	Данные В—Л—Р [5]
$(111)_\gamma \wedge (101)$	$\approx 1^\circ$	$\approx 0.2145^\circ$	$\approx 0.25^\circ$
$[1\bar{1}0]_\gamma \wedge [1\bar{1}\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2.5^\circ$	$\approx 2.9389^\circ$	$\approx 3^\circ$
$[\bar{2}11]_\gamma \wedge [10\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2^\circ$	$\approx 1.7398^\circ$	$\approx 1.72^\circ$
$[\bar{1}01]_\gamma \wedge [\bar{1}11]_\alpha$	$\approx 6.5^\circ$	$\approx 6.3880^\circ$	$\approx 6.32^\circ$

### 6.2.2. Соотношение компонентов регулярной слоистой структуры, оптимальное для образования двойниковой структуры

Прежде всего напомним, что, в силу когерентности сочленения основной и дополнительной компонент регулярной слоистой структуры, из (44) следует

$$\beta = -\operatorname{tg}\varphi_{\text{com}}/\operatorname{tg}\varphi_{\text{bas}} = |\operatorname{tg}\varphi_{\text{com}}|/|\operatorname{tg}\varphi_{\text{bas}}|. \quad (81)$$

Опираясь снова на принцип наибыстрейшей трансформации решетки при мартенситном превращении, естественно считать, что при оптимальном для образования двойниковой структуры значении  $\beta = \beta_{\text{tw}}$  деформация растяжения  $\varepsilon_{1B}$  в основных компонентах регулярной слоистой структуры, окаймляющих дополнительную компоненту, обеспечивают реализацию бейновской деформации сжатия  $\varepsilon_{2B}$  в дополнительной компоненте. Возникающая при этом в ортогональном направлении избыточная деформация растяжения  $\varepsilon_{1\text{com}} = |\varepsilon_{2B}| > \varepsilon_{1B}$  в дополнительной компоненте регулярной слоистой структуры соответствует на первом этапе деформации (на масштабе времени  $T_s$ ) недостающей величине деформации сжатия в основных компонентах. Деформационный баланс между компонентами двойниковой структуры окончательно устанавливается в ходе второго этапа деформации (масштаб времени  $T_l$ ) при достижении деформацией сжатия в направлении  $n_{2l}$  своего финишного значения  $|\varepsilon_{2l}|_f$ . Следовательно, к концу первого этапа (масштаб времени  $T_s$ ) параметр  $\Gamma$  в основной и дополнительной компонентах принимает значения

$$\Gamma_{\text{bas}} = \frac{1 + \varepsilon_{1B}}{1 - \varepsilon_{1B}}, \quad \Gamma_{\text{com}} = \Gamma_{\text{tw}} = \frac{1 + |\varepsilon_{2B}|}{1 - |\varepsilon_{2B}|}. \quad (82)$$

Из (45) и формулы для тангенса суммы углов при учете (82) и  $\alpha = 1$  (см. также (47)) следует

$$\operatorname{tg}\varphi_{\text{bas}} = \varepsilon_{1B}, \quad \operatorname{tg}\varphi_{\text{com}} = \varepsilon_{2B}. \quad (83)$$

Тогда из (81) и (83) сразу получаем

$$\beta = \beta_{\text{tw}} = \frac{|\varepsilon_{2B}|}{\varepsilon_{1B}}. \quad (84)$$

Если считать, что небольшая часть бейновского сжатия в двойниковой компоненте реализуется на масштабах времени, превышающих  $T_s$ , за счет преобладающего (не скомпенсированного вкладом от растяжения в направлении  $\mathbf{n}_{1\parallel}$ ) действия деформации сжатия, то допустимы и значения  $\beta$ , несколько меньшие, чем  $\beta_{tw}$ . Действительно, из (26) видно, что вектор  $\mathbf{n}_{2\parallel}$  составляет с осью  $[010]_\gamma$  угол около  $73^\circ$ , и, значит, даже после первого поворота на угол  $\phi_s \approx 6.9^\circ$ , угол с осью  $[010]'_\gamma$  составляет  $\approx 80^\circ$ . Тем не менее для решетки с заданной тетрагональностью  $t$  значение  $\beta_{tw}$  можно рассматривать как близкое к минимально допустимому  $(\beta_{tw})_{min}$ . Вместе с тем, как обсуждалось ранее, величина  $\beta$  определяется пороговой деформацией на стадии зарождения, которая может изменяться при изменении температуры и упругих полей дефектов в области зарождения. Поэтому при возрастании степени переохлаждения вполне возможны значения  $\beta > (\beta_{tw})_{min}$ . Ясно, что допустимо возрастание  $\beta$  (相伴隨的) увеличением деформации сжатия в двойниковой компоненте), еще совместимое с границей, задаваемой пределом упругости для рассматриваемого пространственного масштаба. С учетом того, что рассматривается масштаб порядка периода двойниковой структуры, т. е. десятков нанометров, можно полагать (см. замечание в конце п. 3.1), что предел упругого деформирования  $(\varepsilon_{el})_{nano}$  удовлетворяет неравенствам

$$10^{-2} \leq (\varepsilon_{el})_{nano} < 10^{-1}. \quad (85)$$

Таким образом, естественно считать, что

$$\frac{|\varepsilon_{2B}|}{\varepsilon_{1B}} \leq \beta_{tw} \leq \frac{|\varepsilon_{2B}| + (\varepsilon_{el})_{nano}}{\varepsilon_{1B}}. \quad (86)$$

Допустим для оценки, что  $(\varepsilon_{el})_{nano} \approx 10^{-2}$ . Тогда для сплава Fe—22Ni—0.8C добавление деформации сжатия  $(\varepsilon_{el})_{nano} \approx 10^{-2}$

увеличит отношение  $\beta$  от  $(\beta_{tw})_{min} = \frac{|\varepsilon_{2B}|}{\varepsilon_{1B}} \approx 1.434685$  до  $(\beta_{tw})_{el} =$

$= \frac{|\varepsilon_{2B}| + (\varepsilon_{el})_{\text{nano}}}{\varepsilon_{IB}} \approx 1.517942$ , а при  $(\varepsilon_{el})_{\text{nano}} \approx 2 \cdot 10^{-2}$  имеем  $\beta_{tw} \approx 1.6012$ .

Доля двойниковой компоненты в двойниковой структуре  $\delta_{tw}$  связана с  $\beta_{tw}$  простым соотношением

$$\delta_{tw} = (\beta_{tw} + 1)^{-1}. \quad (87)$$

При  $\beta_{tw} = (\beta_{tw})_{\min} = 1.434685$  имеем  $\delta_{tw} = 0.4107$ ; при  $(\beta_{tw})_{el} \approx 1.517942$  величина  $\delta_{tw} = 0.3971$ , а при  $\beta_{tw} \approx 1.6012$  получим  $\delta_{tw} \approx 0.3844$ . При снижении тетрагональности мартенсита до единицы для  $\gamma-\alpha$  мартенситного превращения  $(\beta_{tw})_{\min} \approx 0.2/0.134 \approx 1.4925$ ,  $(\beta_{tw})_{el} \approx 0.21/0.134 \approx 1.567164$  и  $\delta_{tw} \approx 0.3895$ . Ясно, что при удвоении  $(\varepsilon_{el})_{\text{nano}} \approx 2 \cdot 10^{-2}$  получим  $(\beta_{tw})_{el} \approx 0.22/0.134 \approx 1.641791$  и  $\delta_{tw} \approx 0.3785$ . Таким образом, по нижней границе  $(\delta_{tw})_d$  наблюдаемых значений  $\delta_{tw}$  (или по верхней границе  $(\beta_{tw})_u$ ) можно оценить  $(\varepsilon_{el})_{\text{nano}}$ :

$$(\varepsilon_{el})_{\text{nano}} \geq (\beta_{tw})_u \cdot \varepsilon_{IB} - |\varepsilon_{2B}| = \frac{\varepsilon_{IB}}{(\delta_{tw})_d} - (\varepsilon_{IB} + |\varepsilon_{2B}|). \quad (88)$$

Из (87) очевидно, что граничные значения  $(\delta_{tw})_d$  диктуются величиной  $(\beta_{tw})_u$ , т. е. отношением  $\frac{|\varepsilon_{2B}|}{\varepsilon_{IB}}$ .

### 6.2.3. Ориентационные соотношения для двойниковой компоненты

Так же, как и при расчете ориентационных соотношений основной компоненты двойниковой структуры, полагаем, согласно (33) и (65),  $\mathbf{n}_s = [001]_\gamma$ ,  $\mathbf{n}_l \approx [-0.279433 \ 0.960064 \ 0.013921]_\gamma$  и  $\varphi_l = \varphi_l^{\text{ef}} \approx -5.03029^\circ$ . Однако в качестве угла  $\varphi_s$ , согласно (81), следует брать

$$\varphi_s = (\varphi_s)_{tw} = -\arctg(\beta_{tw} \tg \varphi_{\text{bas}}), \quad \varphi_{\text{bas}} = \varphi_{\text{sf}} \approx 6.849025^\circ, \quad (89)$$

где  $\beta_{tw}$  выбирается из интервала значений  $(\beta_{tw})_{\min} \leq \beta_{tw} \leq (\beta_{tw})_u$ . В качестве иллюстрации для случая сплава Fe—22Ni—0.8C вы-

Таблица 4

**Ориентационные соотношения для двойниковой компоненты  
тонкой двойниковой структуры,  
найденные в приближении чисто продольных волн, для двух значений  $\beta_{tw}$**

Результаты расчета ориентационных соотношений в приближении продольных волн			
Соответственные плоскости и направления	Основная компонента	Двойник при $\beta_{tw} \approx 1.435$	Двойник при $\beta_{tw} = 1.5$
$(111)_\gamma \wedge (101)_\alpha$	$\approx 0.2145^\circ$	$\approx 0.2218^\circ$	$\approx 0.2037^\circ$
$[1\bar{1}0]_\gamma \wedge [1\bar{1}\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2.9389^\circ$	$\approx 2.7092^\circ$	$\approx 2.9307^\circ$
$[\bar{2}11]_\gamma \wedge [10\bar{1}]_\alpha$	$\approx 1.7398^\circ$	$\approx 3.1035^\circ$	$\approx 3.3306^\circ$
$[\bar{1}01]_\gamma \wedge [\bar{1}11]_\alpha$	$\approx 6.3880^\circ$	$\approx 7.3613^\circ$	$\approx 7.5865^\circ$

берем  $\beta_1 = (\beta_{tw})_{min} \approx 1.434685$  и  $\beta_2 = \beta_{tw} = 1.5$ . Тогда из (89) получим

$$\varphi_s = (\varphi_s)_{tw} = \varphi_1 = -\arctg(\beta_1 \operatorname{tg} \varphi_{bas}) \approx -9.777244^\circ; \quad (90)$$

$$\varphi_s = (\varphi_s)_{tw} = \varphi_2 = -\arctg(\beta_2 \operatorname{tg} \varphi_{bas}) \approx -10.213187^\circ. \quad (91)$$

Затем из (75) и (76) для результирующего поворота имеем

$$\mathbf{n}_{rl} \approx [0.164121 \ -0.4249631 \ -0.8902082]_\gamma, \varphi_{rl} \approx 11.054659^\circ; \quad (92)$$

$$\mathbf{n}_{r2} \approx [0.160109 \ -0.4099272 \ -0.8979558]_\gamma, \varphi_{r2} \approx 11.444488^\circ. \quad (93)$$

Используя тот же набор исходных ориентировок плоскости  $(111)_\gamma$  и направлений  $[110]_\gamma$ ,  $[211]_\gamma$ ,  $[101]_\gamma$ , после действия бейновской деформации  $\hat{\mathbf{B}}_{tw}$  (см. (77)) и поворотов  $\hat{\Phi}$  (см. (79), (80)) для углов и осей поворота (90)–(93) получаем результаты, приведенные во второй и третьей колонках табл. 4. В первой колонке для удобства сопоставления приведены те же, что и во второй колонке табл. 3, расчетные данные ориентационных соотношений для основной компоненты.

### 6.3. ВЕЛИЧИНА И НАПРАВЛЕНИЕ МАКРОСДВИГА

Заметим, что при описании наблюдаемых морфологических признаков величина деформации макросдвига (в случае простого сдвига) задается  $\operatorname{tg} \varphi_e$  — отношением компоненты  $\Delta S$ , лежащей в плоскости габитуса, к толщине мартенситного кристалла (размеру кристалла в направлении  $\mathbf{n}_w = \mathbf{N}_w / N_w$ ). Ясно, что для чистого сдвига компоненту  $\Delta S$  следует относить к половине толщины кристалла.

### 6.3.1. Расчет макросдвига для недвойникованного кристалла

Рассмотрим вначале случай недвойниковых кристаллов, полагая, что условия для генерации *s*-волн не выполняются. Поскольку формирование габитусной плоскости задается *l*-волнами, естественно ожидать, что и макросдвиг развивается в соответствии с параметрами, задаваемыми управляющим волновым процессом. Возвращаясь к рис. 14, следует иметь в виду, что направление **d** одной из диагоналей прямоугольника коллинеарно разности векторов скоростей:

$$\mathbf{d} \parallel \mathbf{v}_{1l} - \mathbf{v}_{2l} = \mathbf{n}_{1l}\mathbf{v}_{1l} - \mathbf{n}_{2l}\mathbf{v}_{2l} \parallel \mathbf{n}_{1l} - \mathbf{n}_{2l}\boldsymbol{\alpha}_l, \quad (94)$$

т. е. **d** в общем случае неколлинеарно **n<sub>w</sub>** (**d**  $\parallel$  **n<sub>w</sub>** лишь при  $\boldsymbol{\alpha}_l = 1$ ). Вторая диагональ прямоугольника на рис. 14 коллинеарна векторной сумме скоростей, лежащей в плоскости габитуса, и неслучайно изображена в виде отрезка параллельного стенке «канала». Поскольку для продольных волн скорость  $\mathbf{v}_{1l}$  коллинеарна оси растяжения, а  $\mathbf{v}_{2l}$  — оси сжатия, то вектор **d'** задается направлением

$$\mathbf{d}' \parallel \mathbf{v}_{1l}(1 + \varepsilon_{1l}) - \mathbf{v}_{2l}(1 - |\varepsilon_{2l}|) = \mathbf{n}_{1l}\mathbf{v}_{1l}(1 + \varepsilon_{1l}) - \mathbf{n}_{2l}\mathbf{v}_{2l}(1 - |\varepsilon_{2l}|). \quad (95)$$

Тогда

$$\Delta\mathbf{d} = (\mathbf{d}' - \mathbf{d}) \parallel \mathbf{v}_{2l}|\varepsilon_{2l}|(\boldsymbol{\alpha}_l\mathbf{n}_{1l} + \mathbf{n}_{2l}), \Delta\mathbf{S} = \Delta\mathbf{d} - (\Delta\mathbf{d}, \mathbf{n}_{\mathbf{w}})\mathbf{n}_{\mathbf{w}}. \quad (96)$$

Подставляя  $\mathbf{n}_{\mathbf{w}} = (\mathbf{n}_{2l} - \boldsymbol{\alpha}_l\mathbf{n}_{1l})(1 + \boldsymbol{\alpha}_l^2)^{-1/2}$ ,  $(\Delta\mathbf{d}, \mathbf{n}_{\mathbf{w}}) \sim \mathbf{v}_{2l}|\varepsilon_{2l}|(1 - \boldsymbol{\alpha}_l^2) \times (1 + \boldsymbol{\alpha}_l^2)^{-1/2}$ , из (96) находим

$$\Delta\mathbf{S} \parallel (\mathbf{n}_{1l} + \mathbf{n}_{2l}\boldsymbol{\alpha}_l)2\mathbf{v}_{2l}|\varepsilon_{2l}|\boldsymbol{\alpha}_l(1 + \boldsymbol{\alpha}_l^2)^{-1}, |\Delta\mathbf{S}| \sim 2\mathbf{v}_{2l}|\varepsilon_{2l}|\boldsymbol{\alpha}_l(1 + \boldsymbol{\alpha}_l^2)^{-1/2}. \quad (97)$$

Значит, для сравнения с  $\operatorname{tg}\phi_e$  следует использовать отношение  $\operatorname{tg}\phi'_l = \frac{|\Delta\mathbf{S}|}{(\mathbf{d}, \mathbf{n}_{\mathbf{w}})}$ , и при  $(\mathbf{d}, \mathbf{n}_{\mathbf{w}}) \sim 2\mathbf{v}_{1l}\boldsymbol{\alpha}_l(1 + \boldsymbol{\alpha}_l^2)^{-1/2}$  имеем

$$\operatorname{tg}\phi'_l = \frac{|\Delta\mathbf{S}|}{(\mathbf{d}, \mathbf{n}_{\mathbf{w}})} = \boldsymbol{\alpha}_l |\varepsilon_{2l}| = \sqrt{\varepsilon_{1l} |\varepsilon_{2l}|} = \frac{\varepsilon_{1l}}{\boldsymbol{\alpha}_l}. \quad (98)$$

В приближении, заменяющем деформации, порождаемые квазипродольными волнами, чисто продольными деформациями, компонента (97) макросдвига  $\Delta\mathbf{S}$  параллельна векторной сумме скоростей  $\mathbf{v}_{2l}$  и  $\mathbf{v}_{1l}$  или, что эквивалентно, векторному про-

изведению нормали к габитусной плоскости  $\mathbf{n}_w$  на направление оси поворота  $\mathbf{n}_l = [\mathbf{n}_{2l}, \mathbf{n}_{1l}]_\gamma$ :

$$\Delta S \parallel [\mathbf{n}_{2l} \mathbf{a}_l + \mathbf{n}_{1l}]_\gamma \parallel [\mathbf{n}_w, \mathbf{n}_l]_\gamma. \quad (99)$$

Полагая для сплава Fe—22Ni—0.8C  $\mathbf{a}_l = 1.08865$  и, согласно (66),  $|\varepsilon_{2l}|_f \approx 0.18852$ ,  $|\varepsilon_{1l}|_f \approx 0.22343$ , из (45) (или (46)) и (66) находим

$$\Gamma = \frac{1 + |\varepsilon_{1l}|_f}{1 - |\varepsilon_{2l}|_f} \approx \frac{1.22343}{0.8148} \approx 1.5065,$$

$$\begin{aligned} \varphi_l &\approx \arctg 1.088651 - \arctg 0.705581 \approx \\ &\approx 47.43041^\circ - 35.8532^\circ \approx 11.5772^\circ. \end{aligned} \quad (100)$$

Из (98) при  $|\varepsilon_{1l}|_f \approx 0.22343$  и  $\mathbf{a}_l = 1.08865$  получаем

$$\operatorname{tg} \varphi'_l \approx 0.20524, \varphi'_l \approx 11.5981^\circ. \quad (101)$$

Для близкого к  $(10\ 3\ 15)_\gamma$  габитуса  $(0.533462\ 0.14318\ 0.833617)_\gamma$ , полученного из (25) перестановкой индексов, подставляя в (99) векторы  $\mathbf{n}_w = [(0.533462\ 0.14318\ 0.833617)]_\gamma$  и  $\mathbf{n}_l \approx [-0.279433\ 0.960064\ 0.013921]_\gamma$  (см. (65)), находим

$$\Delta S / |\Delta S| = [-0.798332\ -0.24036\ 0.552167]_\gamma. \quad (102)$$

Согласно экспериментальным данным [74], углу  $\Phi_e$ , задающему величину сдвига  $\operatorname{tg} \varphi_e$ , и направлению  $\Delta S_e / |\Delta S_e|$  сдвига  $\Delta S_e$  соответствуют

$$\varphi_e = 10.66^\circ, \Delta S_e / |\Delta S_e| = [-0.7315\ -0.3828\ 0.5642]_\gamma. \quad (103)$$

Хотя направление  $\Delta S / |\Delta S|$  составляет с  $\Delta S_e / |\Delta S_e|$  угол  $\approx 9.0607^\circ$ , следует иметь в виду, что ширина интервала направлений  $\Delta S / |\Delta S|$  достаточно велика. По литературным данным ранних исследований, согласно [9], эта ширина достигает  $30^\circ$ , а среднее направление сдвига для габитусов  $(10\ 3\ 15)_\gamma$  близко к  $[312]_\gamma$ . Направление  $\Delta S / |\Delta S|$  лежит в пределах указанного интервала и составляет угол около  $1.86^\circ$  со средним направлением сдвига. Поэтому, в целом, при сравнении результатов расчета с усредненными наблюдаемыми характеристиками макросдвига можно констатировать удовлетворительное согласие (продолжение обсуждения см. в п. 7.5).

### 6.3.2. Расчет макросдвига для двойникованного кристалла в приближении продольных *l*-волн

Знание соотношения объемов  $\delta_{tw}$  компонент двойника позволяет считать, что изменение произвольного вектора  $\mathbf{g} \rightarrow \mathbf{g}'$ , обусловленное усредненной по объему кристалла мартенсита деформацией Бейна, дается выражением

$$\mathbf{g}' = [(1 - \delta_{tw})\hat{\mathbf{B}}_{bas} + \delta_{tw}\hat{\mathbf{B}}_{tw}]\mathbf{g}, \quad (104)$$

где  $\hat{\mathbf{B}}_{bas}$  и  $\hat{\mathbf{B}}_{tw}$  соответствуют матрицы (77). Применяя к вектору единичной нормали к габитусной плоскости  $\mathbf{n}_w$  вначале операцию (104), а затем операцию поворота

$$\hat{\Phi}_l = \cos\varphi_l \hat{\Phi}_1 + \sin\varphi_l \hat{\Phi}_2 + (1 - \cos\varphi_l) \hat{\Phi}_3, \quad (105)$$

получаемую из (79) и (80) заменой  $\varphi_r \rightarrow \varphi_l$ , находим

$$\mathbf{n}_w'' = \hat{\Phi}_l[(1 - \delta_{tw})\hat{\mathbf{B}}_{bas} + \delta_{tw}\hat{\mathbf{B}}_{tw}]\mathbf{n}_w. \quad (106)$$

Тогда вектор  $\Delta\mathbf{S}$ , лежащий в плоскости габитуса и задающий макросдвиг, получаем из (96) заменой  $\Delta\mathbf{d} \rightarrow \Delta\mathbf{n}_w = \mathbf{n}_w'' - \mathbf{n}_w$ :

$$\Delta\mathbf{S} = \Delta\mathbf{n}_w - (\Delta\mathbf{n}_w, \mathbf{n}_w)\mathbf{n}_w. \quad (107)$$

Расчетные данные для сплава Fe—22Ni—0.8C приведены в табл. 5 при трех значениях  $\delta_{tw}$ , наименьшее из которых совместимо с  $(\varepsilon_{e1})_{nano} \approx 0.02$ , а среднее — с  $(\varepsilon_{e1})_{nano} \approx 0.01$ .

Таблица 5  
Расчетные параметры макросдвига для двойникованного кристалла  
в приближении продольных *l*-волн для трех значений доли  
двойниковой компоненты  $\delta_{tw}$

$\delta_{tw}$	0.4107	0.3971	0.3844
$\beta$	1.4347	1.5179	1.6012
$\frac{\Delta\mathbf{S}}{ \Delta\mathbf{S} }$	-0.812162	-0.813595	-0.814886
	-0.188564	-0.182606	-0.177118
	0.552120	0.552013	0.551897
$\operatorname{tg}\varphi'_l =  \Delta\mathbf{S} $	0.171159	0.172678	0.174105
$\varphi'_l$	9.7126°	9.7971°	9.8764°
$\frac{\Delta\mathbf{S}}{ \Delta\mathbf{S} } \wedge \frac{\Delta\mathbf{S}_e}{ \Delta\mathbf{S}_e }$	12.0995°	12.4480°	12.7688°

При сравнении с данными (103) очевидно расхождение с экспериментальными данными в сторону снижения значений  $\operatorname{tg}\phi'_l$  и  $\phi'_l$  и возрастания угла отклонения направления  $\Delta S/|\Delta S|$  от  $\Delta S_e/|\Delta S_e|$  до  $12.7688^\circ$ .

Заметим, однако, что соответствие между направлениями  $\Delta S/|\Delta S|$  и  $\Delta S_e/|\Delta S_e|$ , как и между значениями  $\phi'_l$  и  $\Phi_e$ , может быть существенно улучшено (см. п. 6.4), если учесть квазипродольность *l*-волн.

## 6.4. РАСЧЕТ МАКРОСДВИГА И ОРИЕНТАЦИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ ДЛЯ ДВОЙНИКОВАННОГО КРИСТАЛЛА ПРИ УЧЕТЕ КВАЗИПРОДОЛЬНОСТИ *l*-ВОЛН

Напомним [65], что квадраты скоростей упругих волн являются собственными значениями, а векторы поляризации — собственными векторами тензора Кристоффеля, получаемого для произвольного направления волновой нормали **n** упругой волны двойной сверткой единичного вектора **n** ( $|\mathbf{n}| = 1$ ) с тензором модулей упругости. Значит, при известных упругих модулях и направлении распространения **n** единичный вектор поляризации  $\mathbf{u}^0$  квазипродольной *l*-волны находится стандартным путем.

### 6.4.1. Векторы поляризации и тензоры деформации для случая квазипродольных *l*-волн

Пусть смещения  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  соответствуют плоской упругой волне:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}^0 u_0 \cos[\omega t - \mathbf{k}(\mathbf{n}, \mathbf{r})] = \mathbf{u}^0 u_0 \cos[\phi(\mathbf{r}, t)], \quad (108)$$

где  $\mathbf{k} = 2\pi/\lambda$  — волновое число;  $u_0$  — амплитуда смещений;  $\omega$  — циклическая частота;  $(\mathbf{n}, \mathbf{r})$  — скалярное произведение векторов **n** и **r**. Смещениям (108) сопоставляется тензор дисторсии

$$\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_j} = u_0 k u_i^0 n_j \sin [\phi(\mathbf{r}, t)], \quad (109)$$

пропорциональный диаде  $\mathbf{u}^0 \cdot \mathbf{n}$ . Следовательно, симметричный тензор деформации  $\hat{\varepsilon}_w$ , сопоставляемый (108), пропорционален симметризованной сумме диад:

$$\hat{\varepsilon}_w = u_0 k \frac{1}{2} (\mathbf{u}^0 \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^0) \sin [\phi(\mathbf{r}, t)]. \quad (110)$$

Легко убедиться прямой подстановкой, что единичные собственные векторы  $\zeta_{w1,2}$  тензора  $\hat{\epsilon}_w$ , лежащие в плоскости с нормалью  $[\mathbf{n}, \mathbf{u}^0]$ , коллинеарны сумме и разности векторов  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{u}^0$ :

$$\zeta_{w1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{n} + \mathbf{u}^0), \quad \zeta_{w2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{u}^0 - \mathbf{n}), \quad (111)$$

третий собственный вектор коллинеарен  $[\mathbf{n}, \mathbf{u}^0]$ . Ясно, что если значению фазы  $\phi(\mathbf{r}, t)$  в (110) отвечает  $\sin[\phi_w(\mathbf{r}, t)] > 0$ , то оси  $\zeta_{w1}$ , направленной по биссектрисе угла между  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{u}^0$ , отвечает деформация растяжения  $E_{w1}$ , а в ортогональном направлении  $\zeta_{w2}$  — меньшая по модулю деформация сжатия  $E_{w2}$ :

$$E_{w1} = u_0 k \sin[\phi_w(\mathbf{r}, t)] \frac{1}{2}[1 + (\mathbf{n}, \mathbf{u}^0)],$$

$$E_{w2} = u_0 k \sin[\phi_w(\mathbf{r}, t)] \frac{1}{2}[(\mathbf{n}, \mathbf{u}^0) - 1]. \quad (112)$$

При  $\sin[\phi(\mathbf{r}, t)] < 0$  вдоль биссектрисы угла между  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{u}^0$  действует деформация сжатия, а в ортогональном направлении — меньшая по величине деформация растяжения.

Переходя к случаю наложения пары волн, бегущих в ортогональных направлениях  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  и несущих деформации с разным знаком, следует отметить выделенный (с позиций оптимизации деформационного процесса типа «растяжение—сжатие») вариант близости ориентаций собственных осей деформаций каждой из волн, соответствующих деформации с одним знаком. В итоге результирующие оси растяжения и сжатия имеют промежуточные ориентации между главными осями (отвечающими за деформацию одного и того же типа) тензоров деформации  $\hat{\epsilon}_{w1}$ ,  $\hat{\epsilon}_{w2}$ , сопоставляемых отдельным квазипродольным волнам.

Проведенное обсуждение позволяет внести корректизы в выполненные расчеты ориентационных соотношений и макросдвига. Для этого достаточно уточнить ориентацию оси поворота  $\mathbf{n}_i$  и величину угла поворота  $\phi_i$ . Записывая уравнение Кристоффеля для нормалей (26), при использованных ранее упругих модулях для сплава Fe – 31.5 Ni находим

$$\mathbf{u}_{1/}^0 \approx [0.544884 \ 0.227057 \ -0.807184]_\gamma,$$

$$\mathbf{u}_{2/}^0 \approx [0.73776 \ 0.568754 \ 0.363631]_\gamma. \quad (113)$$

Векторы поляризации (113) отстоят от волновых нормалей  $\mathbf{n}_{1l}$  и  $\mathbf{n}_{2l}$  на углы соответственно  $27.0969^\circ$  и  $24.0823^\circ$ . Введем тензоры

$$\hat{\varepsilon}_{w1} = u_{10}k_{1l}\sin[\phi_{w1}(\mathbf{r}, t)]\frac{1}{2}(\mathbf{u}_1^0 \cdot \mathbf{n}_{1l} + \mathbf{n}_{1l} \cdot \mathbf{u}_1^0), \quad (114)$$

$$\hat{\varepsilon}_{w2} = u_{20}k_{2l}\sin[\phi_{w2}(\mathbf{r}, t)]\frac{1}{2}(\mathbf{u}_2^0 \cdot \mathbf{n}_{2l} + \mathbf{n}_{2l} \cdot \mathbf{u}_2^0). \quad (115)$$

Зафиксируем в (114) и (115) фазовые множители, полагая, например,  $\sin[\phi_{w1}(\mathbf{r}, t)] = 0.8$  и  $\sin[\phi_{w2}(\mathbf{r}, t)] = -0.8$ , задавая тем самым, во-первых, тип переносимой преимущественно деформации (растяжение в случае  $\hat{\varepsilon}_{w1}$  и сжатие в случае  $\hat{\varepsilon}_{w2}$ ) и, во-вторых, долю от максимальной деформации в волновом пучке на границах активной ячейки в пороговом режиме, нарушающем устойчивость решетки в ходе распространения управляющего волнового процесса. Для отыскания собственных векторов суммированного тензора достаточно ввести в качестве варьируемого параметра отношение  $\rho$  скалярных множителей в тензорах деформаций (114) и (115)  $\rho = -u_{20}k_{2l}/u_{10}k_{1l}$  и найти главные оси результирующего тензора

$$\hat{\varepsilon}_{rl} = \tilde{\varepsilon}_{w1} + \rho\tilde{\varepsilon}_{w2}, \quad (116)$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{w1} = (\mathbf{u}_1^0 \cdot \mathbf{n}_{1l} + \mathbf{n}_{1l} \cdot \mathbf{u}_1^0)$ ,  $\tilde{\varepsilon}_{w2} = (\mathbf{u}_2^0 \cdot \mathbf{n}_{2l} + \mathbf{n}_{2l} \cdot \mathbf{u}_2^0)$ .

#### 6.4.2. Расчет макросдвига для двойникованного кристалла при учете квазипродольности $l$ -волн

Интересно, что для волновых нормалей (26) ориентация собственных векторов тензора (116) изменяется слабо при варьировании параметра  $\rho$  в пределах  $-1 < \rho < 0$ . Примем, для определенности, как и ранее  $|pl| \approx \alpha_l^{-2}$ . Тогда для сплава Fe—22Ni—0.8C при  $\alpha_l = 1.08865$  получим  $\rho \approx 0.843767$  и собственные векторы тензора (116):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varsigma}_{r1} &\approx [0.317204 \ 0.106345 \ -0.942376]_\gamma, \\ \boldsymbol{\varsigma}_{r2} &\approx [0.845220 \ 0.418958 \ 0.331779]_\gamma, \\ \boldsymbol{\varsigma}_{r3} &\approx [0.430099 \ -0.901757 \ 0.043010]_\gamma \end{aligned} \quad (117)$$

Поскольку оси  $\boldsymbol{\varsigma}_{r1}$  и  $\boldsymbol{\varsigma}_{r2}$  задают направления растяжения и сжатия в управляющем волновом процессе, их векторное произ-

ведение задает ориентацию вектора поворота  $\mathbf{n}_l$ , совпадающего, естественно, с  $\zeta_{r3}$ :

$$\mathbf{n}_l = \zeta_{r3} \approx [0.430099 -0.901757 0.043010]_\gamma \quad (118)$$

Для оценочного расчета нового значения угла поворота  $\Phi_l$  следует установить абсолютные значения деформаций вдоль осей  $\zeta_{r1}$  и  $\zeta_{r2}$ , как это осуществлялось в п. 5.3.1. А именно: выбираем ось  $z$  вдоль  $\zeta_{r1}$ , ось  $x$  вдоль  $\zeta_{r2}$ , а ось  $y$  — вдоль  $\mathbf{n}_l = \zeta_{r3}$ ; учитываем, что направление  $[100]_\gamma$  после первого этапа деформации испытала разворот вокруг оси  $[001]_\gamma$ , так что его ориентация  $\mathbf{n}_{\theta,\varphi} = [\cos\varphi_{sf} \sin\varphi_{sf} 0]_\gamma$  составляет угол  $\varphi_{sf}$  с  $[001]_\gamma$ ; полагаем в (55)

$$\eta_{\theta,\varphi} \approx 0.9478, \eta_x = 1 - |\varepsilon_{2l}|_f, \eta_y \approx 1, \eta_z \approx 1 + (\alpha_l)^2 |\varepsilon_{2l}|_f. \quad (119)$$

Находим значения  $(\theta, \varphi)$  для направления  $\mathbf{n}_{\theta,\varphi}$  в новой системе координат  $\{xyz\}$  из скалярных произведений:

$$\cos\theta = (\zeta_{r1}, \mathbf{n}_{\theta,\varphi}), \cos\varphi = (\zeta_{r2}, \mathbf{n}_{\theta,\varphi} - \zeta_{r1}\cos\theta)/\sin\theta = (\zeta_{r2}, \mathbf{n}_{\theta,\varphi})/\sin\theta. \quad (120)$$

Тогда для сплава Fe—22Ni—0.8C при  $\varphi_{sf} \approx 6.849025^\circ$  и  $\alpha_l \approx 1.088651$  получаем

$$|\varepsilon_{2l}|_f \approx 0.0741, \varepsilon_{1l}|_f \approx 0.08782. \quad (121)$$

Используя значения (59) и полагая  $\eta_{\theta,\varphi} = 1 + \varepsilon'_{1l}|_f$ ,  $\mathbf{n}_{\theta,\varphi} = [001]_\gamma$  в той же системе координат  $\{xyz\}$  из (55) и (58) находим  $\varepsilon'_{1l}|_f$ , а затем из (53) и  $\varepsilon_{1s}|_f$ :

$$\varepsilon'_{1l}|_f \approx 0.065566, \varepsilon_{1s}|_f = \varepsilon_{1B} - \varepsilon_{1l}|_f \approx 0.12011 - 0.065566 = 0.054544. \quad (122)$$

В частности, оценка вклада  $\varepsilon_{1s}|_f$  в общую деформацию растяжения вдоль  $[001]_\gamma$  снижается до 45.41 % по сравнению с оценкой 47.38 % в п. 5.3.3.

Аналогично (62) вводим эффективную деформацию в направлении  $\zeta_{r1}$ :

$$\varepsilon_{1l}^{ef}|_f \approx \varepsilon_{1l}|_f + \varepsilon_{1s}|_f \cos^{-2}\phi, \cos\phi = (\zeta_{r1}, \mathbf{n}_z), \mathbf{n}_z = [001]_\gamma \quad (123)$$

Тогда, полагая  $\alpha_l \approx 1.088651$ , для сплава Fe—22Ni—0.8C из (45) и (46) при  $\varepsilon_{1l}^{ef}|_f \approx 0.149238$  и  $|\varepsilon_2| = |\varepsilon_{2l}|_f = 0.0741$  находим

$$\Gamma = \frac{1 + \varepsilon_{1l}^{ef}|_f}{1 - |\varepsilon_{2l}|_f} \approx 1.241212, \phi_l^{ef} \approx 6.176828^\circ. \quad (124)$$

Далее по формулам (104)—(107) при замене  $\phi_l \rightarrow \phi_l^{ef} \approx 6.176828^\circ$  для  $\delta_{tw} \approx 0.4107$  и  $\delta_{tw} \approx 0.3971$  получаем результаты, представленные в третьей и четвертой колонках табл. 6. Две сле-

**Сравнение расчетных и экспериментальных данных о макросдвиге при учете квазипродольности  $l$ -волны**

Характеристики макросдвига	Экспериментальные данные Г—Т [74]	Результаты расчета				
		Настоящая работа (квазипродольные пучки)				Данные В—Л—Р [5]
		при $\phi_l^{cf} \approx 6.176828^\circ$	при $\phi_l^{cf} \approx 5.82^\circ$	$\delta_{lw} \approx 0.4107$	$\delta_{lw} \approx 0.3971$	
$\frac{\Delta S}{ \Delta S }$		$-0.7315$	$-0.791386$	$-0.793181$	$-0.794314$	$-0.795975$
		$-0.3828$	$-0.263371$	$-0.257584$	$-0.253878$	$-0.248364$
		$0.5642$	$0.551673$	$0.551828$	$0.551916$	$0.552032$
$\tan \varphi'_l$	0.186052	0.190469	0.191898	0.18542	0.186773	
$\varphi'_l$	$10.66^\circ$	$10.7839^\circ$	$10.9949^\circ$	$10.6238^\circ$	$10.7013^\circ$	$10.71^\circ$ $10.33^\circ$
$\frac{\Delta S}{ \Delta S } \wedge \frac{\Delta S_e}{ \Delta S_e }$			$7.7050^\circ$	$8.0458^\circ$	$8.2641^\circ$	$8.5887^\circ$
						$8.6^\circ$

дующие колонки показывают, что наблюдаемое значение компоненты макросдвига, лежащей в плоскости габитуса, оказывается между вычисленными значениями, если снизить величину угла  $\phi_l^{ef}$  от  $\approx 6.18^\circ$  до  $\approx 5.82^\circ$ . Для удобства при сравнении в начале табл. 6 приведены данные Гренингера—Трояно, а в конце — результаты кристаллогеометрического расчета Векслера—Либермана—Рида.

#### 6.4.3. Результаты расчета ориентационных соотношений для двойникованного кристалла при учете квазипродольности $l$ -волны

При внесении корректив в расчеты ориентационных соотношений необходимо в формулах (75) и (76) для характеристик результирующего поворота использовать в качестве вектора  $\mathbf{n}_l$ , согласно (118), вектор  $\zeta_{r3} \approx [0.430099 -0.901757 0.043010]_y$ , а в качестве  $\phi_l$ , согласно (124), величину  $\phi_l^{ef} \approx 6.176828^\circ$ . Тогда, сохраняя ориентацию оси  $\mathbf{n}_s = [001]_y$  и значения углов поворота  $\phi_s = (\phi_s)_{bas} = \phi_{sf} \approx 6.849025^\circ$  для основной компоненты двойниковой структуры и, согласно (90),  $\phi_s = (\phi_s)_{lw} = \phi_1 = -\arctg(\beta_1 \tan \varphi)_{bas} \approx -9.777244^\circ$  — для двойниковой компоненты, находим характеристики результирующих поворотов:

$$(\mathbf{n}_r)_{bas} \approx [0.2464676 -0.6077496 0.7549134]_y, (\phi_r)_{bas} \approx 9.415759^\circ; \quad (125)$$

$$(\mathbf{n}_r)_{lw} \approx [0.2757396 -0.4702175 -0.8383695]_y, (\phi_r)_{lw} \approx 11.334005^\circ. \quad (126)$$

Таблица 7

**Расчетные данные об ориентационных соотношениях  
при учете квазипродольности  $l$ -волны и экспериментальные данные [74]**

Результаты расчета ОС для квазипродольных волн				Эксперимент
Соответственные плоскости и направления	Основная компонента	Двойник при $\delta_{tw} = 0.4107$	Двойник при $\delta_{tw} = 0.3971$	Данные Г—Т [74]
$(111)_\gamma \wedge (101)_\alpha$	$\approx 1.3108^\circ$	$\approx 1.3257^\circ$	$\approx 1.3095^\circ$	$\approx 1^\circ$
$[1\bar{1}0]_\gamma \wedge [\bar{1}1\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2.4319^\circ$	$\approx 2.2201^\circ$	$\approx 2.4241^\circ$	$\approx 2.5^\circ$
$[\bar{2}\bar{1}1]_\gamma \wedge [\bar{1}0\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2.3089^\circ$	$\approx 2.7476^\circ$	$\approx 2.8755^\circ$	$\approx 2^\circ$
$[101]_\gamma \wedge [\bar{1}11]_\alpha$	$\approx 6.9810^\circ$	$\approx 6.9740^\circ$	$\approx 7.1578^\circ$	$\approx 6.5^\circ$

Выполнив далее ту же последовательность операций, что и в пп. 6.2.1, 6.2.3, получим результаты, приведенные в первой и второй колонках табл. 7, в третьей колонке для сравнения даны результаты Гренингера—Трояно.

Отметим, что учет квазипродольности  $l$ -волны улучшает согласие с экспериментальными данными о близости разориентировки плоскостей  $(111)_\gamma \wedge (101)_\alpha \approx 1.31^\circ$  к  $1^\circ$  для свежеобразованного мартенсита, а при  $\delta_{tw} = 0.3971$  разориентировки плоскостей и направлений основной и двойниковой компонент, входящих в общие ориентационные соотношения с аустенитом, оказываются меньше сотой доли градуса и незначительно отклоняются от наблюдаемых ориентировок.

Интересно, что, как и при оценке макросдвига, небольшим снижением угла  $\Phi_l^{ef}$  от  $\approx 6.18^\circ$  до  $\approx 5.82^\circ$  можно дополнительно уменьшить отличие расчета от наблюдаемого значения разориентировки плоскостей  $(111)_\gamma \wedge (101)_\alpha$ . Соответствующие результаты приведены в табл. 8.

Таблица 8

**Расчетные данные об ориентационных соотношениях  
при учете квазипродольности  $l$ -волны и снижением значении угла  $\Phi_l^{ef} \approx 5.82^\circ$**

Соответственные плоскости и направления	Основная компонента	Двойник при $\delta_{tw} = 0.4107$	Двойник при $\delta_{tw} = 0.3971$
$(111)_\gamma \wedge (101)_\alpha$	$\approx 0.9867^\circ$	$\approx 0.9800^\circ$	$\approx 0.9841^\circ$
$[1\bar{1}0]_\gamma \wedge [\bar{1}1\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2.3499^\circ$	$\approx 2.1243^\circ$	$\approx 2.3417^\circ$
$[\bar{2}\bar{1}1]_\gamma \wedge [\bar{1}0\bar{1}]_\alpha$	$\approx 2.3440^\circ$	$\approx 2.5964^\circ$	$\approx 2.7531^\circ$
$[101]_\gamma \wedge [\bar{1}11]_\alpha$	$\approx 7.0210^\circ$	$\approx 6.8360^\circ$	$\approx 7.0309^\circ$

**Глава 7****ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ****7.1. РОЛЬ УЧЕТА КВАЗИПРОДОЛЬНОСТИ *l*-ВОЛН**

Сравнение расчетов для макросдвига и ориентационных соотношений с экспериментальными результатами (см. табл. 6—8) указывает на приемлемое соответствие, особенно если учесть, что экспериментальные данные имеют погрешности и относятся к кристаллам мартенсита с габитусами {10 3 15}<sub>γ</sub>, наблюдаемыми в Fe—22Ni—0.8C, а при расчетах использован набор упругих модулей для сплава Fe—31.5Ni, являющихся, строго говоря, модельными значениями для него (кроме того, для сплава Fe—31.5Ni тетрагональность  $t \approx 1$ ). Таким образом, наблюдаемые макросдвиг и ориентационные соотношения совершенно естественно объясняются как следствие развития деформации решетки в стесненных условиях после потери устойчивости, вызванной распространяющимся управляемым волновым процессом. Причем учет квазипродольного характера *l*-волн играет существенное значение при уточнении количественного описания, поскольку рассчитанные углы между векторами поляризации и волновыми нормалями для *l*-волн, как видно из сравнения (113) и (26), составляют  $\approx 27^\circ$  и  $\approx 24^\circ$ . В результате оси деформации  $\zeta_{r1}$  и  $\zeta_{r2}$ , переносимой управляемым волновым процессом (см. формулу (117)), отклоняются от волновых нормалей на углы, превышающие  $10^\circ$ .

**7.2. РОЛЬ *s*—*l*-ЯЧЕЕК В ФОРМИРОВАНИИ ДВОЙНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ**

Проведенный анализ свидетельствует о том, что периодическая двойниковая структура возникает при обязательном возбуждении *s*—*l*-ячеек, имеющих форму прямоугольных параллелепипедов с ребрами вдоль трех ортогональных осей

$<001>$ . Два коротких ребра равны и имеют размер  $d_s \leq \lambda_s/2$ , а третье имеет размер  $d_l \leq \lambda_l/2$ , причем  $d_l \gg d_s$ . Периодическая двойниковая структура может формироваться как при наличии исходной периодической структуры статических (либо «дышащих»)  $s-l$ -ячеек, так и в отсутствие подобной структуры. В действительности достаточно возникновения единственной активной  $s-l$ -ячейки, соответствующей «тонкой настройке» пороговых деформаций, — условию согласованного действия  $s$ - и  $l$ -волн, чтобы обеспечить периодическое воспроизведение активной  $s-l$ -ячейки в области фронта управляющего волнового процесса. Этот чисто динамический вариант представляется наиболее универсальным. Однако его реализация предполагает действие механизма генерации не только  $l$ -волн, но и существенно более коротких  $s$ -волн, поэтому двойникование типично для области низких температур, когда снижается вклад в затухание фононов, обусловленный фононным ангармонизмом.

### 7.3. О СРАВНЕНИИ С ДАННЫМИ РАСЧЕТОВ КРИСТАЛЛОГЕОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Напомним, что кристаллогеометрический анализ не претендует на выяснение полной физической картины развития превращения, а нацелен только на феноменологическое описание наблюдаемых макроскопических морфологических признаков. Приведенные в табл. 6—8 данные позволяют утверждать, что результаты, полученные в рамках динамической теории применительно к расчету морфологии, по крайней мере, не уступают кристаллогеометрическим. Близость динамического и кристаллогеометрического описаний характерна для случаев, где представление о габитусной плоскости как инвариантном объекте (предложенное в качестве основного постулата в кристаллогеометрическом подходе) приблизительно соответствует наблюдаемой ситуации (например при описании габитусов  $\{10\bar{3}15\}$ , двойникованного мартенсита). Однако габитусная плоскость совсем не обязательно является инвариантной. Собственно, это обстоятельство учитывалось уже в работах [6—8], что позволило воспользоваться дополнительным дилатационным параметром для улучшения соответствия с экспериментальными данными (см. данные Б—М в табл. 9). В динамической теории природа возникновения габитусной

плоскости связана с быстро протекающим управляющим волновым процессом, отражающим характер пороговой деформации. В динамической теории допустимы и варианты однотипной деформации вдоль ортогональных осей. Разумеется, реализация подобных вариантов возможна при небольших уровнях деформаций, т. е. для фазовых переходов первого рода, близких ко второму роду (например при  $B_2\rightarrow R$ -превращении в сплавах на основе никелида титана [78]).

Следует подчеркнуть, что при распространении волн переключения по метастабильно устойчивой среде (переохлажденному аустениту), способной выделять избыточную (в условиях отклонения от точки равновесия фаз) энергию, выигрывает физический процесс, обладающий наибольшей скоростью. Именно такие процессы, инициирующие деформацию Бейна, характеризуемую кратчайшими путями смещения атомов, и задает управляющий волновой процесс, включающий согласованное распространение коротковолновых и относительно длинноволновых продольных и квазипродольных смещений.

Быстро опустошая энергетический ресурс, такой материальный носитель пороговой деформации оказывается вне конкуренции. Не случайно, поэтому, что для заведомо более медленных потенциально возможных носителей сдвиговых схем деформации, предполагающих участие поперечных волн, не остается энергетических ресурсов. Так, установленные в данной работе ориентации осей поворота превращающейся решетки кардинально отличаются от предполагаемых в двухсдвиговой схеме Курдюмова—Закса поворотов вокруг осей симметрии второго и третьего порядка. Разумеется, в отсутствие  $s$ -волн реализация  $\gamma\rightarrow\alpha$  мартенситного превращения может сопровождаться подобными поворотами, которые будут инициироваться управляющими волновыми процессами, соответствующими особенностям превращения. Так, при формировании кристаллов реичного мартенсита пара волн, бегущих вблизи осей симметрии четвертого и второго порядка и несущих пороговую деформацию, будет инициировать поворот с осью вблизи оси второго порядка [79], ортогональной волновым нормальм, приводя к материальным ориентационным соотношениям, близким к ориентационным соотношениям Нишиямы. При варианте же наибыстрейшей трансформации плоскости  $(111)_\gamma$ , управляющий волновой процесс будет инициировать поворот с осью вблизи оси третьего порядка [64], приводя к

Электронный архив УГЛТУ

материальным ориентационным соотношениям, близким к ориентационным соотношениям Курдюмова—Закса. Кроме того, для старта рассмотренных выше управляющих волновых процессов достаточно отдельных дислокаций, типичных для симметрии решетки исходной фазы, нарушающих своими упругими полями исходную симметрию и снижающих межфазный барьер.

#### **7.4. ВОЗМОЖНЫЕ ОТЛИЧИЯ МИКРОРЕЛЬЕФА, СВЯЗАННОГО С КОМПОНЕНТАМИ ДВОЙНИКОВЫХ СТРУКТУР**

Прежде всего подчеркнем, что до сих пор в нашем рассмотрении двойники превращения не отождествлялись с кристаллографическими двойниками ОЦК (или ОЦТ)-решетки. Более того, действуя на вектор нормали к плоскости  $(110)_\gamma$ , ортогональной к плоскости  $(110)_\alpha$ , переходящей в плоскость двойникования  $(112)_\alpha$ , операциями бейновского деформирования и поворотами для основной и двойниковой компонент двойниковой структуры, легко найти угол на микрорельефе между нормалями к граничащим плоским участкам микрорельефа двойниковой структуры и сравнить этот угол с углом для микрорельефа при идеальном кристаллографическом двойниковании. Напомним, что для ОЦТ-решетки с тетрагональностью  $t$  величина двойникующего механического сдвига

$$\operatorname{tg}\phi_{tw\alpha} = (2 - t^2) / t\sqrt{2}. \quad (127)$$

Например, для деформации двойникующего сдвига относительно основной компоненты ОЦК-решетки при  $t = 1$  из (127) следует  $\operatorname{tg}\phi_{tw\alpha} = 1/\sqrt{2} \approx 0.707$  и  $\phi_{tw\alpha} \approx 35.2644^\circ$ , а для Fe—22Ni—0.8C при  $t = 1.045$  получаем  $\operatorname{tg}\phi_{tw\alpha} \approx 0.614388$ , или  $\phi_{tw\alpha} \approx 31.5660^\circ$ . Если сохранять за двойниками превращения возможность несовпадения с механическими двойниками, то вычисленное значение  $\Phi_{tw\alpha}$  при учете квазипродольности  $l$ -волн составляет  $\Phi_{tw\alpha} \approx 33.7029^\circ$ , превышающее приблизительно на  $2.14^\circ$  величину угла, ожидаемого на основе стандартной схемы механического двойникования ОЦТ-решетки. Разумеется, какого-то абсолютного запрета на совпадение двойников превращения с кристаллографическими двойниками нет. Однако для свежеобразованного мартенсита, возникающего со сверхзвуковой скоростью

в области низких температур, релаксационные процессы могут запаздывать. Поэтому представляет интерес прецизионное сканирование микрорельефа свежеобразованной поверхности мартенситного кристалла для измерения угла между граничащими плоскими участками микрорельефа двойниковой структуры. Заметим, что при кристаллогеометрическом описании идеальность когерентного сопряжения компонент двойниковой структуры и его идентичность с механическим двойникованием постулируются, а долевое содержание компонент двойниковой структуры находится из требования макроскопической инвариантности габитусной плоскости.

## 7.5. СВОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ О ДВОЙНИКОВАННЫХ $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ -КРИСТАЛЛАХ

В табл. 9 содержится сводная информация, причем результаты расчетов на базе динамической теории, приведенные в последней колонке, даются без использования возможностей варьирования угла  $\Phi_l^{ef} \approx 6.176828^\circ$  и соотношения компонент двойниковой структуры  $\delta_{tw} = 0.4107$ , т. е. данные об ориентационных соотношениях для основной компоненты двойниковой структуры взяты из первой колонки табл. 7, а о макросдвиге — из второй колонки табл. 6. Знаком \* отмечены результаты проведенного нами пересчета данных о макросдвигах в [8] (направление  $d = [-0.21017 -0.61850 0.75715]_y$ , величина 0.19144) и в [80] (направление  $d = [-0.1761 -0.6886 0.7034]_y$ , величина 0.1915) в составляющие макросдвига вдоль габитусной плоскости. Включение, наряду с результатами пионерской работы [74], более поздних экспериментальных данных [80], полученных на том же сплаве Fe—22Ni—0.8C, демонстрирует, что направление макросдвига в [80] существенно ближе к расчетным данным по сравнению с [74]. В настоящее время интервал измеряемых направлений макросдвига двойниковых кристаллов с габитусами, близкими к  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma - \{259\}_y$ , укладывается в  $6-7^\circ$  (для сравнения напомним, что на ранних этапах исследования [9] указывался разброс результатов в пятикратнопревышающем интервале). Разумеется, дальнейшее сужение интервала направлений макросдвига маловероятно, поскольку исследуются кристаллы с близкими, но различными габитусами, и, следовательно, речь идет уже не о разбросе направлений макросдвига, а о спектре направлений, однозначно связанных с полным набором макроскопических признаков. До-

Таблица 9

**Сводная информация о морфологических признаках  
двойникованных  $\{3\bar{1}15\}_{\gamma}$ -кристаллов**

Характеристика	Эксперимент		Теоретический анализ		
	Г—Т [74]	D—B [80]	B—L—P [5]	B—M [8]	Настоящая работа
Габитусная плоскость (ГП)	0.5472	0.5481	0.5691	0.55102	0.533462
	0.1642	0.1748	0.1783	0.18726	0.14318
	0.8208	0.8180	0.8027	0.81321	0.833617
Угол между $(\Gamma\bar{\Pi})_t$ и $(\Gamma\bar{\Pi})_{\Gamma-T}$			$\approx 1.728^\circ$	$\approx 1.284^\circ$	$\approx 1.509^\circ$
Ориентационные соотношения					
$(111)_{\gamma} \wedge (101)_{\alpha}$	$\approx 1^\circ$	$\approx 1^\circ$	$\approx 0.25^\circ$	$\approx 0.2^\circ$	$\approx 1.3108^\circ$
$[1\bar{1}0]_{\gamma} \wedge [1\bar{1}\bar{1}]_{\alpha}$	$\approx 2.5^\circ$	$\approx 2.5^\circ$	$\approx 3^\circ$	$\approx 2.7^\circ$	$\approx 2.4319^\circ$
$[\bar{2}11]_{\gamma} \wedge [10\bar{1}]_{\alpha}$	$\approx 2^\circ$		$\approx 1.72^\circ$	$\approx 1.9^\circ$	$\approx 2.3089^\circ$
$[\bar{1}01]_{\gamma} \wedge [\bar{1}11]_{\alpha}$	$\approx 6.5^\circ$		$\approx 6.32^\circ$	$\approx 6.6^\circ$	$\approx 6.9810^\circ$
Угол макросдвига	$10.66^\circ$	* $10.69^\circ$	$10.33^\circ$ $10.71^\circ$	* $10.5395^\circ$	$10.7839^\circ$
Направление макросдвига	-0.7315 -0.3828 0.5642	* -0.7914 -0.2083 0.5747	-0.7660 -0.2400 0.5964	* -0.769969 -0.261645 0.581970	-0.791386 -0.263371 0.551673
$\Delta S \wedge \Delta S_{\Gamma-T}$			$\approx 8.6^\circ$	* $\approx 7.3702^\circ$	$\approx 7.7050^\circ$
$\Delta S \wedge \Delta S_{D-B}$			* $\approx 2.6081^\circ$	* $\approx 4.2575^\circ$	$\approx 3.4243^\circ$

полнительно отметим, что с позиций динамической теории вариации управляющего волнового процесса обусловлены вариациями локальных условий зарождения. Особенно это касается зарождения в неоднородных упругих полях дислокационных петель, поскольку даже при одних и тех же векторе Бюргерса и отрезке петли, дающем основной вклад в упругое поле, играет роль характер петли (скользящая или призматическая). В свою очередь, существен и тип призматической петли: ограничивает она избыточный внедренный материал или соответствует недостающему материалу (дефекту вычитания). Кроме того, при одной и той же плоскости петли сказываются различия в ориентациях линий, образующих ее периметр. Таким образом, при динамическом подходе наблюдаемое распределение ориентировок, «раз-

брос», габитусных плоскостей следует рассматривать как признак, отражающий информацию о локальных упругих полях в области зарождения.

Касаясь еще раз вопроса об ориентационных соотношениях, хотелось бы отметить, что авторы [74] акцентировали внимание на существовании в свежеобразованном мартенсите разориентировки плоскостей, входящих в ориентационные соотношения, на угол около  $1^\circ$ . В [74] установлено, что снятие этой разориентировки происходит только после термообработки (выдержки системы при повышенных температурах). Заметим, что такой же величины разориентировка наблюдалась в [81] для мартенсита деформации.

## 7.6. О КРИСТАЛЛАХ С ГАБИТУСАМИ, БЛИЗКИМИ К $\{225\}_\gamma$

Наиболее сложными для анализа в кристаллографическом подходе оказались кристаллы с габитусами, близкими к  $\{225\}_\gamma$ . К обсуждавшимся выше причинам вариации условий зарождения и генетически связанными с ними вариациями управляющего волнового процесса в этом случае добавляются новые особенности.

Во-первых, при одинаковой ориентации  $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\gamma$  отрезка дислокационной петли, вносящего главный вклад в упругое поле в области зарождения, возможны две ориентации вектора Бюргерса, соответствующие краевой (при  $\mathbf{b} \parallel \langle 110 \rangle_\gamma$ ) и смешанной 60-градусной (при  $\mathbf{b} \parallel \langle 101 \rangle_\gamma$ ) ориентациям. При краевой ориентации  $\mathbf{b}$  имеются условия для возбуждения управляющего волнового процесса,  $l$ -волны которого формируют кристаллы с практически совпадающей парой индексов. Данный случай соответствует ориентациям собственных осей  $\xi_i$  тензора деформации упругого поля дислокационного центра зарождения, близким к осям симметрии  $\langle 110 \rangle_\gamma$ ,  $\langle 110 \rangle_\gamma$ ,  $\langle 001 \rangle_\gamma$ . При этом пара осей  $\xi_1$  и  $\xi_2$  должна лежать в плоскости симметрии  $\{110\}_\gamma$ . Вдоль осей  $\xi_i$  ориентируются ребра прямоугольного параллелепипеда, соответствующего области возбужденного состояния (см. рис. 1), причем длинное ребро параллельно линии дислокации. При 60-градусной ориентации  $\mathbf{b}$  управляющие волновые процессы формируют кристаллы с относительно близкими (если сравнивать разности с третьим индексом), но заметно отличающимися по величине парами индексов габитусной плоскости (условно такой вариант отразим обозначением габитуса  $\{225\}_\gamma$ , где  $2 > 2$ ). Этот случай соответствует заметным отклонениям ориентаций собст-

венных осей тензора деформации упругого поля дислокационного центра зарождения от осей симметрии  $\langle 110 \rangle_\gamma$ ,  $\langle 110 \rangle_\gamma$ ,  $\langle 001 \rangle_\gamma$ , и, главное, выходом осей  $\xi_1$  и  $\xi_2$  из плоскости симметрии  $\{110\}_\gamma$ .

Во-вторых, двойникование в случае кристаллов с габитусами, близкими к  $\{225\}_\gamma$  и  $\{252\}_\gamma$ , носит менее регулярный характер, по сравнению с анализировавшимися выше кристаллами с габитусами  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ . Это может быть связано как минимум с двумя обстоятельствами. Первое из них — формирование  $\{225\}_\gamma$ - и  $\{225\}_\gamma$ -кристаллов происходит, как правило, при температурах, более высоких, чем для кристаллов с габитусами  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ . В этом случае за счет роста затухания фононов (особенно коротковолновых) существенно ухудшается условие генерации  $s$ -волн. В качестве компенсационного фактора может выступать переход к более длинным  $s$ -волнам, что должно сопровождаться ростом толщины основной компоненты двойника. Второе обстоятельство, в наибольшей степени актуальное для  $\{225\}_\gamma$ -кристаллов, связано с механизмом снятия двухкратного вырождения по ориентациям границ между компонентами двойников превращения (см. п. 4.3). Действительно, строгому равенству пары индексов габитуса соответствует управляющий волновой процесс с волновыми нормалями (и векторами поляризации)  $l$ -волн, лежащими в плоскости симметрии  $\{110\}_\gamma$ , ортогональной к плоскости габитуса  $\{225\}_\gamma$ . Но при таких  $l$ -волнах совершенно равноправными оказываются оси  $\langle 100 \rangle_\gamma$  и  $\langle 010 \rangle_\gamma$ , в качестве претендентов на главную ось бейновского сжатия, т. е. нельзя заранее указать основную компоненту двойниковой структуры. Не снимается и вырождение по ориентациям ортогональных плоскостей  $\{110\}_\gamma$  и  $\{110\}_\gamma$ , каждая из которых может трансформироваться в плоскость  $\{112\}_\alpha$  двойникования мартенсита. Разумеется, небольшие отклонения волновых нормалей от плоскости симметрии снимают вырождение, но эти отклонения могут носить случайный характер, тогда как в случае  $\{225\}_\gamma$ -кристаллов снятие вырождения и отбор основной компоненты двойниковой структуры заранее предопределены.

Для  $\{225\}_\gamma$ -кристаллов критичной становится и возможность согласованного распространения суперпозиции  $s$ -пучков со скоростью  $\sqrt{2}v_{1s}$  вдоль оси симметрии второго порядка с  $l$ -волной, несущей деформацию сжатия. Это возможно, если скорость  $\sqrt{2}v_{1s}$  совпадает с  $v'_{2l}(\Psi)$ -проекцией на ось симметрии второго по-

рядка скорости  $l$ -волны, как это и вытекает из (36) при  $\psi = \frac{\pi}{4}$ :

$$v_{1s} = \frac{\sqrt{2}}{2} v'_{2l}(\pi/4). \quad (128)$$

Если в качестве примера использовать упругие модули для сплава Fe—31.5Ni (в ТПа)  $C_L = 0.2180$ ,  $C' = 0.0270$ ,  $C_{44}^0 = 0.1120$  ( $C_{11} = C_L + C' - C_{44} = 0.113$ ,  $C_{12} = C_{11} - 2C' = 0.059$ ), то для отношения скоростей продольных волн вдоль осей второго и четвертого порядка получаем

$$\frac{v_\Sigma}{v_\Delta} = \sqrt{(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})/2C_{11}} = \sqrt{C_L/C_{11}} \approx 1.28023. \quad (129)$$

Аналогично, для отношения скоростей продольных волн вдоль осей третьего и четвертого порядка находим

$$\frac{v_\Lambda}{v_\Delta} = \sqrt{(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/(3C_{11})} \approx 1.4153. \quad (130)$$

Поскольку для Fe—31.5Ni параметр упругой анизотропии  $A > 1$ , то (130) задает максимально возможное отношение скоростей продольных волн. Сравнение (130) и (129) с условием (128) показывает, что для сплава Fe—31.5Ni выполнение требования (128) невозможно, следовательно, невозможно и образование двойниковых кристаллов с габитусами, близкими к  $\{225\}_\gamma$ . Заметим, что кристаллы с такими габитусами в сплавах Fe—Ni не наблюдаются. По существу, можно утверждать, что возникновение регулярно двойниковых кристаллов с габитусами, близкими к  $\{225\}_\gamma$ , возможно в системах с  $A > 1$  при выполнении равенства (128), если выполняется неравенство

$$\frac{v_\Sigma}{v_\Delta} \geq \sqrt{2}. \quad (131)$$

Напомним, что вывод о повышении значений отношения скоростей  $\frac{v_\Sigma}{v_\Delta}$  в сталях по сравнению с системами Fe—Ni как

необходимого условия для формирования кристаллов с габитусами, близкими к  $\{225\}_{\gamma}$ , делался и ранее [1, 2, 48]. Остается только еще раз обратить внимание на необходимость измерения упругих модулей в системах Fe—C в области концентраций углерода (0.6—1.4) мас. % C или в других системах, для которых характерны кристаллы с габитусами, близкими к  $\{225\}_{\gamma}$ . Итак, если критерии (128) и (131) не выполняются, то сбой в регулярности двойниковой структуры неизбежен, а значит, расчеты морфологических признаков, включающие отношение компонент двойников в качестве фиксированного (для сплава заданного состава) параметра, будут расходиться с данными эксперимента (см., например, [82—85]). Как отмечалось выше, причиной сбоя может быть и срыв генерации *s*-волн за счет повышения пороговых условий генерации.

Перечисленные причины позволяют понять, почему в феноменологических кристаллогеометрических теориях для согласования с наблюдаемыми особенностями морфологии приходится использовать наряду с двойникоющим сдвигом и дополнительные сдвиги в качестве деформации при инвариантной решетке (см., например, [86, 87]). В [87] допускается модификация даже первого сдвига  $S_1$  при инвариантной решетке (рассматриваются варианты изменения плоскости сдвига вида  $(110)_{\gamma} \rightarrow (441)_{\gamma} \rightarrow (111)_{\gamma} \rightarrow (11\bar{3})_{\gamma}$ ), а для объяснения вариации наблюдаемых морфологических признаков в качестве дополнительного используется сдвиг  $S_2 \parallel (122)[221]_{\gamma}$  с величиной, меняющейся от 0 до 0.12.

## 7.7. О КРИСТАЛЛАХ С ГАБИТУСАМИ, БЛИЗКИМИ К $\{557\}_{\gamma}$

Для полноты описания динамических представлений о  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситном превращении коснемся и вопроса о формировании кристаллов пакетного мартенсита с габитусами, близкими  $\{557\}_{\gamma}$  и  $\{\bar{5}\bar{5}7\}_{\gamma}$  (аналогично обсуждавшимся габитусам  $\{225\}_{\gamma}$ , считается  $5 > \bar{5}$ ), хотя это и недвойниковые кристаллы. Зарождение таких кристаллов происходит в упругих полях тех же самых дислокационных центров зарождения [71], что и для  $\{225\}_{\gamma}$ ,  $\{\bar{2}\bar{2}5\}_{\gamma}$ -кристаллов, но при других значениях угловых координат. Причем в системах Fe—C (до 0.6 мас. % C) пакетный мартенсит доминирует, что, скорее всего, связано с невыполнением как неравенства (131), так и пороговых условий генерации для *s*-волн (из-за высокого затухания фононов при

температурах начала превращения). Интересно, что переход к конечным деформациям [79] дает аргументы в пользу изменения фазировки волн (принятой ранее в [1, 2, 48, 56, 71]) в составе управляющего волнового процесса, а именно: волна, бегущая вблизи оси симметрии четвертого порядка  $\langle 001 \rangle_\gamma$ , несет деформацию сжатия, тогда как волна, бегущая вблизи оси симметрии второго порядка  $\langle 110 \rangle_\gamma$ , несет деформацию растяжения. Для бейновской деформации должна реализоваться деформация растяжения и вдоль ортогональной оси симметрии второго порядка  $\langle 110 \rangle_\gamma$ . Ее появление после потери устойчивости исходной фазы, в конечном счете, обусловливается электронными корреляциями, восстанавливающими симметрию новой более устойчивой фазы. Инициация же потери устойчивости аустенита (за счет инициации деформации Бейна) будет более эффективной, если возбужденное состояние в форме вытянутого колеблющегося параллелепипеда будет изначально содержать и колебание в фазе растяжения вдоль длинной оси  $\langle 110 \rangle_\gamma$ , т. е. ситуация аналогична возбуждению  $s-l$ -ячейки, ответственной за формирование основной компоненты двойниковой структуры (см. п. 5.3 и обсуждение выше в п. 7.2). Заметим, что это обстоятельство может дать дополнительные аргументы для объяснения причин образования «реечной» формы отдельных кристаллов пакетного мартенсита (толщина  $d_1$ , ширина  $d_2$  и длина  $d_3$  кристаллов приблизительно соотносятся, согласно [16], как 1:3:13).

Действительно, допустим, что поперечные размеры  $\approx 0.2$  мкм и длина  $\approx 2.6$  мкм соответствуют размерам начально-го возбужденного состояния в форме вытянутого параллелепипеда. Тогда сразу можно утверждать, что период колебаний вдоль наибольшего ребра  $T_{\parallel}$  превышает приблизительно в 13 раз периоды колебаний в поперечных направлениях  $T_{\perp}$ . Благоприятная фаза растяжения вдоль длинной оси, с учетом требования превышения пороговой деформации на границе управляющего процесса, составляет порядка  $0.1 T_{\parallel} \approx 1.3 T_{\perp}$ . За это время суперпозиция продольных волн в поперечном направлении может распространиться на расстояние, совпадающее с шириной «рейки»:

$$d_2 \approx \sqrt{2} \cdot v_{\perp} (1.3 T_{\perp}) \approx 1.84 \lambda_{\perp}. \quad (132)$$

Полагая, что толщина рейки  $d_1 \approx \sqrt{2} \frac{\lambda_{\perp}}{4}$ , находим  $\lambda_{\perp} \approx 2\sqrt{2}d_1 \approx 0.566$  мкм. Тогда из (132) получаем  $d_2 \approx 1.04$  мкм,

что в долевом отношении  $\frac{d_2}{d_3} \approx \frac{1.04}{2.6} \approx 0.4$  примерно в 1.7 раза

превышает указанное в [16] отношение 3:13. Таким образом, учитывая качественный уровень оценки, можно говорить о приемлемом соответствии между картиной начального возбужденного состояния, волнового роста и соотношением размеров речного кристалла. Напомним, область упругого поля дислокационного центра зарождения, считавшаяся благоприятной для зарождения  $\{557\}_{\gamma}$ - и  $\{557\}_{\gamma}$ -кристаллов, выбиралась из условия существования слабоискаженной плоскости:  $\varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 < 0, \varepsilon_3 \approx 0$ , где  $\varepsilon_i$  — главные значения тензора деформации. Если же перейти к требованию  $\varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 < 0, \varepsilon_3 > 0$ , то угловые координаты области, благоприятной для зарождения, существенно изменяются. Конечно, для объяснения наблюданной малой ширины рейки достаточно уже отмечавшегося роста затухания фононов, срывающего генерацию волн с длинами  $\lambda_{\perp}$ . В этом отношении показательно, что ширина рейки практически близка к  $\lambda_{\perp}$ .

## 7.8. ПЕРСПЕКТИВЫ БЛИЖАЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЙ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ПРИЗНАКОВ

То обстоятельство, что малым изменением угла  $\phi_i^{\text{ef}}$  (от  $\approx 6.18^\circ$  до  $\approx 5.82^\circ$ ) можно заметно улучшить и без того удовлетворительное согласие с экспериментами [74, 80], свидетельствует об адекватности динамической теории и перспективности ее использования для обработки результатов прецизионных измерений макроскопических морфологических характеристик крупных мартенситных кристаллов в системах с надежно установленными значениями упругих модулей исходной фазы в окрестности температуры  $M_s$ . При наличии такой информации имеет смысл сразу уточнить, анализируя стадию возникновения начального состояния в упругом поле дислокации, выбор волновых нормалей, обеспечивающих с высокой точностью описание наблюдаемых габитусов. Действительно, выбранные нами для иллюстрации нормали  $n_i$  позволили описать габитусную плоскость, отклоняю-

щуюся на  $1.5^\circ$  от наблюдаемой. Ясно, что при стремлении описать угловые характеристики с точностью не хуже десятой доли градуса следует задавать исходные данные с большей точностью. Заметим, что типичная точность экспериментальных данных о морфологических признаках мартенситных кристаллов (см., например, [81—85]) не превосходит уровня десятой доли градуса (применительно к измерению ориентационных соотношений) и градуса (применительно к измерению параметров макросдвига), т. е. остается сравнимой с точностью данных работы [74].

Если в аустените создать дислокации с нетипичными ориентациями линий вдоль  $\langle 111 \rangle_\gamma$ , то возможен (см. [63, 64]) вариант, когда управляющий волновой процесс стимулирует в сверхзвуковом режиме наибыстрейшую трансформацию плотноупакованных плоскостей  $\{111\}_\gamma$  аустенита в  $\{110\}_\alpha$ -плоскости мартенсита. Последующая за управляющим волновым процессом динамическая перетасовка трансформированных плоскостей интерпретируется как дополнительный управляющий процесс согласованно действующих коротковолновых продольных и поперечных смещений. Заметим, что подобная перетасовка не оказывается на макроскопических морфологических признаках. Яркой морфологической особенностью данного варианта мартенситного превращения является ортогональность плотноупакованной плоскости  $\{111\}_\gamma$  (входящей в ориентационные соотношения) к ожидаемой габитусной плоскости  $\{5\ 13\ 18\}_\gamma$  и близость материальных ориентационных соотношений к соотношениям Курдюмова—Закса. Легко убедиться, что для обсуждавшихся ранее вариантов мартенситного превращения в ориентационные соотношения входит та из плоскостей  $\{111\}_\gamma$ , которая составляет с плоскостью габитуса наименьший угол, а ориентационные соотношения ближе к соотношениям Нишиямы (для пакетного мартенсита) или Гренингера—Трояно (для двойникованного мартенсита). Во избежание недоразумений заметим, что в [63, 64] имеется неточность: при расчете габитуса вместо скорости волны вдоль направления  $\langle 112 \rangle_\gamma$  подставлена скорость вдоль  $\langle 111 \rangle_\gamma$  в результате получен габитус, близкий к  $\{3\ 7\ 10\}_\gamma$ , отстоящий от  $\{5\ 13\ 18\}_\gamma$  на  $1.4^\circ$ .

Развитая динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов может оказаться перспективной для объяснения закономерностей, наблюдаемых при остроугольном сопряжении двойникованных кристаллов в сплавах как на основе железа, так и на основе никелида титана (см., например, [78,

88—91]), включая и механизм тонкого двойникового сочленения. Дислокационные центры зарождения, соответствующие сочленениям кристаллов с габитусами типа {3 10 15}<sub>γ</sub>, обсуждались в [92]. По крайней мере, наиболее часто наблюдаемое, согласно [89], остроугольное сочленение кристаллов с габитусами типа (3 15 10)<sub>γ</sub>, (3 10 15)<sub>γ</sub> получает естественное объяснение как следствие отражения волн, входящих в структуру управляющего волнового процесса, от плоскости (011)<sub>γ</sub>. С учетом того, что формируются ансамбли кристаллов, плоскость отражения (011)<sub>γ</sub>, скорее всего, соответствует плоскости двойникования кристалла мартенсита, возникшего раньше. Это означает, что компоненты управляющего волнового процесса испытывают отражение от регулярной последовательности плоских границ раздела между компонентами двойниковой структуры кристалла, вблизи которого локализуется остроугольный стык. Напомним, что кристаллы с габитусами (3 15 10)<sub>γ</sub>, (3 10 15)<sub>γ</sub> могут формировать зигзагообразную структуру, ограниченную парой возникших ранее кристаллов, что вполне согласуется с предлагаемым объяснением появления единичного стыка двух кристаллов.

Разумеется, как один из вариантов интерпретации тонкого сочленения двойников остается и аккомодационный механизм формирования двойников.

Как показал анализ ориентационных соотношений (см. п. 6.2.1, 6.2.3 и п. 6.4.3), учет квазипродольности волн, управляющих формированием габитусной плоскости, существенно сказывается на разориентировке плоскостей, входящих в ориентационные соотношения (разориентировка нарастает до значений, близких к 1°, и даже может превышать 1°). В этой связи целесообразно проверить, насколько учет квазипродольности волн скажется на ориентационных соотношениях недвойниковых кристаллов пакетного мартенсита с габитусами {557}<sub>γ</sub>, для которых еще в [93—95] установлены наличие шести ориентировок габитусов в пределах одного пакета и разориентировка около 1° для плоскостей, входящих в ориентационные соотношения.

Несомненный интерес представляет и анализ вариантов реализации регулярных слоистых структур при значениях  $\beta$ , заметно превышающих  $\beta_{tw}$ . Помимо уже упоминавшегося существования чередующихся мартенситных кристаллов и сильно искаженных областей аустенита, подобные механизмы могут сказываться на формировании колоний кристаллов мартенсита, включая некоторые варианты симбиоза кристаллов с разными габитусами.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

---

Проведенный анализ показывает, что формирование регулярных слоистых структур, включая образование тонкой микроструктуры двойников превращения, может в сильно переохлажденном аустените идти в сверхзвуковом режиме, подчиняясь принципу максимума скорости (и, соответственно, минимума времени) для пути мартенситной реакции.

Для случая  $\gamma\rightarrow\alpha$  мартенситного превращения в сплавах железа предпереходные структуры с большим числом пространственно упорядоченных статических и динамических  $s-l$ -ячеек, скорее всего, не реализуются. Тем не менее формирование в сверхзвуковом режиме мартенситного кристалла с тонкой структурой двойников превращения возможно, если в соответствии с условием «тонкой настройки» обеспечивается вариант периодического воспроизведения активной  $s-l$ -ячейки в центре волнового фронта  $l$ -пучка. В результате установлен механизм формирования периодической двойниковой структуры в сверхзвуковом режиме (скорость роста основной компоненты двойника в  $\sqrt{2}$  раз превышает скорость продольных волн в направлениях  $\langle 100 \rangle_\gamma$ ).

Переход от пороговых деформаций, лежащих в упругой области, к финишным деформациям с расчетом всех наблюдаемых морфологических признаков (соотношение основной и двойниковой компонент в двойниковой структуре, ориентировка габитусной плоскости, ориентационные соотношения и параметры макросдвига) при удовлетворительном согласии с экспериментальными результатами позволяют говорить о реализации завершающего этапа построения динамической теории реконструктивных мартенситных превращений. Это утверждение справедливо, по крайней мере, применительно к  $\gamma\rightarrow\alpha$  мартенситному превращению в сплавах на основе железа с размером зерна, превышающим критический [96].

Для  $\gamma\rightarrow\alpha$  мартенситного превращения, протекающего в зернах критического размера (при  $D > D_c$ ), в настоящее время можно выделить три динамических варианта скоростной реализации спонтанного (при охлаждении) превращения. Во всех случаях зарождение является гетерогенным, начальное возбужденное состояние возникает в упругих полях дислокаций, а управляющие ростом волновые процессы обеспечивают скорости роста мартен-

ситных кристаллов, превышающие скорость продольных упругих волн. В первом и втором вариантах мартенситного превращения главный вклад в упругие поля дают дислокации с типичными для аустенита линиями  $<110>_\gamma$  и  $<112>_\gamma$ . Линии  $<110>_\gamma$  ассоциируются как с недвойникованными  $\{557\}_\gamma$ - и  $\{557\}_{\gamma\alpha}$ -кристаллами, так и с нерегулярно двойникованными  $\{225\}_\gamma$ ,  $\{225\}_{\gamma\alpha}$ -кристаллами (см. достаточно подробные комментарии в пп. 7.6, 7.7). Линии  $<112>_\gamma$  ассоциируются с регулярно двойникованными тонкопластинчатыми  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ -кристаллами или центральными зонами («мидрибами») линзовидных кристаллов. Наиболее сложному динамическому механизму формирования таких кристаллов в основном и посвящена данная монография. Объединяет эти варианты то, что управляющий волновой процесс стимулирует развитие деформации Бейна и не требует последующей перетасовки плоскостей.

При нетипичных ориентациях дислокационных линий в аустените вдоль  $<111>_\gamma$  возможен и третий вариант мартенситного превращения [63, 64], когда управляющий волновой процесс стимулирует в сверхзвуковом режиме наибыструю трансформацию плотноупакованных плоскостей  $\{111\}_\gamma$  аустенита в  $\{110\}_\alpha$  плоскости мартенсита. Экспериментальная проверка предсказываемых особенностей морфологических признаков (см. п. 7.8) представляется перспективной.

Дополнительно отметим, что при размерах зерен, превышающих критический, формирование кристаллов мартенсита деформации (на стадии пластического течения) связано с носителями пороговой деформации, названных кристонами. Кристоны (носители сдвига супердислокационного типа, возникающие при контактном взаимодействии дислокаций с пересекающимися плоскостями скольжения) задают в ходе распространения ориентации габитусных плоскостей [97—99]. На рис. 16 представлена схема формирования кристона за счет взаимодействия  $n$ - и  $m$ -дислокаций с разными исходными системами скольжения. Кристонная концепция оказывается конструктивной и при описании полос сдвига с произвольной кристаллографической ориентировкой плоских границ [100—102].

В краткой качественной форме основные черты динамического подхода к описанию классического варианта реализации мартенситного превращения, характеризуемого полным набором морфологических признаков, отражены в [103]. На рис. 17 в схематической форме представлена логическая структура динамического подхода к описанию мартенситных превращений.

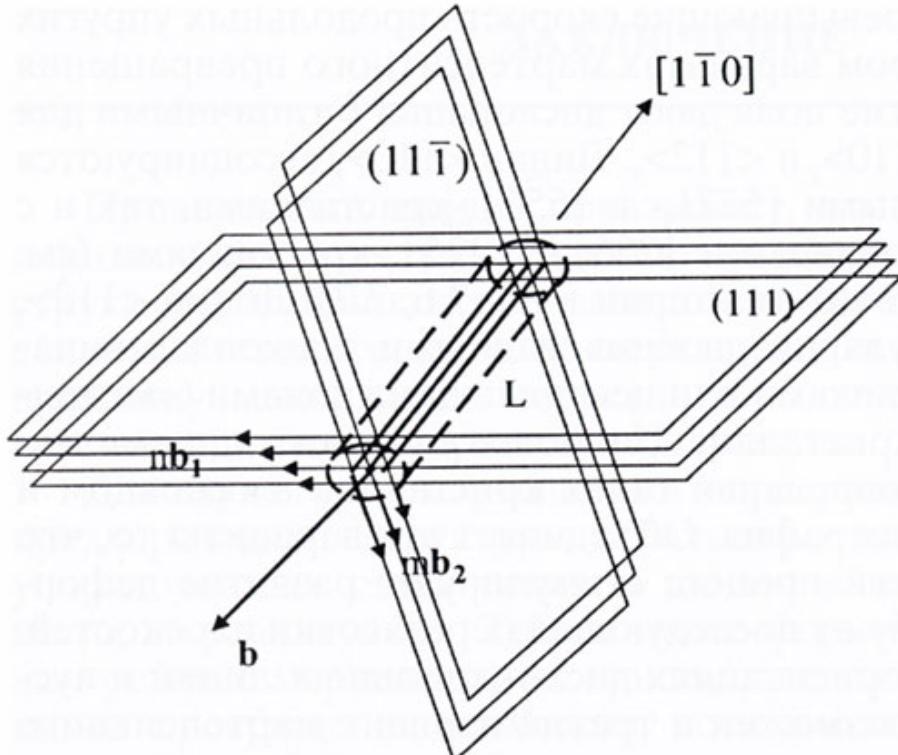


Рис. 16. Типичный для ГЦК-фазы обобщенный источник Франка—Рида кристонов, характеризуемых суммарным (суперпозиционным) вектором Бюргерса  $b \parallel nb_1 + mb_2$



Рис. 17. Узловые моменты описания мартенситной реакции в моно- и поликристаллических материалах с размерами зерен, превышающими критический размер  $D_c$

**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	1 мкм	10—100 нм	3—10 нм
Мартенсит деформации	0.1 мкм	1—10 нм	
Мартенсит аккомодационный двойниковый	20—100 нм	20—100 нм	1—3 нм
Мартенсит аккомодационный одной ориентировки	3—10 нм	3—10 нм	
Превращение зерна как целого			

Бездиффузионные спонтанные (при охлаждении) фазовые структурные превращения в отдельных малых частицах и в зернах поликристаллов, имеющих размер меньше критического, требуют отдельного анализа. Например, в нанокристаллическом состоянии (при диаметре зерен  $\leq 100$  нм) мартенситное превращение или полностью подавляется (как это имеет место в сплавах Fe—Ni), или модифицируется (как в сплавах никелида титана), утрачивая такую характеристику, как габитус, входящую в неотъемлемый набор морфологических признаков мартенсита монокристаллов и зерен с закритическим размером. Типично двойникование упорядоченной кристаллической структуры центральных областей на нозерен. Очевидно, что роль самых длинноволновых смещений теперь переходит к собственным колебаниям зерен и максимальная длина волны ограничена снизу величиной удвоенного диаметра зерна. В цепочках мелких ( $\leq 10$  нм) контактирующих зерен в принципе возможна реакция превращения зерен как целого, сопровождающаяся эстафетной передачей деформации от зерна к зерну. В работе [104] при качественном анализе возможностей мартенситного превращения в нанокристаллическом состоянии оно названо «аккомодационным». Имеется в виду как внутренняя двойниковая аккомодация, так и упомянутая межзеренная эстафетная аккомодация. В табл. 10, взятой из [104], приводится характерная иерархия пространственных масштабов. Видно, что по мере уменьшения критических размеров структуры роль «длинноволнового» смещения переходит к смещениям, игравшим роль «коротковолновых» на предшествующем масштабном уровне, что отражает существующее подобие в динамике мартенситной реакции.

Электронный архив УГЛТУ  
Список литературы

1. Кащенко М.П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ — $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа. Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. 224 с.
2. 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.
3. Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977. 240 с.
4. Счастливцев В.М., Калетина Ю.В., Фокина Е.А. Мартенситное превращение в магнитном поле. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322 с.
5. Wechsler M.S., Lieberman D.S., Read T.A. On the theory of the formation of martensite // Journal of Metals, 1953 (november). P. 1503—1515.
6. Bowles J.S., Mackenzie J.K. The crystallography of martensite transformations I // Acta Metallurgica, 1954. Vol. 2, N 1. P. 129—137.
7. Bowles J.S., Mackenzie J.K. The crystallography of martensite transformations II // Acta Metallurgica, 1954. Vol. 2, N 1. P. 138—147.
8. Bowles J.S., Mackenzie J.K. The crystallography of martensite transformations III. Face-centered cubic to body-centered tetragonal transformations // Acta Metallurgica, 1954. Vol. 2, N 3. P. 224—234.
9. Билби Б.А., Христиан И.В. Мартенситные превращения // УФН, 1960. Т. 113, № 3. С. 515—564.
10. Вейман С.М. Бездиффузионные фазовые переходы // Физическое металловедение. Т. 2. М: Металлургия, 1987. С. 365—405 с.
11. Криземент О., Гудремон З., Вефер Ф. К термодинамике аустенитно-мартенситного превращения // Фазовые превращения в стали. М.: Металлургиздат, 1961. С. 72—89.
12. Могутнов Б.М., Томилин И.А., Шварцман Л.А. Термодинамика железоуглеродистых сплавов. М.: Металлургия, 1972. С. 263—271.
13. Кауфман Л., Коэн М. Термодинамика и кинетика мартенситных превращений // Успехи физики металлов. Т. IV. М.: Металлургиздат, 1961. С. 192—289.
14. Ройтбурд А.Л. Теория формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии // УФН, 1974. Т. 113, N 1. С. 69—104.
15. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
16. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. II. Деформация. М.: МИСИС, 1997. 527 с.
17. Классен-Неклюдова М.В. Механическое двойникование кристаллов. М.: Изд-во АН СССР, 1960. 262 с.
18. Христиан Д. Теория превращений в металлах и сплавах. Т. 1. М.: Мир, 1978. 808 с.
19. Петров Ю.Н. Дефекты и бездиффузионное превращение в стали. Киев: Наук. думка, 1978. 262 с.
20. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 382 с.
21. Falk F.Z. Phys. B. Ginzburg-Landau theory of static domain walls in shape-memory alloys // Condensed Matter, 1984. Vol. 54. P. 177.
22. Falk F.Z. Phys. B. Landau theory and solitary waves in shape — memory alloys // Condensed Matter., 1984. Vol. 54. P. 159—167.
23. Barsch G.R., Horovitz B., Krumhansl J.A. Dynamical of twin boundaries in martensites // Phys. Rev. Letters, 1987. Vol. 59, № 11. P. 1251—1254.

24. *Bales G.S., Gooding R.J.* Interfacial dynamics at a first-order phase transition involving strain: dynamical twin formation // Phys. Rev. Letters, 1991. Vol. 67, № 24. P. 3412—3415.
25. *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. Vol. 5, № 12. P. 125—130.
26. *Rasmussen K., Lookman T., Saxena A. et al.* Three-dimentional elastic compatibility: twinning in martensites // arXiv: cond-mat/0001410v1 28 Jan 2000.
27. *Reid A. C.E., Gooding R.J.* Hydrodynamic description of elastic solids with open boundary conditions undergoing a phase transition // Phys. Rev. B, 1994. Vol. 50, № 6. P. 3558—3602.
28. *Rao M., Sengupta S.* Droplet fluctuations in the morphology and kinetics of martensites // Phys. Rev. Letters, 1997. Vol. 78, № 11. P. 2168—2171.
29. *Theil F., Levitas V.I.* A study of a hamiltonian model for martensitic phase transformations including microkinetic energy // arXiv: patt-sol/9811006 v1 [cond-mat. mtrl-sci] 19 Nov 1998.
30. *Fischer F.D.* Mechanics and phase transformation // Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage: Proc. EUROMAT 2000, V. I. Amsterdam: Elsevier science Ltd., 2000. P. 41—52.
31. *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.
32. *Barsch G.R., Krumhansl J.A.* Nonlinear and nonlocal continuum model of transformation precursors in martensites // Metall. Trans. A, 1988. Vol. 19A. P. 761—775.
33. *Isyumov Y.A., Laptev V.M., Syromyatnikov V.N.* Fenomenological theory of martensitic and reconstructive phase transitions // Phase transitions, 1994. Vol. 49. P. 1—55.
34. *Van Tendeloo G., Chandrasekaran M., Lovey F.C.* Modulated microstructures in  $\beta$  Cu—Zn—Al and the premartensitic phenomenon // Proceedings ICOMAT. The Japan Institute of metals, 1986. P. 868—873.
35. *Пущин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н.* Предпереходные явления и мартенситные превращения. Екатеринбург: УрО РАН, 1998. 368 с.
36. *Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н.* Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. 248 с.
37. *Easterling K.E., Thöler A.R.* The nucleation of martensite in steel // Acta Met., 1976. Vol. 24. P. 333—341.
38. *Кащенко М.П., Верещагин В.П.* Учет упругого поля прямолинейной дислокации в рамках волнового описания роста мартенсита // Изв. вузов. Физика, 1989. N 8. С. 20—23.
39. *Gröger R., Lookman T. Saxena A.* Defect-induced incompatibility of elastic strains: dislocations within the Landau theory of martensitic phase transformations // arXiv: cond-mat/08064564v1 27 June 2008.
40. *Meyer R., Entel P.* Molecular dynamics Study of Iron-Nickel Alloys // IV Europ. Simp. on martensitic transformations, Barselona, 1994 / Eds. A. Planes, J. Ortín and L. Mañosa Les edi. de physique, 1995. P. 123—128.
41. *Meyer R., Entel P.* Lattice Dynamics of Martensitic Transformations Examined by Atomistic Simulations // arXiv: cond-mat/ 9706248v1. 24 June, 1997.
42. *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, вып. 2. С. 146—157.

43. Кащенко М.П. Лазерная модель мартенситного превращения в сплавах переходных металлов // Мартенситные превращения в металлах и сплавах: Докл. Междунар. конф. «I СОМАТ-77». Киев: Наук. думка, 1979. С. 137—141.
44. Кащенко М.П., Минц Р.И. Колебательные аналоги деформации Бейна и морфология мартенсита в твердых растворах систем  $\gamma$ (Fe-Ni) // ФТГ, 1977. Т. 19, № 2. С. 329—334.
45. Кащенко М.П., Минц Р.И. Механизм мартенситного превращения, обусловленный неравновесностью электрон-фононной системы // Письма в ЖЭТФ, 1977. Т. 26, вып. 6. С. 433—435.
46. Кащенко М.П., Минц Р.И. Микроскопический механизм мартенситного превращения в системе Fe—Ni // ЖЭТФ, 1978. Т. 75, вып. 6(12). С. 2280—2289.
47. Кащенко М.П. Условия генерации волн, сопоставляемых деформации Бейна // ФММ, 1980. Т. 49, вып. 5. С. 937—946.
48. Кащенко М.П. Описание габитусных плоскостей в волновых моделях роста мартенсита. Габитусы (225), (557), (925) // Изв. вузов. Физика, 1982. N 2. С. 7—9.
49. Кащенко М.П., Эйшинский Е.Р. Определение оптимальной температуры генерации фононов неравновесными электронами в бинарных сплавах железа // ФММ, 1983. Т. 56, вып. 4. С. 681—689.
50. Кащенко М.П. Интерпретация ряда характерных морфологических признаков мартенсита систем Fe—Ni, Fe—C в модели фононного мазера // ФММ, 1984. Т. 58, вып. 5. С. 862—869.
51. Кащенко М.П., Верещагин В.П. Анализ динамических условий устойчивости решетки при реконструктивных мартенситных превращениях в модели фононного мазера // ФММ, 1984. Т. 58, вып. 3. С. 450—457.
52. Кащенко М.П., Верещагин В.П. Движение границы мартенситного кристалла в модели фононного мазера // ФММ, 1985. Т. 60, вып. 5. С. 855—863.
53. Верещагин В.П., Кащенко М.П. Принципы отбора пар электронных состояний, потенциально активных в генерации фононов // ФММ, 1986. Т. 61, вып. 2. С. 237—244.
54. Кащенко 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, вып. 1. С. 90—101.
55. 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, Coll. C8. 1995. Vol. 5.
56. Кащенко М.П., Летучев В.В., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Модель формирования пакетного мартенсита // ФММ, 1997. Т. 83, вып. 3. С. 43—52.
57. Чащина В.Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург, 2000. 139 с.
58. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Вихарев С.В., Иванов С.В. Динамические модели формирования двойниковых кристаллов при мартенситных превращениях // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 10—12 апреля 2007 г. Ч. II. СПб., 2007. С. 278—280.
59. 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.

60. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Управляющий волновой процесс и материальные ориентационные соотношения при реконструктивных мартенситных превращениях // Мат-лы XLVI Междунар. конф. «Актуальные проблемы прочности», 15—17 октября 2007 г., Витебск. Ч. 2 / Витебск, 2007. С. 99—104.
61. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. I. Управляющий процесс // ФММ, 2008. Т. 105, № 6. С. 571—577.
62. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. II. Морфология мартенсита // ФММ. 2008. Т. 106, № 1. С. 16—25.
63. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Механизм ГЦК — ОЦК мартенситного превращения с наибыстрейшей перестройкой плотноупакованных плоскостей. I. Соотношение параметров решеток и габитусные плоскости // Изв. вузов. Физика, 2008. № 7. С. 3—7.
64. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Механизм ГЦК — ОЦК мартенситного превращения с наибыстрейшей перестройкой плотноупакованных плоскостей. II. Ориентационные соотношения // Изв. вузов. Физика, 2008. № 11. С. 42—47.
65. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965. 388 с.
66. Кащенко М.П., Чащина В.Г., Вихарев С.В. Система уравнений, задающих управляющий волновой процесс при реконструктивных мартенситных превращениях // Мат-лы XLVI Междунар. конф. «Актуальные проблемы прочности». Витебск, 15—17 октября 2007 г. Витебск, 2007. С. 105—109.
67. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Соотношение пространственных масштабов при зарождении мартенсита в упругом поле дислокации. С. 242—249 // Мат-лы конф. V Междунар. науч. конф. «Прочность и разрушение материалов и конструкций» 12—14 марта 2008 г. Оренбург, 2008. Т. 2. 424 с.
68. Тяпкин Ю.Д., Пущин В.Г., Романова Р.Р., Буйнов Н.Н. Исследование структуры  $\gamma$ - и  $\alpha$ -фаз в сплавах железо—никель вблизи точки мартенситного превращения. 1. Диффузное рассеяние электронов и рентгеновских лучей // ФММ, 1976. Т. 41, вып. 5. С. 1040—1047.
69. Кондратьев В.В. О термодинамической устойчивости структурных состояний при мартенситных превращениях // ФММ, 1979. Т. 47, вып. 1. С. 102—109.
70. Панин Л.Е., Панин В.Е. Эффект «шахматной доски» и процессы массопереноса в интерфейсных средах живой и неживой природы // Физ. мезомеханика, 2007. Т. 10, № 6. С. 5—20.
71. Кащенко М.П., Нефедов А.В., Верещагин В.П., Летучев В.В. Зарождение кристаллов  $\alpha$ -мартенсита с габитусами (hh1) в упругих полях дислокационных петель // ФММ, 1998. Т. 85, вып. 4. С. 25—39.
72. Haush G., Warlimont H. Single crystalline elastic constants of ferrimagnetic centered cubic Fe—Ni invar alloys // Acta Met., 1973. V. 21, № 4. P. 400—414.
73. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Влияние неоднородности фронта управляющего волнового процесса на распределение двойников превращения в кристаллах мартенсита с габитусами типа (259) — (3 10 15) // Физика процессов деформации и разрушения и прогнозирование механического поведения материалов: Труды XXXVI Междунар. семинара «Актуальные проблемы прочности». В 2 ч. Ч. I. Витебск, 2000. С. 81—86.
74. Greninger A.B., Troiano A.R. The mechanism of martensite formation // Metals Transactions, 1949. Vol. 185. September. P. 590—598.

75. Уайт Р. Квантовая теория магнетизма. М.: Мир, 1985. 304 с.
76. Ильин А.А. Механизм и кинетика фазовых и структурных превращений в титановых сплавах. М.: Наука, 1994. 304 с.
77. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука. 440 с.
78. Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч. I. Структура, фазовые превращения и свойства. Екатеринбург: УрО РАН, 2006. 439 с.
79. Чашина В.Г. Формирование кристаллов  $\alpha$ -мартенсита с габитусами {557} // V Междунар. науч. конф. «Прочность и разрушение материалов и конструкций»: Мат-лы конф. 12—14 марта 2008 г. Оренбург, 2008. Т. 2. 424 с.
80. Dunne D.P., Bowles J.S. Measurement of the shape strain for the (225) and (259) martensitic transformations // Acta Met., 1969, Vol. 17, № 3, P. 201—212.
81. Панкова М.Н., Утевский Л.М. Об ориентационных вариантах мартенситного превращения при деформации метастабильного аустенита // ДАН СССР, 1977. Т. 236, № 6. С. 1353—1356.
82. Bowles J.S., Morton A.J. The shape strain of the (225)<sub>f</sub> martensite transformation // Acta Met., 1964. Vol. 12, № 5. P. 629—640.
83. Morton A.J., Wayman C.V. Theoretical and Experimental Aspects of the (225) austenite-martensite transformation in iron alloys // Acta Met., 1966. Vol. 14, № 11. P. 1567—1581.
84. Jana S., Wayman C.M. Crystallography of the {225}<sub>f</sub> martensite transformaton in an Fe—Mn—Cr—C alloy // Metall. Trans., 1970. Vol. 1, № 10. P. 2815—2823.
85. Muddle B.C., Krauklis P., Bowles J.S. The shape strain of the (225)<sub>f</sub> martensite transformation // Acta Met., 1976. Vol. 24, № 5. P. 371—380.
86. Wang S., Zhang X. Crystallography of ferrous {225}<sub>f</sub> martensitic transformation // Proc. ICOMAT-92. Monterey, California, USA: Monterey Institute for Advanced Studies, 1993. P. 287—292.
87. Kelly P.M. The crystallography of the {225}<sub>f</sub> martensitic transformation in steels // Ibid. P. 293—298.
88. Утевский Л.М., Панкова М.Н. Кристаллогеометрия стыков и ансамблей мартенситных кристаллов // Мартенситные превращения в сталях и сплавах. М.: Металлургия, 1981. С. 4—13.
89. Okamoto H., Oka M., Tamura I. Couplings of thin-plate martensites in an Fe—Ni—C alloy // Trans. JIM, 1978. Vol. 19. P. 674—684.
90. Wang S., Wen Y.H., Zhang X. Crystallography of self-accomodating martensite plates in Fe—Ni—C alloys // Proc. ICOMAT-92. Monterey, California, USA: Monterey Institute for Advanced Studies, 1993. P. 281—286.
91. Nishida M., Yamauchi K., Chiba A., Higashi Y. Junction plane of Ti—Ni martensite variants spear-like (111) type I twinning between <011> type II twinning // Ibid. P. 981—985.
92. Кащенко М.П., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Дислокационные центры зарождения мартенсита и парные сочленения кристаллов тонкопластинчатого мартенсита // Изв. вузов. Физика, 1994. Т. 37, № 6. С. 64—67.
93. Счастливцев В.М., Родионов Д.П., Садовский В.Д., Смирнов Л.В. Некоторые структурные особенности закаленных монокристаллов конструкционной стали, выращенных из расплава // ФММ, 1970. Т. 30, вып. 6. С. 1238—1244.
94. Счастливцев В.М. Структурные особенности мартенсита в конструкционных сталях // ФММ, 1972. Т. 33, вып. 2. С. 326—334.
95. Счастливцев В.М. Электронно-микроскопическое исследование структуры мартенсита конструкционных сталей // ФММ, 1974. Т. 38, вып. 4. С. 793—802.

96. Кащенко М.П., Чацкина В.Г. Зависимость температуры начала мартенситного превращения от размера зерна // Мат-лы конф. XLVII Междунар. конф. «Актуальные проблемы прочности», 1—5 июля 2008 г., Нижний Новгород. Ч. 1. Н. Новгород, 2008. С. 237—239.
97. Кащенко М.П., Семеновых А.Г., Чацкина В.Г. Кристонный механизм формирования  $\alpha'$  мартенсита деформации в присутствии мартенсита напряжения // Вопр. материаловедения, № 1 (29). 2002. С. 253—259.
98. Kashchenko M.P., Semenovih A.G., Chashchina V.G. Cryston model of  $\alpha$  strain induced martensite // J. Phys. IV France, 2003. № 112, p. 147—150.
99. Кащенко М.П., Семеновых А.Г., Чацкина В.Г. Кристонная модель формирования  $\alpha'$  мартенсита деформации в сплавах на основе железа // Физ. мезомеханика, 2003. Т. 6, № 3. С. 37—56.
100. Kashchenko M.P., Chashchina V.G., Semenovih A.G. The mechanism of formation of the shear bands with orientations of boundaries {hh<sub>1</sub>} in cubic crystals // Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage: Proc. EUROMAT 2000, V. I. Amsterdam: Elsevier science Ltd., 2000. P. 305—310.
101. Кащенко М. П., Семеновых А.Г., Чацкина В.Г. Кристонная модель формирования полос сдвига в кубических кристаллах с кристаллографической ориентировкой границ общего типа // Физ. мезомеханика, 2003. Т. 6, № 1. С. 95—122.
102. Кащенко М.П., Мальцева О.А., Чацкина В.Г. Стандартные ориентировки границ полос сдвига для кристаллов с ГПУ решеткой в кристонной модели // ФММ, 2005. Т. 99, № 3. С. 98—105.
103. Кащенко М.П., Чацкина В.Г. Основные принципы динамической теории реконструктивных мартенситных превращений // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2006. Т. 3, № 4. С. 67—70.
104. Кащенко М.П., Чацкина В.Г. Аккомодационное мартенситное превращение в нанокристаллическом состоянии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2008. Т. 5, № 2. С. 40—44.

**ОГЛАВЛЕНИЕ**

<b>Введение .....</b>	<b>3</b>
<b>Глава 1. Сверхзвуковое распространение управляющего волнового процесса в модели налагающихся волновых пучков с ортогональными направлениями скоростей.....</b>	<b>9</b>
<b>Глава 2. Система уравнений, задающих управляющий волновой процесс при реконструктивных мартенситных превращениях.</b>	<b>14</b>
<b>Глава 3. Динамическая модель полей смещений в предпереходном состоянии.....</b>	<b>19</b>
3.1. Упругие поля дислокаций и пространственный масштаб $\lambda$ ,.....	19
3.2. Возможные причины формирования упругих полей, задающих пространственный масштаб $\lambda$ ,.....	22
<b>Глава 4. Соотношение долей компонентов регулярной слоистой структуры для различных вариантов начального распределения потенциально активных ячеек с <math>s</math>-колебаниями.....</b>	<b>27</b>
4.1. Отбор активных ячеек при распространении $l$ -волны сжатия по решетке с «замороженными» $s$ -ячейками .....	29
4.2. Отбор активных ячеек при распространении $l$ -волны сжатия по решетке с «дышащими» $s$ -ячейками.....	33
4.3. Снятие вырождения по ориентациям границ регулярной слоистой структуры, включая двойниковую структуру, при распространении $l$ -волны сжатия.....	36
4.4. Формирование основной компоненты слоистой структуры при воспроизведении активной $s$ -ячейки в центральной области фронта $l$ -пучка.....	38
<b>Глава 5. Качественная схема этапов формирования слоистой структуры</b>	<b>43</b>
5.1. Формирование прослойки, дополнительной к основной компоненте регулярной слоистой структуры .....	43
5.2. Первый этап формирования основной компоненты двойниковой структуры, связанный с достижением финишных значений деформациями $\epsilon_{1,2s}$ .....	46
5.3. Второй этап формирования основной компоненты двойниковой структуры, связанный с достижением финишных значений деформациями $\epsilon_{1,2l}$ .....	48
<b>Глава 6. Ориентационные соотношения и макросдвиг .....</b>	<b>52</b>
6.1. Общая интерпретация возникновения ориентационных соотношений .....	52
6.2. Ориентационные соотношения для компонент двойниковой структуры на примере сплава Fe—22Ni—0.8C .....	57
6.2.1. Ориентационные соотношения для основной компоненты двойниковой структуры.....	58
6.2.2. Соотношение компонентов регулярной слоистой структуры, оптимальное для образования двой-	

никовой структуры . . . . .	59
6.2.3. Ориентационные соотношения для двойниковой компоненты . . . . .	61
6.3. Величина и направление макросдвига . . . . .	62
6.3.1. Расчет макросдвига для недвойникованного кристалла . . . . .	63
6.3.2. Расчет макросдвига для двойникованного кристалла в приближении продольных $l$ -волн . . . . .	65
6.4. Расчет макросдвига и ориентационных соотношений для двойникованного кристалла при учете квазипродольности $l$ -волн . . . . .	66
6.4.1. Векторы поляризации и тензоры деформации для случая квазипродольных $l$ -волн . . . . .	66
6.4.2. Расчет макросдвига для двойникованного кристалла при учете квазипродольности $l$ -волн . . . . .	68
6.4.3. Результаты расчета ориентационных соотношений для двойникованного кристалла при учете квазипродольности $l$ -волн. . . . .	70
<b>Глава 7. Обсуждение результатов . . . . .</b>	<b>72</b>
7.1. Роль учета квазипродольности $l$ -волн. . . . .	72
7.2. Роль $s-l$ -ячеек в формировании двойниковой структуры . . . . .	72
7.3. О сравнении с данными расчетов кристаллогеометрического анализа. . . . .	73
7.4. Возможные отличия микрорельефа, связанного с компонентами двойниковых структур. . . . .	75
7.5. Сводная информация о двойникованных $\{3\bar{1}0\bar{1}5\}_\gamma$ -кристаллах. . . . .	76
7.6. О кристаллах с габитусами, близкими к $\{225\}_\gamma$ . . . . .	78
7.7. О кристаллах с габитусами, близкими к $\{557\}_\gamma$ . . . . .	81
7.8. Перспективы ближайших исследований морфологических признаков . . . . .	83
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>86</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>90</b>

*Научное издание*

Кащенко Михаил Петрович  
Чащина Вера Геннадиевна

**ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ  
ДВОЙНИКОВАННЫХ МАРТЕНСИТНЫХ КРИСТАЛЛОВ  
ПРИ  $\gamma$ - $\alpha$ -ПРЕВРАЩЕНИИ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА**

ISBN 978-5-94984-243-0



Редактор Л.А. Урядова

Подписано в печать 25.06.2009.  
Формат 60×84 1/16. Печать офсетная. Усл. печ. л. 5,8.  
Тираж 250. Заказ 143.

Уральский государственный лесотехнический университет  
620100, Екатеринбург, ул. Сибирский тракт, 37

Типография «Уральский центр академического обслуживания».  
620219, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, 91