

ТЕОРИЯ ОБРАЗОВАНИЯ СОСУЩЕСТВУЮЩИХ АУСТЕНИТНО - МАРТЕНСИТНЫХ ФАЗ

Э.Л. Аэро*, А.Л. Корженевский

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,

Большой пр. 61, В.О., Санкт-Петербург 199178, Россия

*e-mail: 16aero@mail.ru

Аннотация. В рамках нового подхода для описания мартенситных превращений развита существенно нелинейная теория формирования двумерных микроструктур при большом сдвиге, когда наряду с акустической возбуждается и псевдооптическая мода. Для аналитического описания таких структур в плотности энергии наряду с континуальными градиентными членами учитывается и периодический терм, ответственный за дискретные межатомные силы. Соответствующее уравнение равновесия, имеющее вид уравнения двойного синус-Гордона, решается точно. При чисто упругих деформациях частично нарушается дальний трансляционный порядок - возникает суперструктура с большими периодами.

1. Введение

В настоящее время большое внимание исследователей привлекает проблема структурных превращений и связанных с ними дефектов структуры и повреждений в поле интенсивных пластических деформаций. Ранние попытки ее решения путем введения внутренних степеней свободы в модели сложной решетки показали, что в пределах линейной теории действительно предсказываются некоторые новые эффекты. Однако в целом этот подход оказался неэффективным. Малые изменения внутренней структуры просто отслеживают изменения макроскопической геометрии решетки и приводят лишь к перенормировке материальных констант - модель сложной структуры сводится фактически к модели простой структуры. Основные новые результаты - появление новых мод оптических колебаний, пространственно-временная дисперсия упругих свойств и приграничные эффекты в статике. Кардинальные же структурные перестройки оказываются за пределами линейного подхода.

Наши предыдущие работы [1-3] были посвящены развитию существенно нелинейной теории упругих и неупругих микродеформаций на основе модели взаимно проникающих подрешеток. В результате было дано обобщение известной теории акустических и оптических колебаний на случай нелинейного взаимодействия подрешеток. Последнее вводится с учетом внутренней трансляционной симметрии сложной решетки - структура решетки и ее энергия инвариантна при взаимном смещении подрешеток на целое число периодов (или, что менее очевидно, на определенные доли периода [4]). Это позволяет рассматривать силы взаимодействия подрешеток как периодические (например, синусоидальные) функции относительного смещения подрешеток. В классической теории Кармана- Борна- Хуан Куя силы просто линейны по смещениям подрешеток [5].

Нелинейные уравнения акустической и оптической мод движения оказываются связанными, что позволяет учесть влияние макроскопических деформаций на

микроскопические (градиенты относительных смещений подрешеток), т.е. на структуру решетки.

Цель настоящей работы состоит в анализе образования и устойчивости дефектов в изначально идеальной решетке при фазовых превращениях мартенситного типа, и их влиянии на микроструктуру новой фазы.

Мартенситные превращения (МП) долгое время были предметом изучения металлургов. Ими был накоплен огромный экспериментальный материал, обнаружен ряд интересных особенностей этих превращений, а также выработана специфическая терминология [6]. В теоретическом плане наиболее значительные результаты были получены в рамках кристалло-геометрического подхода [7]. Начиная с 70-х годов, было сделано множество попыток включить МП в общую схему фазовых переходов 1-го рода в рамках теории Ландау. При этом в качестве параметра порядка вводился определенный набор компонент тензора деформаций, а для однородного вклада в свободную энергию использовалось стандартное разложение по его степенным инвариантам [8]. Так как в рамках континуальной бездефектной модели оценка активационного барьера зародыша дает величину порядка 10^5 К, то предполагалось, что зарождение мартенситной фазы происходит на дефектах аустенитной матрицы. В случае чистого кристалла под такими дефектами обычно подразумевались дислокации, а для сплавов – локальные флуктуации примесного состава. Взаимодействие возникающих зародышей учитывалось введением дальнодействующего анизотропного упругого потенциала в неоднородный вклад свободной энергии. Тем самым МП фактически отождествлялись с фазовыми переходами в дефектных сегнетоэластиках. Компьютерные расчеты для таких моделей дают картины структур, качественно похожие на электронно-микроскопические снимки зарождающейся мартенситной фазы, а также воспроизводят некоторые черты динамики МП [9]. В сегнетоэластиках, однако, переходы обусловлены смягчением акустической фононной моды, в то время как при МП небольшое смягчение наблюдается лишь в редких случаях. Кроме того, детальные эксперименты показывают, что зарождение мартенсита в матрице лишь отчасти коррелирует с дислокационной структурой. Ряд важных экспериментальных особенностей МП остается необъяснимым в рамках модели «грязных» сегнетоэластиков. В частности, остается неясным, почему возникновению мартенситной фазы часто предшествует появление сверхструктурных рефлексов, наблюдающихся в экспериментах по рассеянию электронов, рентгеновских лучей и нейтронов [10, 11, 12]. Поэтому создается впечатление, что какие-то существенные физические факторы в «сегнетоэластичном» подходе не учтены.

В настоящей работе мы анализируем предложенную нами новую модель МП [14, 13]. Для нее найдены точные двумерные решения нелинейных уравнений равновесия для полей макроскопических и микроскопических (межатомных) смещений в сложной решетке. Впервые показано, что ряд наблюдаемых сингулярных дефектов, действительно может зарождаться в первоначально идеальной решетке в поле постоянных напряжений, превышающих критические. Это краевые дислокации и их ансамбли, малоугловые границы, линии скольжения, вакансии и внедрения и их скопления, поры и антифазные границы, трещины. Нами рассчитаны поля микросмещений атомов в ядрах дефектов без обычных ограничений на размеры и расстояния между дефектами.

Новизна нашего модельного гамильтониана основана на следующем общем аргументе. По определению, к МП относят бездиффузионные переходы с большой сдвиговой деформацией [15]. В кристаллах с более чем одним атомом на элементарную ячейку (т.е. в подавляющем большинстве случаев) атомы внутри ячейки при больших сдвиговых деформациях испытывают скачкообразные смещения на расстояния порядка

размера ячейки. Ситуация может быть проиллюстрирована схематичным рисунком.

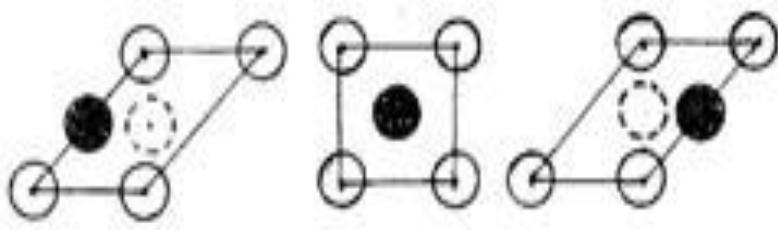


Рис. 1. Сложная кристаллическая решетка, состоящая из двух подрешеток: бифуркация структуры элементарной ячейки в ходе микродеформации.

Очевидно, что при критической величине сдвига, когда диагональ 13 становится меньше длины ребра ячейки 12, центральный атом скачком «выжимается» на боковую грань 23. Разумеется, чтобы описать соответствующее превращение количественно, надо знать атомные потенциалы взаимодействия, которые зависят от конкретного состава кристалла. Для структурных превращений, сопровождающихся малыми смещениями атомов, задача, как известно, сводится к вычислению фононного спектра и отбору смягчающихся ангармонизмом фононных мод [16]. Для МП атомные смещения не малы, и их разложение по фононным модам становится неадекватным. Как же записать гамильтониан для модели МП, одновременно достаточно простой для выполнения аналитических вычислений и вместе с тем учитывающий факт больших смещений подрешеток? Мы предполагаем, что в «минимальной» универсальной модели достаточно учесть трансляционную периодичность потенциала смещений подрешеток ограничившись его первой гармоникой, а также включить взаимодействие градиентов смещения подрешеток (микродеформаций) с упругими деформациями. В следующей главе эта модель описана более подробно и выведены определяющие соотношения для нее.

2. Основные соотношения. Учет взаимодействия мод деформаций.

Будем для простоты рассматривать случай двух подрешеток, которые совмещаются (сливаются в одну или переходят из начального варианта в симметрийно эквивалентный, например, сводящийся к общему повороту решетки) сдвигом на постоянный структурный вектор \vec{a} , являющийся параметром сложной решетки. Тогда в линейной теории кристаллической решетки [1, 2] получаются два уравнения - для акустических и оптических мод соответственно, для полей макроскопических $U_i(x, y)$ и микроскопических смещений $u_i(x, y)$. Первое описывает смещения центров кристаллических ячеек - элементов массы, как и в классической теории сплошной среды. Второе описывает взаимные смещения атомов внутри ячейки - отвечает за изменение ближнего порядка в сложной решетке.

Мы получим нелинейные уравнения равновесия, варьируя функционал энергии для заданной области (B, H), который определен следующим образом

$$E = (1/8\rho BH) \int_0^B \int_0^H e dx dy, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} e &= (1/2)\lambda_{ikjm} U_{i,k} U_{j,m} + (1/2)k_{ikmn} u_{i,k} u_{m,n} + C_{ikjm} U_{i,k} u_{j,m} + p(1 - \cos u) = \\ &= (1/2)\lambda_{ikjm}^{-1} \sigma_{ik} \sigma_{jm} + (1/2)\hat{k}_{ikmn} u_{i,k} u_{m,n} + p(1 - \cos u). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь $u = \sqrt{(u_n a_{nm} u_m)}$, где a_{nm} - тензор обратных длин ячейки. Далее, $U_{i,k}$, $u_{i,k}$ -

пространственные производные, обозначенные запятой в тензорных индексах. Круглые скобки в тензорах материальных констант означают симметрию по заключенным в них индексам, то есть $\lambda_{(ik)(jm)} = \lambda_{(ki)(mj)}$, $C_{(ik)(jm)} = C_{(ki)(mj)}$, $k_{(ik)(jm)} = k_{(ki)(mj)}$, $\hat{k}_{(ik)(jm)} = \hat{k}_{(ki)(mj)}$.

Избегая загромождения формул, будем далее подразумевать эти обозначения с применением скобок в индексах.

Первое слагаемое в (2.2) представляет собой упругую энергию деформирования, а последнее, содержащее периодическую функцию микросмещений, представляет энергию взаимодействия подрешеток, инвариантную к их жесткому смещению на соответствующий период.

Перекрестное слагаемое с коэффициентом C_{ikjm} отвечает за принципиально важное взаимодействие поля деформаций с микроскопическим полем внутренней степени свободы (отвечающей внутренячечной перестройке атомной конфигурации). Обоснуем наш выбор его формы в (2.2).

Возможные виды струкционного взаимодействия внутренних степеней свободы (параметров порядка) с полем деформаций изучались при анализе упругих, электро- и магнитоэлектрических свойств, которые особенно ярко проявляются в материалах, испытывающих фазовые переходы. При этом в основу рассмотрения были положены симметрийные свойства параметров порядка. В частности, было установлено, что если элементы (ячейки) среды не обладают центром инверсии, (как, например, в пьезоэлектриках), то главный вклад в струкционное взаимодействие линеен как по компонентам параметра порядка, так и по деформациям. Он имеет вид $d_{i,k} u_i U_{k,l}$. В центросимметричных средах такого вклада нет, и струкционное взаимодействие квадратично по компонентам параметра порядка и линейно по деформациям, т.е. записывается как $q_{i,klm} u_i u_k U_{l,m}$. Эта форма является наиболее универсальной и присутствует в описании любых фазовых состояний [17]. Однако следует иметь в виду, что обычно рассматриваются однородные низкоэнергетические состояния твердых тел, в то время как мы интересуемся описанием высокоэнергетических состояний, появление которых происходит под действием больших нагрузок и сопровождается возникновением сверхструктур различных масштабов. Очевидно, что при этом возрастает роль струкционных инвариантов взаимодействия, содержащих градиенты внутренних степеней свободы. Более того, при достаточно малых масштабах сверхструктур именно эти градиентные члены будут давать главный вклад в струкционное взаимодействие. В этом легко убедиться, сравнив градиентные вклады $C_{i,klm} u_i u_k U_{l,m}$ с универсальными $q_{i,klm} u_i u_k U_{l,m}$. Ясно, что для мелкомасштабныхnanoструктур градиентный вклад становится доминирующим. Соответственно, в плотность энергии (1.2) включен именно этот вклад, а вклады типа $q_{i,k} u_i U_{k,l}$ и $q_{i,klm} u_i u_k U_{l,m}$ опущены как малые.

Второе равенство в (2.2) получается простой перегруппировкой слагаемых в результате введения обозначений

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iknn} U_{m,n} - C_{iknn} u_{m,n}, \quad (2.3)$$

$$\hat{k}_{pqrs} = k_{pqrs} - C_{ikrs} \lambda_{ikmn}^{-1} C_{mnpq}. \quad (2.4)$$

Переход к новым переменным - напряжениям σ_{ik} , а также $u_{i,k}$ и u_i позволяет упростить описание по этим переменным - функционал формально не содержит перекрестных слагаемых. Это упрощает и форму записи уравнений равновесия. Так, варьируя вначале функционал (2.1) по $U_{i,k}$, $u_{i,k}$, u_i и используя затем обозначения (2.3), (2.4) получим систему уравнений равновесия в удобной для дальнейшего анализа форме

$$0 = \sigma_{ik,k}, \quad (2.5)$$

$$0 = \hat{k}_{ikjm} u_{k,jm} - p l_i \sin u - C_{mnik} \lambda_{rsmn}^{-1} \sigma_{rs,k}, \quad l_i = u_i / u, \quad u = \sqrt{u_n a_{nm} u_m}. \quad (2.6)$$

3. Двухкомпонентный и двумерный вариант теории.

Запишем уравнение (2.6) для кубического кристалла ($u = \sqrt{u_n} u_n$)

$$p l_x \sin u = \bar{k}_1 u_{x,xx} + \bar{k}_2 u_{y,yx} + \bar{k}_3 u_{x,yy} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy})_{,x}, \quad (3.1)$$

$$p l_y \sin u = \hat{k}_1 u_{y,yy} + \hat{k}_2 u_{x,xy} + \bar{k}_3 u_{y,xx} + (s_3 \sigma_{xx} + s_4 \sigma_{yy})_{,y}. \quad (3.2)$$

Существенно, что неоднородные слагаемые (производные напряжений) вычисляются в независимой граничной задаче для функции типа Эри χ .

Общее решение акустического уравнения (2.5) $U_i : U_x \ U_y \ 0; \quad u_i : u_x \ u_y \ 0$

$$0 = \lambda_1 U_{x,xx} + \lambda_{12} U_{y,xy} + \lambda_2 U_{x,yy} + c_1 u_{x,xx} + c_{12} u_{y,xy} + c_2 u_{x,yy}, \quad (3.3)$$

$$0 = \lambda_1 U_{y,yy} + \lambda_{12} U_{x,xy} + \lambda_2 U_{y,xx} + c_1 u_{y,yy} + c_{12} u_{x,xy} + c_2 u_{y,xx}, \quad (3.4)$$

имеет вид:

$$\sigma_{xx} = \lambda_1 U_{x,x} + (\lambda_{12} - \lambda_2) U_{y,y} + c_1 u_{x,x} + (c_{12} - c_2) u_{y,y}, \quad (3.5)$$

$$\sigma_{yy} = (\lambda_{12} - \lambda_2) U_{x,x} + \lambda_1 U_{y,y} + (c_{12} - c_2) u_{x,x} + c_1 u_{y,y}, \quad (3.6)$$

$$\sigma_{xy} = \lambda_2 (U_{x,y} + U_{y,x}) + c_2 (u_{x,y} + u_{y,x}). \quad (3.7)$$

Аналогичные уравнения справедливы для кубической, гексагональной, ромбической сингоний.

4. Учет неоднородных членов.

Рассмотрим приближенное решение системы (3.1, 3.2), когда выполняется соотношение для малых поперечных смещений

$$u_x \ll u_y \quad (4.1)$$

Этот режим подвижки подрешеток отвечает случаю распространения мартенситных пластин вдоль оси OY . Ясно, что при этом поле u_y плавно меняется вдоль оси OY , а поле u_x имеет большие градиенты в поперечном направлении.

Будем считать, что условие (4.1) позволяет линеаризовать уравнение (3.1), заменив синус линейным слагаемым. Тогда получим систему уравнений

$$p_1 u_x = \bar{k}_1 u_{x,xx} + \bar{k}_3 u_{x,yy} + \bar{k}_{23} u_{y,yx} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy})_{,x}, \quad (4.2)$$

$$p_2 \sin u_y = \hat{k}_1 u_{y,yy} + \hat{k}_{23} u_{x,xy} + \bar{k}_3 u_{y,xx} + (s_3 \sigma_{xx} + s_4 \sigma_{yy})_{,y} \quad (4.3)$$

Запишем первое уравнение в трансформантах Фурье. Пусть их амплитуды это \tilde{u}_x и \tilde{u}_y , а частоты - q_1, q_2 . Тогда частное решение уравнения (4.2) даст амплитудно-частотное соотношение

$$p_1(1 + l_1^2 q_1^2 + l_2^2 q_2^2) \tilde{u}_x = -l_{23}^2 q_1 q_2 \tilde{u}_y + \tilde{\sigma}_1 q_1, \quad (4.4)$$

$$l_1^2 = \bar{k}_1/p_1, l_2^2 = \bar{k}_2/p_1, l_{23}^2 = \bar{k}_{23}/p_1. \quad (4.5)$$

Здесь $\tilde{\sigma}_1$ - трансформанта Фурье выражения в скобках в уравнении (4.2). Легко видеть, что условие принятого приближения (4.1) обеспечивается неравенством

$$1 \ll l_2^2 q_2^2 \ll l_{23}^2 q_1 q_2 \ll l_1^2 q_1^2 l_2^2 q_2^2 \ll l_{23}^2 q_1 q_2 \ll l_1^2 q_1^2 \quad (4.6)$$

которое должно следовать из разложения в ряд Фурье решения второго уравнения, т.е. (4.3). Оно означает, что только слоевые решения этого уравнения отвечают перетасовочной (shuffling) моде микродеформаций, сопровождающей образование мартенситных пластин. Оно должно быть критерием отбора частных решений уравнения (4.3). Выше было показано, что такие слоевые решения действительно существуют и в них фигурируют сильно различающиеся частоты q_1, q_2 , соотношение между которыми легко анализируется.

В силу оценки (4.6) будем рассматривать ниже вместо (4.2) упрощенное уравнение

$$0 = \bar{k}_1 u_{x,xx} + \bar{k}_3 u_{x,yy} + \bar{k}_{23} u_{y,yx} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy})_{,x}. \quad (4.7)$$

В соответствии с условием (4.1) в нем второе слагаемое справа можно опустить. В результате получим уравнение, которое легко интегрируется по x , что даёт уравнение более низкого порядка

$$\bar{k}_1 u_{x,x} + \bar{k}_{23} u_{y,y} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy}) = b(y). \quad (4.8)$$

Здесь $b(y)$ – произвольная функция.

Выразим здесь напряжения с помощью (2.3), (2.4) через производные $U_{x,x}$, $U_{y,y}$, $u_{x,x}$, $u_{y,y}$. Это даёт вместо (4.8) соотношение между микро и макродеформациями

$$(\bar{k}_1 + S_2 C_1) u_{x,x} + [\bar{k}_{23} + S_2 (C_{12} - C_2)] u_{y,y} + s_1 \lambda_1 U_{x,x} + S_2 (\lambda_{12} - \lambda_2) U_{y,y} = b(y). \quad (4.9)$$

Получим ещё одно соотношение между ними, Оно следует из закона сохранения x -компоненты импульса

$$\sigma_{x,xx} + \sigma_{x,yy} = 0 \rightarrow \lambda_1 U_{x,xx} + \lambda_{12} U_{y,yx} + C_1 u_{x,xx} + C_{12} u_{y,xy} = 0. \quad (4.10)$$

В нём опущены малые слагаемые $U_{x,yy}$, $u_{x,yy}$ в силу принятого приближения. После интегрирования (4.10) по x получим

$$\lambda_1 U_{x,x} + \lambda_{12} U_{y,y} + C_1 u_{x,x} + C_{12} u_{y,y} = a(y), \quad (4.11)$$

$$P_2 \sin u_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + K_1 u_{y,yy} + K_2 u_{x,xy}.$$

Уравнения (4.9), (4.11) можно разделить относительно градиентов $U_{x,x}$, $U_{y,y}$, что даёт

$$\begin{aligned} & \lambda_1 [S_2(\lambda_{12} - \lambda_2) - S_1 \lambda_{12}] U_{x,x} + [C_1 S_2(\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12}(k_1 + S_2 C_1)] u_{x,x} \\ & + \{C_{12} S_2(\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12}[\bar{k}_{23} + S_2(C_{12} - C_2)]\} u_{y,y} = S_2(\lambda_{12} - \lambda_2)a(y) - \lambda_{12}b(y) \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} & [S_1 \lambda_{12} - S_2(\lambda_{12} - \lambda_2)] U_{y,y} + [C_{12} S_1 - \bar{k}_{23} - S_2(C_{12} - C_2)] u_{y,y} \\ & + (S_1 C_1 - S_2 C_1 - \bar{k}_1) u_{x,x} = S_1 a(y) - b(y) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Обратимся к анализу второго закона сохранения импульса:

$$\sigma_{yx,x} + \sigma_{yy,y} = 0 \rightarrow \lambda_2 U_{y,xx} + \lambda_1 U_{y,yy} + \lambda_{12} U_{x,xy} + C_2 u_{y,xx} + C_{12} u_{x,xy} + C_1 u_{y,yy} = 0. \quad (4.14)$$

Объединяя это выражение с (4.13), (которое продифференцируем по y) исключим слагаемое $U_{y,yy}$. Получим уравнение

$$\lambda_{12} \lambda_2 U_{y,xx} + (\lambda_{12}^2 - \lambda_1^2) U_{x,xy} + \lambda_{12} C_2 u_{y,xx} + (\lambda_{12} C_{12} - \lambda_1 C_1) u_{x,xy} + (\lambda_{12} C_1 - C_{12} \lambda_1) u_{y,yy} = -\lambda_1 \frac{\partial a}{\partial y}. \quad (4.15)$$

Теперь исключим слагаемое $u_{y,yy}$, используя (4.12) после дифференцирования (4.15)(4.12) по y . Получим уравнение без $u_{y,yy}$:

$$\begin{aligned} & \lambda_{12} \lambda_1 U_{y,xx} + \{(\lambda_{12}^2 - \lambda_1^2) - (\lambda_{12} C_1 - \lambda_1 C_{12}) \frac{\lambda_1 S_2(\lambda_{12} - \lambda_1) - \lambda_{12} \lambda_1 S_1}{C_{12} S_2(\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12} [\bar{k}_{23} + S_2(C_{12} - C_2)]}\} U_{x,xy} \\ & + \{(\lambda_{12} C_{12} - \lambda_1 C_1) - \frac{[C_1 S_2(\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12}(\bar{k}_1 + S_2 C_1)][(\lambda_{12} C_1 - C_{12} \lambda_1)]}{C_{12} S_2(\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12} [\bar{k}_{23} - S_2(C_{12} - C_2)]}\} u_{x,xy} + \lambda_{12} C_2 u_{y,xx} = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Это выражение интегрируем по x . Получим уравнение в окончательном виде

$$\lambda_{12} \lambda_1 U_{y,x} + \Lambda_1 U_{x,y} + \lambda_{12} C_2 u_{y,x} + \Lambda_2 u_{x,y} = \Lambda_3 y + \Lambda_4. \quad (4.17)$$

Теперь перейдем к анализу уравнения (4.3), которое может быть записано следующим образом

$$\begin{aligned} P_2 \sin u_y = & \bar{k}_3 u_{y,xx} + [\hat{k}_1 + S_3(C_{12} - C_2) + S_4 C_1] u_{y,yy} + \hat{k}_{23} u_{x,xy} + [S_4 \lambda_1 + S_3(\lambda_{12} - \lambda_2)] U_{y,yy} \\ & + [S_3 C_1 + C_4(C_{12} - C_2)] u_{x,xy} + [S_3 \lambda_1 + S_4(\lambda_{12} - \lambda_2)] U_{x,xy} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Интегрирование становится возможным, если, заменив в нем производную $u_{x,xy}$, исключить из этого уравнения производные $U_{x,x}$, $U_{y,y}$ с помощью соотношений (4.12) и (4.13). Уравнение (4.18) тогда перепишется так

$$P_2 \sin u_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + K_1 u_{y,yy} + K_2 u_{x,xy}. \quad (4.19)$$

Новые коэффициенты \bar{k}_3 , K_1 , K_2 оказываются весьма громоздкими функциями лишь

коэффициентов исходных уравнений (4.1- 4.19). Вместе с (4.12), (4.13), (4.17), (4.18) получили в окончательном виде полную систему уравнений.

5. Некоторые частные решения.

Интегрирование этого уравнения сильно облегчается, если учесть малость слагаемых $u_{y,yy}$ и $u_{x,xy}$. Однако пренебрежение ими – слишком грубое ограничение. Более тонкое условие связано с допущением $u_{y,yy} \approx u_{x,xy}$. Оно позволяет избавиться от слагаемого $u_{x,xy}$, выразив его через $u_{y,yy}$.

Для этого можно в (4.17) пренебречь суммой слагаемых $\Lambda_1 U_{x,y} + \Lambda_2 u_{x,y}$ по сравнению с $\lambda_{12} \Lambda_1 U_{y,x} + \lambda_{12} C_2 u_{y,x}$. Тогда вместо (4.17) получим

$$\lambda_1 U_{y,x} + C_2 u_{y,x} \approx \frac{\Lambda_3}{\lambda_{12}} y + \frac{\Lambda_4}{\lambda_{12}}. \quad (5.1)$$

Интегрируя по x , перепишем это соотношение так

$$\lambda_1 U_y + C_2 u_y \approx \frac{\Lambda_3}{\lambda_{12}} yx + \frac{\Lambda_4}{\lambda_{12}} x + \Lambda. \quad (5.2)$$

Дифференцируя его по y , получим

$$\lambda_1 U_{y,y} + C_2 u_{y,y} \approx \frac{\Lambda_1}{\lambda_{12}} x. \quad (5.3)$$

Используем это соотношение в (4.14). Исключив из него $U_{y,y}$, получим вместо (4.13) соотношение вида

$$A u_{y,y} + B u_{x,x} + c x = D(y). \quad (5.4)$$

Здесь A, B, C, D – материальные константы. Дифференцируя его по y , получим

$$B u_{x,xy} = -A u_{y,yy} + \frac{\partial D(y)}{\partial y}. \quad (5.5)$$

Используя это выражение, исключим слагаемое $u_{x,xy}$ из (4.18). В результате получим вместо (4.19) уравнение:

$$p_2 \sin u_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + \bar{K}_3 u_{y,yy} + \bar{D}(y). \quad (5.6)$$

Рассмотрим частный случай малых градиентов $U_{x,y} \approx 0$, $u_{x,y} \approx 0$, означающий, что смещения слабо меняются вдоль оси ОХ (поперек слоя). Тогда соотношения (4.17) примут упрощенный вид

$$\lambda_{12} \lambda_1 U_{y,x} + \lambda_{12} C_2 u_{y,x} = \Lambda_3 y + \Lambda_4. \quad (5.7)$$

Интегрируя по x , получаем решение

$$\lambda_{12} \lambda_1 U_y + \lambda_{12} C_2 u_y = (\Lambda_3 y + \Lambda_4)x + \Lambda_5. \quad (5.8)$$

Соотношение (5.1) вместе с (4.15), (4.16) позволяют найти производные

$U_{x,x}$, $U_{y,y}$, $U_{y,x}$, если известны $u_{y,x}$, $u_{y,y}$, $u_{x,xy}$. Для нахождения этих последних производных нужно конечно решать уравнение (4.9). В укороченной форме, заменяя слагаемое $u_{x,xy}$ согласно (5.5), можно получить более простое уравнение

$$p_2 \sin u_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + K_1 u_{y,yy}. \quad (5.9)$$

Им мы теперь и займемся. Уравнение (5.9) имеет несколько вариантов решений, отражающих мартенситно - аустенитные переходы как переходы к симметрии решетки другого класса. Это зависит от знака коэффициентов \bar{k}_3, K_1 . Пусть оба эти коэффициента положительны. Обратимся к выражению для полной макроскопической плотности энергии

$$e = (1/2) \lambda_{ikjm} \epsilon_{ik} \epsilon_{jm} - C_{ikjm} \epsilon_{jm} u_{j,m} + (k/2) k_{ikjm} u_{i,k} u_{j,m} + V(u). \quad (5.10)$$

Очевидно, градиенты микросмещений увеличивают её. Поэтому энергетически выгодны лишь однородные решения типа

$$\sin u = 0, \rightarrow u = n\pi, n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.11)$$

Они отвечают жестким сдвигам подрешеток на целое число полупериодов. При этом возможен переход к симметрии решетки другого класса, например аустенит – мартенсит. Поскольку однородное состояние энергетически более выгодно, переход в него совершается спонтанно, тогда как неоднородное решение уравнения (при положительности обоих коэффициентов) реализуется лишь вынужденно – за счёт внешних сил.

Однородное состояние возникает спонтанно и в случае, отвечающем несимметричной точке Лифшица, когда один из коэффициентов положителен ($\bar{k}_3 > 0$), а второй (при $T=T_{cc}$) обращается в нуль: $K_1 = 0$. Тогда снова не реализуется спонтанный переход в неоднородную структуру – градиенты по x , увеличивают энергию (5.10).

Модулированное (неоднородное) поле $u(x,y)$ возникает спонтанно уже в том случае, когда хотя бы один из коэффициентов становится отрицательным. Оно энергетически выгодно, поскольку соответствующие градиентные слагаемые в выражении для энергии (5.10) понижают её. При этом возникает поле микросмещений, зависящее лишь от одной координаты x , которое даётся выражением

$$\operatorname{tg} u/4 = \sqrt{\nu} \operatorname{sn}(xK/H) \quad (5.12)$$

И наконец, когда оба коэффициента отрицательны, спонтанно возникает двумерное поле, описывающее мартенситную фазу. Тогда уравнению (5.12) отвечает решение

$$u = \bar{u} - \pi, \quad (5.13)$$

$$\operatorname{tg}(\bar{u}/4) = A_1 dn(xK_1/H) dn(yK_2/B),$$

$$1/A_1^4 = (1-\nu_1^2)(1-\nu_2^2). \quad (5.14)$$

Здесь эллиптические интегралы первого рода $K(\nu_1), K(\nu_2)$ зависят известным образом от своих аргументов – модулей ν_1, ν_2 – констант интегрирования. При $\nu=0, \nu=1$ имеем $K(0)=\pi/2, K(1)\rightarrow\infty$ соответственно.

Плотность энергии при различных значениях от константы интегрирования ν_1 (однозначно связанной с амплитудой микросмещений) при различных значениях ν_2 , отрицательна (градиенты выгодны). Имеется высокий минимум при малых ν_1 и низкий (абсолютный) минимум при больших значениях этой константы интегрирования.

Для того чтобы выяснить смысл этих двух энергетических минимумов, напомним свойства эллиптических дельта-функций.

При $\nu_1=0$ дельта функция $dn(xK_1/H) \rightarrow 1$, т.е. вырождается в константу. При $\nu_2 \rightarrow 1$ вторая дельта-функция становится системой весьма узких импульсов единичной высоты. В результате имеем систему однородных (вдоль оси ОХ) слоёв с узкими границами и малыми расстояниями между ними ($B \rightarrow \pi l_1$). Протяженность же слоёв 2H весьма велика. Поскольку между границами $dn(yK/B) \rightarrow 0$, то $\operatorname{tg}(\bar{u}/4) \rightarrow 0$, $u \rightarrow 0$. В этом случае само решение здесь $u \rightarrow -\pi$, т.е. имеет место переход в мартенситную фазу. На границах же слоёв, по определению второй дельта-функции, она равна единице, т.к. $dnK=1$. Тогда поскольку амплитуда при A_1 стремится (при $\nu_2 \rightarrow 1$) к бесконечности, имеем большие значения величины $\operatorname{tg}(\bar{u}/4)$ и поэтому $\bar{u}/4 \rightarrow \pi/2$, $u \rightarrow \pi$ на границах. Следовательно, на границах между слоями (мартенситными пластинами) остаётся аустенит.

И наконец, при $\nu_1 \rightarrow 1$ первая дельта-функция также обостряется и вместо слоёв получается система узких пиков аустенитной фазы – её зародышей, погруженных в мартенситную матрицу. Этим текстурам отвечают локальные (высокие) вторичные минимумы. Эти состояния менее устойчивы, поскольку им отвечают более устойчивые уровни энергии. Зародыши разрастаются спонтанно в слои лишь после преодоления небольших потенциальных барьеров.

Заметим, что при другом выборе констант интегрирования $\nu_1 = \nu_2 = 0$ имели бы соотношения $A_2=1$, $\operatorname{tg}(\bar{u}/4) = 0$, $\bar{u}=\pi$. Тогда решение u , согласно (5.5), обращается в нуль. Это значит, что подрешетки не деформированы и не сдвинуты. Легко подсчитать энергетические затраты на этот переход. В выражении для энергии (5.3) градиентные члены исчезают, а $\cos u=1$, поэтому плотность энергии микросдвига равна нулю, т.е. переход попросту не происходит.

Рассмотрим теперь чисто вынужденные переходы. Выше было отмечено, что энергетически невыгодные градиентные слагаемые (при положительных коэффициентах) могут в принципе породить неоднородное вынужденное поле $u(x,y)$ засчёт внешнего воздействия. Оно имеет в соответствии вид

$$\operatorname{tg}(u/4) = A_1 dn(xK_1 / H) dn(yK_2 / B),$$

$$1/A_1^4 = (1-\nu_1^2)(1-\nu_2^2) \quad (5.15)$$

Заметим, что в отличие от спонтанного перехода полное решение не содержит дополнительного слагаемого как в (5.6). При выборе констант интегрирования $\nu_1 = \nu_2 = 0$ имеем $A_1=1$, $\operatorname{tg}(u/4) = 1$, т.е. $u=\pi$. Это значит, что подрешетки жестко сдвинуты на половину периода, и во всём объёме произошло однородное превращение аустенита в мартенсит. Поскольку этот переход по определению вынужденный (аустенит был устойчивой фазой при соответствующей температуре), он естественно связан с энергетическими затратами. Легко их подсчитать. В выражении для энергии (5.10) градиентные члены исчезают, а $\cos u=-1$, поэтому плотность энергии перехода равна $2p$ на один атом. Эту большую энергию нужно обеспечить внешними силами,

поэтому спонтанный переход при положительных коэффициентах \bar{k}_3, K_3 невозможен.

При другом выборе констант интегрирования энергетические затраты на этот переход могут быть достаточно малы. Так при $v_2 \rightarrow 1$ дельта-функции становятся весьма узкими импульсами единичной высоты. Расстояния между ними 2В бесконечно возрастают, поэтому и энергетические затраты могут оказаться малыми. Переход реализуется фактически в малых областях определения дельта-функций и занимает малую долю общего объёма. Он отвечает образованию мелких зародышей, плотность которых растёт, и наконец, они сливаются (с увеличением внешней нагрузки вплоть до возникновения жесткого сдвига) с полным превращением в мартенсит напряжения. Вынужденные переходы поэтому, потребовали полного анализа внешних напряжений, что и было подготовлено уравнениями в конце предыдущей главы.

На следующих рисунках представлено распределение частиц, в соответствии с решением уравнения (5.9) при различных значениях его параметров \bar{k}_3, K_1, K_2 .

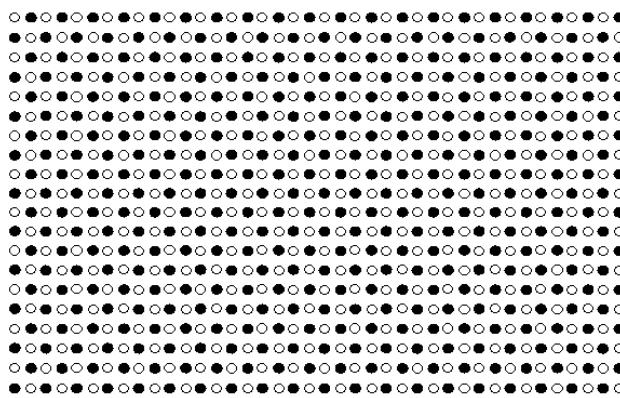
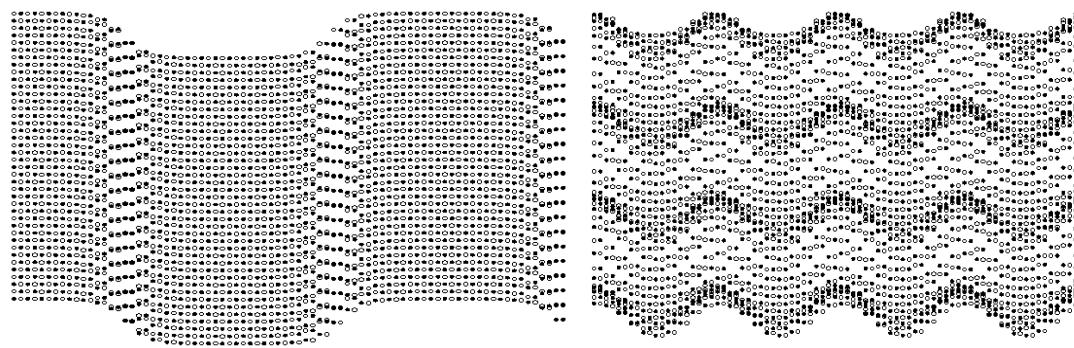


Рис. 2. показано исходное (недеформированное) распределение частиц в образце, отвечающее однородной аустенитной фазе ($\bar{k}_3, K_1, K_2 = 0$).

Далее, на рисунках 3а и 3б показана картина перераспределения атомов в плоскости подложки (XY).



3 а)

3 б)

Рис. 3. а) - одномерная кристаллическая микроструктура, возникающая при слабом сдвиге и высокой температуре с образованием узких мартенситных прослоек и б) – двумерная (смешанная) аустенитно- мартенситная микроструктура сильного сдвига, возникающая при низкой температуре.

Структуры а) и б) соответствуют разным наборам параметров (\bar{k}_3, K_1, K_2).

Подавляющее их количество, занимающее широкие зоны (полосы), представляет

по-прежнему участки аустенитной фазы, разделённые узкими прослойками вновь образующейся мартенситной.

6. Выводы

В заключение мы хотим отметить, что имеющиеся в литературе попытки построить теорию МФП не привели к созданию математической модели, анализ которой позволил бы описать количественно совокупность эффектов, характерных для таких переходов. Наш подход основан на таких фундаментальных свойствах, как существование трансляционной симметрии при относительности смещения подрешеток и наличии взаимодействия, билинейного по полю деформаций и градиентам смещения подрешеток. Соответствующая математическая модель, допускающая аналитическое решение, приводит к системе уравнений, состоящей из уравнения типа синус-Гордона, дополненного уравнением нелинейной теории упругости. Мы показали, что такая система уравнений обладает набором решений, описывающих несоразмерные структуры, типичные для дифракционных картин рассеяния в области МФП.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 13-01-00224-а и №13-02-91332-ННИО_а.

Литература

- [1] Э.Л. Аэро // *Физика твердого тела* **42** (2000) 1113.
- [2] Э.Л. Аэро // *Успехи механики* **1** (2002) 130.
- [3] Э.Л. Аэро // *Физика твердого тела* **45** (2003) 1482.
- [4] V.P. Dmitriev, S.B. Rochal, Yu.M. Gufan, P. Toledano // *Physical Review Letters* **60** (1988) 1958.
- [5] М. Борн, Хуан Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток* (И. Л., М., 1958).
- [6] C.M. Wayman, In: *Martensitic transformations*, ed. by B.C. Muddle (Aedemannsdorf: Trans. Tech. 1990).
- [7] G.B.Olson, A.L. Roitburd, In: *Martensites*, ed by G.B. Olson and W.S. Owen (American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1992).
- [8] P. Toledano, G. Krexner, M. Prem, H.-P. Weber, V.P. Dmitriev // *Physical Review B* **64** (2001) 144104.
- [9] Y. Wang, A.G. Khachaturyan // *Acta Materialia* **45** (1997) 759.
- [10] S.L. Sass // *Journal of the Less Common Metals* **28** (1972) 157.
- [11] W. Lin, H. Spalt, B.W. Batterman // *Physical Review B* **13** (1976) 5158.
- [12] C.M. Hwang, M. Meichle, M.B. Salamon, C.M. Wayman // *Acta Materialia* **47** (1983) 9.
- [13] S. Sreekala, R. Ahluwalia, G. Ananthakrishna // *Physical Review B* **79** (2004) 224105.
- [14] А.Л. Корженевский, Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин // *Известия РАН. Серия физическая* **69** (2005) 1271.
- [15] А.Л. Корженевский, Э.Л. Аэро, В сборнике: *Проблемы машиноведения: точность, трение и износ, надежность, перспективные технологии*. Под ред. В.П. Булатова (Наука, СПб, 2005), с. 561.
- [16] J.W. Christian, G.B. Olson, M. Cohen // *Journal de Physique IY, Col. C8*, **5** (1995) C8-3.
- [17] A.D. Bruce, R.A. Cowley, *Structural Phase Transitions* (Taylor and Francis, London, 1981).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, М., 1976).
- [19] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш, *Специальные функции* (Наука, М. 1977).

THE THEORY OF COEXISTING AUSTENITE-MARTENSITE PHASE FORMATION

E.L. Aero^{*}, A.L. Korzhenevskii

Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,

Bolshoj 61, Vasilievskii Ostrov, St. Petersburg 199178, Russia

*e-mail: 16aero@mail.ru

Abstract. A two-dimensional lattice model of austenite-martensite transformation is considered. The model Hamiltonian contains a periodic term and gradient ones. The mixed gradient terms are included to account for the coupling of internal structural degrees of freedom of the complex lattice with the conventional acoustic displacements. The exact solutions that describe the coexisting incommensurate austenite-martensite structures are obtained. The results explain the appearance so called “premartensitic” superlattice reflections that are typically observed near the transformations.

Acknowledgment

This work was supported by grants from RFBR № 13-01-00224-a and the number 13-02-91332-NNIO_a.

References

- [1] E.L. Aero // *Solid State Physics* **42** (2000) 1113.
- [2] E.L. Aero // *Uspekhi mechaniki* **1(3)** (2002) 130.
- [3] E.L. Aero // *Solid State Physics* **45** (2003) 1482.
- [4] V.P. Dmitriev, S.B. Rochal, Yu.M. Gufan, P. Toledano // *Physical Review Letters* **60** (1988) 1958.
- [5] M. Born, K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices* (Clarendon Press, Oxford, 1954).
- [6] C.M. Wayman, In: *Martensitic transformations*, ed. by B.C. Muddle (Aedemannsdorf: Trans. Tech., 1990).
- [7] G.B. Olson, A.L. Roitburd, In: *Martensites*, ed. by G.B. Olson and W.S. Owen (American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1992).
- [8] P. Toledano, G. Krexner, M. Prem, H.-P. Weber, V.P. Dmitriev // *Physical Review B* **64** (2001) 144104.
- [9] Y. Wang, A.G. Khachaturyan // *Acta Materialia* **45** (1997) 759.
- [10] S.L. Sass // *Journal of the Less Common Metals* **28** (1972) 157.
- [11] W. Lin, H. Spalt, B.W. Batterman // *Physical Review B* **13** (1976) 5158.
- [12] C.M. Hwang, M. Meichle, M.B. Salamon, C.M. Wayman // *Acta Materialia* **47** (1983) 9.
- [13] S. Sreekala, R. Ahluwalia, G. Ananthakrishna // *Physical Review B* **79** (2004) 224105.
- [14] A.L. Korzhenevskii, E.L. Aero, A.N. Bulygin // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics* **69** (2005) 1271.
- [15] A.L. Korzhenevskii, E.L. Aero, In: *Problems of mechanical engineering: exactness, friction, wear, safety, perspective technology*, ed. by V.P. Bulatov (Nauka, St.Petersburg, 2005), p. 562.
- [16] J.W. Christian, G.B. Olson, M. Cohen // *Journal de Physique IY, Col. C8*, **5** (1995) C8-3.
- [17] A.D. Bruce, R.A. Cowley, *Structural Phase Transitions* (Taylor and Francis, London, 1981).
- [18] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, New-York, 1969).
- [19] E. Jahnke, F. Emde, F. Losch, *Tafel hoherer Funktionen* (Tourner, Stuttgart, 1960).