

УДК 669.0:538.91

ВЫРОЖДЕННАЯ СТРУКТУРА ДВОЙНИКОВ ПРЕВРАЩЕНИЯ И МОНОКРИСТАЛЛИЧНОСТЬ ЧАСТИ ТОНКОПЛАСТИНЧАТОГО МАРТЕНСИТА, ИНИЦИИРОВАННОГО СИЛЬНЫМ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

© 2020 г. М. П. Кащенко^{a,b,*}, Н. М. Кащенко^a, В. Г. Чашина^{a,b}

^a Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

^b Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург, Россия

*e-mail: mpk46@mail.ru

Поступила в редакцию 09.09.2019 г.

После доработки 16.09.2019 г.

Принята к публикации 18.09.2019 г.

В динамической теории образование двойникованных кристаллов мартенсита является результатом согласованного распространения относительно длинноволновых (ℓ -волны) и коротковолновых (s -волны) смещений. Условие согласования анализируется для γ – α мартенситного превращения в сплавах на основе железа с учетом квазипродольности ℓ -волны, несущей деформацию сжатия. Впервые показано, что установленный ранее эффект монокристалличности части кристаллов тонкопластинчатого мартенсита, возникающего при охлаждении в условиях действия сильного магнитного поля, естественно интерпретировать как следствие формирования вырожденной структуры двойников превращения.

Ключевые слова: мартенситные превращения, двойники превращения, управляющий волновой процесс, вырожденная двойниковая структура, фазовая и групповая скорости, тонкопластинчатые кристаллы, сильное магнитное поле

DOI: 10.31857/S0572329920010134

Объектом исследования является иерархия волн, входящая в структуру волнового процесса, управляющего быстрым ростом тонкопластинчатых мартенситных кристаллов, наблюдаемых в процессе охлаждения при γ – α мартенситном превращении в углеродистых сталях и ряде сплавов на основе железа. Как правило, эти кристаллы обладают тонкой структурой двойников превращения, характеризуемой чередованием ориентаций главных осей сжатия. Однако, наблюдаются и варианты монокристалличности, когда практически отсутствует вторая компонента двойниковой структуры, на что было обращено внимание при инициировании превращения сильными импульсными магнитными полями.

В настоящей статье на основе анализа выполнения условий согласования действия относительно длинноволновых ℓ -смещений, ответственных за формирование габитусных плоскостей кристаллов, и относительно коротковолновых s -смещений, ответственных за образование основной компоненты двойниковой структуры, впервые показано, что согласование достигается при строгом учете квазипродольности ℓ -волны, несущей деформацию сжатия, групповая скорость которой существенно отклоняется от направления фазовой скорости.

В результате, наблюдаемый эффект монокристалльности части тонкопластинчатых кристаллов получает естественное объяснение в рамках динамической теории как следствие формирования вырожденной двойниковой структуры.

1. Введение. Мартенситное превращение (МП) реализуется во многих кристаллических материалах, существенно модифицируя их свойства, и поэтому представляет интерес, как для физики, так и для механики твердого тела. Отличительной особенностью МП является его кооперативный характер. В большинстве случаев МП протекает с признаками фазового перехода первого рода. Однако попытки интерпретации гетерогенного зарождения на основе традиционных представлений о существовании квазиравновесных зародышей новой фазы, с одной стороны, не подкрепляются надежными наблюдениями подобных зародышей (проблема ненаблюдаемости зародышей), а с другой стороны, не позволяют адекватно интерпретировать богатую совокупность наблюдаемых особенностей МП. Особенно выпукло эти проблемы проявляются при попытке описания ГЦК-ОЦК (ОЦТ) превращения в сплавах железа. Именно изучение этого превращения (далее для краткости γ - α МП) способствовало накоплению наибольшей информации, положенной в основу определения мартенситного превращения как специфического (бездиффузионного) кооперативного превращения [1].

Наиболее яркой особенностью спонтанного (при охлаждении) γ - α МП является сверхзвуковая (по отношению к продольным волнам) скорость роста кристаллов мартенсита. Это обстоятельство сразу позволяет исключить из рассмотрения дислокационные модели роста кристаллов, безальтернативно указывая на волновую природу управления ростом кристаллов. Таким образом, следовало прояснить специфику гетерогенного старта роста кристаллов, приводящего к возникновению волнового процесса, управляющего формированием кристалла и интерпретации наблюдаемого набора морфологических признаков. Эта программа была выполнена в ходе развития динамической теории МП [2–4]. Центральную роль при этом играет концепция начального возбужденного (колебательного) состояния (НВС). НВС возникает в упругих полях отдельных дислокаций, имеет форму вытянутого параллелепипеда с ориентациями ребер близкими к ориентациям собственных векторов ξ_1 , ξ_2 и ξ_3 тензора деформации упругого поля дислокационного центра зарождения (ДЦЗ). Причем в области, благоприятной для возникновения НВС два собственных значения тензора деформации имеют разные знаки, а третья деформация мала ($\epsilon_1 > 0$, $\epsilon_2 < 0$, $\epsilon_3 \ll |\epsilon_{1,2}|$). Абсолютные значения $|\epsilon_{1,2}|$ считаются сравнимыми с пороговыми величинами $\epsilon_{th} \sim \sim 10^{-4} - 10^{-3}$ межфазных барьеров. Тогда при охлаждении до температуры M_s (ниже температуры равновесия фаз T_0) в области со сниженным значением пороговой деформации скачком возникает НВС при согласованном быстром скачке атомов к новым положениям равновесия с возбуждением колебаний в ортогональных направлениях близких к ξ_1 , ξ_2 . Подобные колебания порождают волновые пучки с ортогональными волновыми векторами и скоростями v_1 , v_2 . Причем существенна область наложения волновых пучков (в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда), в которой реализуется пороговая деформация типа “растяжение–сжатие”. Описанная двухволновая схема формирования прообраза пластинчатого мартенситного кристалла представлена на рис. 1, где прямолинейный отрезок, ограниченный парой символов \perp , соответствует дислокации, в упругом поле которой возникает НВС.

Как следует из рис. 1, плоским границам кристалла (границам раздела фаз – габитусным плоскостям или, сокращенно, габитусам) в такой модели, соответствует движение со скоростью $v = v_1 + v_2$ линий пересечения фронтов волновых пучков. Таким образом, возникновение НВС порождает простейший вариант управляющего волнового процесса (УВП). Далее эту пару квазипродольных волн с относительно большими

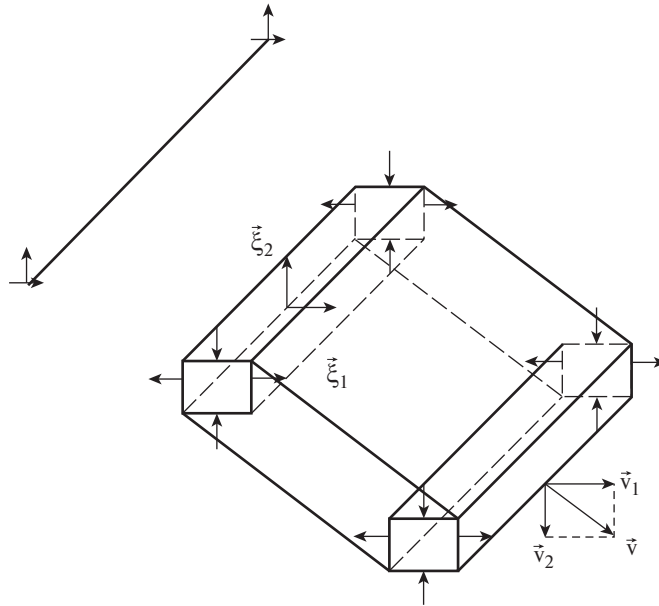


Рис. 1

ми длинами волн будем именовать ℓ -волнами. Легко показать, что ориентация нормали \mathbf{N} к габитусной плоскости задается соотношением

$$\mathbf{N}_{1,2\ell} \parallel \mathbf{n}_{2\ell} \pm \alpha_{\ell\ell} \mathbf{n}_{1\ell}, \quad \alpha_{\ell\ell} = \frac{v_{2\ell}}{v_{1\ell}}, \quad |\mathbf{n}_{1,2\ell}| = 1, \quad \mathbf{n}_{1\ell} = \frac{\mathbf{v}_{1\ell}}{v_{1\ell}}, \quad \mathbf{n}_{2\ell} = \frac{\mathbf{v}_{2\ell}}{v_{2\ell}} \quad (1.1)$$

Однако мартенситные кристаллы могут обладать и тонкой структурой двойников превращения. Двойники превращения возникают непосредственно в ходе роста мартенситных кристаллов в виде чередующихся пластинчатых компонент. Они наблюдаются как в случае ярко выраженных признаков фазовых переходов I рода (например, в сплавах железа [1]), так и при МП, близких к фазовым переходам II рода (например, в ряде сплавов цветных металлов [5]). Типичное различие компонент двойниковой структуры (ДС) заключается в различии ориентаций главных осей деформации, как правило, ортогональных друг другу в исходной фазе. При сравнительно низких (дозвуковых) скоростях роста мартенситных кристаллов в качестве механизма роста допустимо использование дислокационных представлений при трактовках ДС (см., например, [6]). При высоких же скоростях роста кристаллов, обладающих ДС, естественно опираться на динамические (волновые) трактовки, использующие концепцию УВП. В предыдущих работах было показано, что концепция УВП, после включения в структуру УВП более коротких s -волн, позволяет описать не только идеальную (строго регулярную) ДС [3, 7, 8], но и, базируясь на модели формирования регулярной ДС, ставить и решать задачу интерпретации реальных неоднородных вариантов ДС [9–13]. Одним из итогов такого анализа является вывод о фрагментации ДС, причем каждый фрагмент порождается единственной спонтанно возникшей возбужденной ячейкой, инициирующей s -волны. Динамическая теория позволяет рассмотреть и предельный случай вырожденной двойниковой структуры (ВДС), в которой доминирует основная компонента [14].

Хорошо известно [1], что при классификации наблюдаемых при γ - α МП в сплавах железа морфотипов по ориентациям габитусов выделяют три варианта кристаллов с габитусами близкими $\{557\}_\gamma$, $\{225\}_\gamma$ и $\{259\}_\gamma$ - $\{31015\}_\gamma$ (кристаллографические обозначения приводятся в базисе исходной γ -фазы). Причем последняя группа может реализовываться как в форме тонкопластинчатых, так и линзовидных кристаллов. Напомним, в случае линзовидных кристаллов габитус характеризует тонкопластинчатая центральная часть (для краткости, “мидриб”). Как показывает анализ экспериментальных данных [2], скорость роста мидриба (как и тонкопластинчатых кристаллов) является сверхзвуковой, тогда как некая эффективная (средняя) скорость, сопоставляемая формированию линзовидной оболочки мидриба, может быть меньше по порядку величины. То есть по кинетике формирования линзовидного кристалла еще в пионерской работе [15] выделялось 2 этапа. Этот вывод был безусловно подтвержден в исследованиях по влиянию сильного импульсного магнитного поля на образование мартенсита [16]. Было продемонстрировано, что первоначально возникший тонкопластинчатый кристалл при последующей изотермической выдержке за счет бокового подрастания превращается в линзовидный кристалл, играя в нем роль мидриба. Вывод о фактическом соответствии между мидрибом и тонкопластинчатым кристаллом подтвержден и в [17]. Как правило, тонкопластинчатые кристаллы (и мидрибы) полностью двойникованы. Однако, как отмечено в [16], в ряде случаев не удается зафиксировать двойники в мидрибе, который независимо от ориентации электронного пучка выглядит монокристалльным. Указанный факт для совместимости с выводами феноменологического кристаллографического подхода [18, 19] требует формального расширения этого подхода. Действительно, согласно [18, 19], образование кристаллов с габитусами $\{259\}_\gamma$ – $\{31015\}_\gamma$ невозможно без вполне определенного соотношения между объемами основной и двойниковой компонент (обозначим его β), близкого к $\beta = 1.5$. С позиций же динамической теории ориентация габитуса связана исключительно с ℓ -волнами, а эффекту монокристалличности мидриба части кристаллов соответствует переход к вырожденной ДС.

Цель данной работы показать, что динамическая теория позволяет провести отбор s -волн, активных в формировании ДС, и сопоставить эффект образования монокристалльного мидриба с переходом к вырожденной двойниковой структуре, проясняя, каким образом сильное магнитное поле способствует проявлению эффекта.

2. Основные представления о возникновении ДС и ВДС. Напомним, что при γ - α МП двойники превращения контактируют по плоскостям $\{110\}_\gamma$. Такие плоскости задают пары s -волн, распространяющиеся вдоль ортогональных осей $\langle 100 \rangle_\gamma$ и $\langle 010 \rangle_\gamma$ исходной фазы (направления Δ в первой зоне Бриллюэна) со скоростями $v_{s\Delta}$. Действительно, ориентировки нормалей

$$\mathbf{N}_{1,2s} \parallel [110], [1\bar{1}0] \quad (2.1)$$

к плоскостям двойникования тривиально находятся из (1.1) при заменах

$$\mathbf{e}_{\ell\ell} \rightarrow \mathbf{e}_{ss} = 1, \quad \mathbf{n}_{1\ell} \rightarrow \mathbf{n}_{1s} = [010], \quad \mathbf{n}_{2\ell} \rightarrow \mathbf{n}_{2s} = [100] \quad (2.2)$$

Подробно механизм снятия вырождения по ориентировкам плоскостей двойникования обсуждается в [3]. Если возникновение НВС, инициирующего ℓ -волны, сопровождается более или менее синхронизованным возникновением внутри области локализации НВС и возбужденной области в форме тонкого колеблющегося параллелепипеда, инициирующего возбуждение пар s -волн, то результирующий УВП способен корректно описать формирование тонкопластинчатых двойникованных кристаллов (или двойникованных центральных областей линзовидных кристаллов). Причем основные компоненты ДС физически выделены, так как именно они инициируются действием волн, двойниковые же прослойки возникают в силу когерентной связи контактирующих областей решетки.

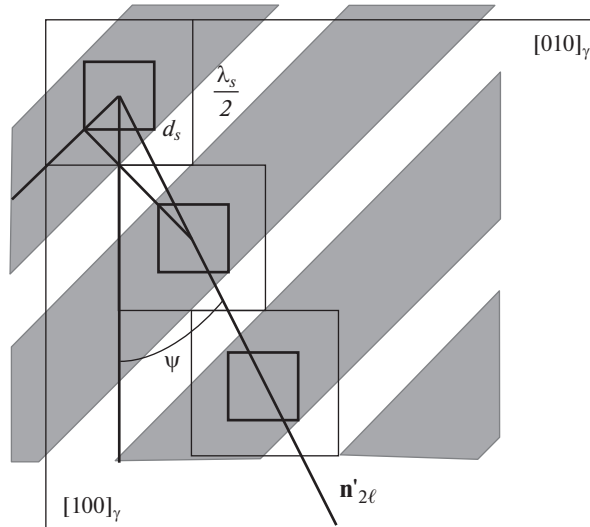


Рис. 2

Процесс индуцированного воспроизводства возбужденной s -ячейки реализуется после прохождения за одно и то же время двух катетов треугольника в направлениях $[1\bar{1}0]_{\gamma}$ и $[110]_{\gamma}$ суперпозицией s -волн, а гипотенузы треугольника со скоростью, равной $v'_{2\ell}$ -проекции на плоскость (001) скорости ℓ -волны $\mathbf{v}_{2\ell}$, несущей деформацию сжатия. На рис. 2 этой проекции соответствует положение единичного вектора $\mathbf{n}'_{2\ell}$, составляющего с направлением $[100]_{\gamma}$ острый угол ψ .

При скорости прохождения катетов равной $\sqrt{2}v_{s\Delta}$ получаем условие

$$v_{s\Delta} = v'_{2\ell} \cos \psi \quad (2.3)$$

При гармоническом описании пороговой деформации считается, что потеря устойчивости решетки исходной фазы происходит в области с поперечным размером $d_s < \lambda_s/2$. Тогда для отношения β_{nw} долей компонент ДС находим

$$\beta_{nw} = 4\tilde{d}_s / (1 + \operatorname{tg}\psi - 4\tilde{d}_s), \quad \tilde{d}_s = d_s / \lambda_s < 1/2 \quad (2.4)$$

Заметим, что соотношение (2.4) соответствует, в общем случае, формированию регулярной слоистой структуры (в том числе, двойниковой структуры). Пример, приведенный на рис. 2, относится к соотношению долей компонент $\beta_{nw} = 2$.

Согласно (2.4), случай ВДС соответствует выполнению требования

$$1 + \operatorname{tg}\psi - 4\tilde{d}_s = 0 \quad (2.5)$$

Такой вариант, ведущий к сингулярности $\beta_{nw} \rightarrow \infty$, связан с непрерывным описанием, не учитывающим дискретность кристаллической среды. На рис. 3, взятом из [3], представлена система чередующихся сдвигов в основной (более широкой) и дополнительной компонентах регулярной слоистой структуры при соотношении компонент 2/1. Когерентность сопряжения компонент, как очевидно из рис. 3, указывает на возможность снятия сингулярности путем рождения дислокации на месте двойниковой прослойки. Действительно, минимальная толщина слоя между основными компонентами ДС равна расстоянию между ближайшими атомными плоскостями $(110)_{\gamma}$, то есть $a/\sqrt{2}$, где a -параметр ГЦК-решетки. Если относительное смещение соседних

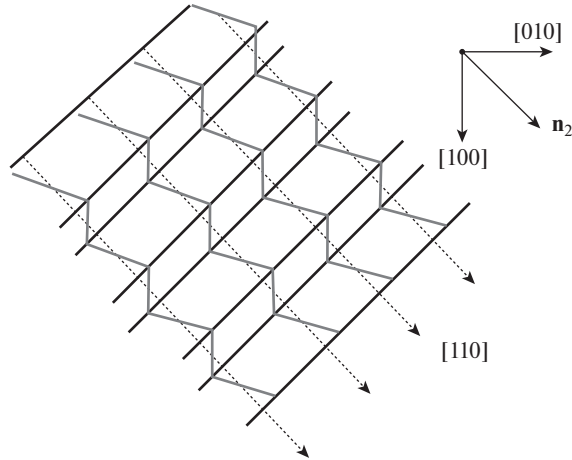


Рис. 3

плоскостей достигнет такой же величины, соответствующей вектору Бюргера полной дислокации, естественно ожидать рождения дислокационной петли, основные сегменты которой имеют винтовую ориентировку. Ясно, что величина деформации сдвига в двойниковой компоненте при этом составляет $\text{tg}\varphi_{\text{tw}} = 1$. Поскольку двойниковая компонента находится в обрамлении пары основных компонент ДС, каждая из основных компонент вносит в относительное смещение соседних плоскостей равный вклад $a/2\sqrt{2}$. Ранее было показано [3], что при двойниковании первый быстрый этап деформации связан с действием s -волн, причем при равенстве скоростей следует ожидать и равенства величин деформаций сжатия и растяжения: $\varepsilon_{1s} = |\varepsilon_{2s}| = \varepsilon_s$. Равенство относится не только к пороговым ε_{sth} , но и к финишным значениям деформации первого этапа ε_{sf} . Это означает, что и величина деформации результирующего сдвига в основной компоненте ДС, имеющей толщину $d_s\sqrt{2}$, уже на первом этапе деформации составляет $\text{tg}\varphi_{\text{bas}} = \varepsilon_{\text{sf}}$. Отсюда следует, что рождение дислокаций возможно при выполнении условия

$$d_s\sqrt{2}\varepsilon_{\text{sf}} = a/2\sqrt{2}, \quad d_s\varepsilon_{\text{sf}} = a/4 \quad (2.6)$$

Напомним [3], в случае, когда двойниковая компонента реально образуется, естественно полагать, что финишная бейновская деформация сжатия ($|\varepsilon_{2B}| \leq 0.2$) в двойниковой области достигается уже на первом этапе деформации, тогда как в основной компоненте может быть достигнута лишь меньшая деформация растяжения. В случае с ВДС вместо двойниковой мартенситной прослойки в намеченной УВП слоистой структуре рождаются дислокации, что требует несколько меньших, чем $|\varepsilon_{2B}|$ (но того же порядка), деформаций ε_{sf} . Уточнение величины ε_{sf} возможно, если учесть, что, согласно (2.4), максимальное значение $d_{s\text{max}} = \lambda_s/2$. Значит, определение величины λ_s из дополнительного условия позволило бы с помощью (2.6) найти и значение ε_{sf} . Таким дополнительным условием является соотношение (2.3) для скоростей s - и ℓ -волн. Реализация указанного алгоритма позволяет объяснить [20] появление дислокационной структуры в кристаллах мартенсита с габитусами, близкими к $\{557\}_\gamma$. Причем не сложно показать, анализируя закон дисперсии фононов для Δ -направления, что условие (2.3) может быть точно выполнено при ориентации вектора $\mathbf{n}'_{2\ell}$ близкой к $[110]_\gamma$, то есть при $\psi \leq \pi/4$. Ясно, что сохранение согласованности действия s - и ℓ -волн облегчает преодоление межфазного барьера, имеющего конечное значение при температуре M_s .

3. Согласование скоростей s - и ℓ -волн при учете квазипродольности ℓ -волн. Заметим, что для двойникования в кристаллах с габитусами $\{3\ 10\ 15\}_\gamma - \{259\}_\gamma$ условие (2.3), оптимальное для формирования регулярной ДС, в приближении продольных волн не выполняется при наблюдаемых значениях [21] упругих модулей. Однако, как показывает анализ [3], реальные волновые нормали $\mathbf{n}_{1,2\ell}$ относятся к квазипродольным волнам, и учет квазипродольности существенно сказывается при уточненном (количественном) описании морфологических признаков. Наряду с ориентацией нормали требуется знание и векторов поляризации $\mathbf{u}_{1,2\ell}$. Кроме того, ясно, что пороговый процесс связан с распространением энергии, а значит, с групповыми скоростями волн \mathbf{v}_g . Известно [22], что проекция групповой скорости на направление волновой нормали совпадает с фазовой скоростью. Значения же фазовых скоростей упругих волн по известным упругим модулям находятся из уравнения Кристоффеля, причем собственные векторы тензора Кристоффеля коллинеарны векторам поляризации волн, а собственные значения задают квадраты скоростей. В принципе, этой информации достаточно, чтобы проверить возможность выполнения условия (2.3), в котором $v_{2\ell}'$ будем считать проекцией на плоскость $(001)_\gamma$ групповой скорости волны, несущей деформацию сжатия.

Наиболее простым и наглядным для демонстрации следствий учета квазипродольности ℓ -волн является вариант, при котором единичный вектор волновой нормали $\mathbf{n}_{2\ell}$ квазипродольной волны лежит в плоскости симметрии кубической решетки $(001)_\gamma$, а вектор $\mathbf{n}_{1\ell}$ продольной волны коллинеарен $[001]_\gamma$. Тогда при $\mathbf{n}_{1\ell} = [001]_\gamma$, $\mathbf{n}_{2\ell} = [\cos\psi, \sin\psi, 0]_\gamma$, согласно (1.1), получаем

$$N_{1,2\ell} \parallel [\cos\psi \sin\psi \pm \alpha_{\ell\ell}]_\gamma \quad (3.1)$$

Учитывая, что позиции среднего по величине индекса в записи нормали N соответствует позиция единицы при записи главной оси сжатия (в нашем случае $[100]_\gamma$), будем рассматривать для определенности кристаллы с габитусом $(10\ 3\ 15)_\gamma$. Тогда $\tan\psi = 3/10$, и из (2.5) определяем значения $\tilde{d}_s = d_s/\lambda_s$, отвечающие формированию ВДС:

$$\tilde{d}_s = d_s/\lambda_s = (1 + \tan\psi)/4 = 0.325 \quad (3.2)$$

Из уравнения Кристоффеля [22] при направлении $\mathbf{n}_{2\ell} = [\cos\psi, \sin\psi, 0]_\gamma$, составляющем угол ψ с осью $[100]_\gamma$, следует выражение для фазовой скорости $v_\ell(\psi)$

$$v_\ell(\psi)/v_\Delta = \sqrt{1 + \left(\frac{C_L}{C_{11}} - 1\right) (\sin 2\psi)^2} \quad (3.3)$$

где C_L и C_{11} упругие модули, задающие скорости продольных волн в направлениях осей симметрии второго (v_Σ) и четвертого (v_Δ) порядка, соответственно при $\psi = \pi/4$ и $\psi = 0$. Легко убедиться, что при подстановке в (3.3) значений измеренных упругих модулей [21] в области сравнительно малых углов

$$\frac{v_\ell(\psi)}{v_\ell} > \frac{1}{\cos(\psi)} \quad (3.4)$$

Для кристаллов с габитусами близкими $\{31015\}_\gamma - \{2\ 5\ 9\}_\gamma$ угол ψ меняется от $\approx 16.7^\circ$ до $\approx 21.8^\circ$, и неравенство (3.4) выполняется, только усиливаясь при переходе от v_Δ к $v_s < v_\Delta$. Но этот вывод относится к приближению плоских продольных волн, для которого фазовая и групповая скорости совпадают. Однако при нормали $\mathbf{n}_{2\ell}$, принадлежащей плоскости симметрии, интересующая нас волна является квазипродольной с вектором поляризации $\mathbf{u}_{2\ell}$, лежащим в плоскости симметрии. Вектор $\mathbf{u}_{2\ell}(\psi)$ -собственный век-

тор тензора Кристоффеля, соответствует собственному значению $[v_\ell(\psi)]^2$ и составляет с осью $[100]_\gamma$ угол ψ_u . Матричные элементы тензора Кристоффеля имеют вид:

$$\begin{aligned} \rho\Lambda_{11} &= C_{44} + (C_{11} - C_{44}) \cos^2 \psi, & \rho\Lambda_{22} &= C_{44} + (C_{11} - C_{44}) \sin^2 \psi, \\ \rho\Lambda_{12} &= \rho\Lambda_{21} = [(C_{12} + C_{44}) \sin 2\psi]/2 \end{aligned} \quad (3.5)$$

где ρ – плотность материала, а C_{11} , C_{12} , C_{44} – независимые упругие модули кубического кристалла. С помощью (3.3) и (3.5) получаем

$$\operatorname{tg}\psi_u = \frac{C_{11} + (C_L - C_{11})(\sin 2\psi)^2 - C_{44} + (C_{44} - C_{11})(\sin \psi)^2}{(C_{12} + C_{44})\sin 2\psi/2} \quad (3.6)$$

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + (\operatorname{tg}\psi_u)^2}}, \quad u_2 = \frac{\operatorname{tg}\psi_u}{\sqrt{1 + (\operatorname{tg}\psi_u)^2}} \quad (3.7)$$

При известных проекциях n_k и u_j единичных векторов волновой нормали и поляризации ℓ -волны компоненты $v_{\ell i}^g$ вектора групповой скорости \mathbf{v}_ℓ^g находятся, согласно [22], с помощью соотношения

$$(\rho v_\ell) v_{\ell i}^g = C_{ijkm} u_j u_m n_k \quad (3.8)$$

где v_ℓ – величина фазовой скорости, C_{ijkm} – тензор модулей упругости, а по повторяющимся индексам проводится суммирование. С помощью (3.6)–(3.8) для угла ψ_g между групповой скоростью \mathbf{v}_ℓ^g и направлением $[100]_\gamma$ получаем

$$\operatorname{tg}\psi_g = \frac{n_2(C_{11}u_2^2 + C_{44}u_1^2) + u_1u_2n_1(C_{44} + C_{12})}{n_1(C_{11}u_1^2 + C_{44}u_2^2) + u_1u_2n_2(C_{12} + C_{44})} \quad (3.9)$$

Расчеты ориентаций векторов поляризации и групповой скорости квазипродольной волны выполнялись при использовании данных [21] об упругих модулях сплава Fe–31.5Ni (в ТПа): $C_L = 0.218$, $C_{44} = 0.112$, $C' = 0.027$ при температуре $M_s = 239$ К. Тогда

$$C_{11} = C_L + C' - C_{44} = 0.133, \quad C_{12} = C_L - C' - C_{44} = 0.079, \quad C_{44} = 0.112 \quad (3.10)$$

Результаты расчетов на основе данных (3.10) приведены в табл. 1.

Комментируя данные таблицы, заметим, во-первых, что значения групповой и фазовой скоростей связаны соотношением

$$v_\ell^g = v_\ell(\psi) / \cos(\psi_g - \psi) \quad (3.11)$$

Во-вторых, в отличие от неравенства (3.4) для фазовой скорости, в случае групповой скорости получаем противоположное неравенство

$$v_\ell^g / v_\Delta \approx 11.2027 < 1 / \cos \Psi_g \approx 1.333 \quad (3.12)$$

Это означает, что учет дисперсии фононов, ведущий к монотонному уменьшению групповой скорости s -волн v_s^g при возрастании квазиимпульса q_s в направлении Δ , выделит конкретное значение q_s , для которого (после замены $v_\Delta \rightarrow v_s^g$) неравенство (3.12)

Таблица 1

$\operatorname{tg}\psi = 0.3$	$\operatorname{tg}\psi_u \approx 0.85643$	$\operatorname{tg}\psi_g \approx 0.88206$	$\Psi_g - \psi$	$v_\ell(\psi) / v_\Delta$	$v_\ell^g(\psi) / v_\Delta$
$\Psi \approx 16.699^\circ$	$\Psi_u \approx 40.577^\circ$	$\Psi_g \approx 41.414^\circ$	24.715°	1.0925	1.2027

превращается в равенство. Следовательно, если в качестве скорости ℓ -волны рассматривается групповая скорость v_ℓ^g , условие (2.3) согласования скоростей волн может быть выполнено для вполне определенных s -волн.

Найдем квазиимпульс s -волны, при котором выполняется требование (2.3). Для этого используем полученную ранее аналитическую интерполяцию закона дисперсии фононов ϵ_k в Δ -направлении [10], хорошо согласующуюся как с измерениями скоростей звука [21], так и с данными нейтронных исследований [23]. Закон дисперсии ϵ_k вдоль $\langle 001 \rangle_\gamma$ для $0 \leq k \leq k_{\max} = 2\pi/a$ (a – параметр решетки) в безразмерных переменных y и x аппроксимируется функцией

$$1 - y = (1 - x)^p, \quad y = \epsilon_k / (\epsilon_k)_{\max}, \quad x = k/k_{\max} \quad (3.13)$$

Например, для сплава Fe30Ni с ГЦК решеткой соответствие с экспериментальными данными достигается при $p \approx 1.733$. Для групповых $v_s^g(x) = dy/dx$ скоростей s -волн имеем:

$$v_s^g(x) = dy/dx = p(1 - x)^{p-1}, \quad v_s^g(0) = v_\Delta = p \quad (3.14)$$

Полагая $v_\ell^g/v_s^g = 1.3334273 = (v_\ell^g/v_\Delta)(v_\Delta/v_s^g) = 1.202712(v_\Delta/v_s^g)$, находим $(v_s^g/v_\Delta) \approx 0.901971$. Тогда при $p = 1.733$ из (3.14) получаем $x \approx 0.1323140$, то есть $q_s = xq_{\max} \approx 0.265\pi/a$. Стало быть, $\lambda_s = 2\pi/q_s \approx 7.5a$. Согласно (2.5), при $\text{tg}\psi = \text{tg}\psi_g = 0.88205925$ формированию ВДС соответствует значение $\tilde{d}_s = d_s/\lambda_s \approx 0.4705$, заметно превышающее $\tilde{d} = 0.325$ в (3.2), найденное в приближении продольных волн. Очевидно, что при переходе к ВДС и $d_s = d_{s\max} \approx 0.941\lambda_s/2$ составляет большую долю от $\lambda_s/2$. И, наконец, из (2.6) получаем $\epsilon_{sf} = 0.066$. Таким образом, при формировании ВДС уже на первом этапе образования тонкопластинчатого кристалла (или мидриба) деформация, инициированная вкладом s -волн, достигает на границах основной компоненты ДС величины $\epsilon_s = 0.066$.

4. Обсуждение результатов. Учет дисперсии s -волн и квазипродольности ℓ -волн позволяют удовлетворить условию (2.3) согласования волн. Поскольку индуцированная инициация новой s -ячейки является пороговым процессом, естественно ожидать, что неравновесная система, стремясь к новому метастабильно устойчивому состоянию, будет использовать с максимальной эффективностью все доступные энергетические ресурсы, это и достигается при учете направления распространения энергии квазипродольной ℓ -волны.

В работе [10] учет квазипродольности ℓ -волны не проводился, и поэтому полного согласования между скоростями волн, отражаемого условием (2.3), не было получено. Тем не менее, ясно, что импульсному характеру начальных “всплесков” сопоставляется целый спектр гармоник [24], а не одна единственная гармоника. Поэтому рассогласование скоростей s - и ℓ -волн сохраняет значение в качестве одной из причин модуляции ДС и ее фрагментации.

Эффект монокристалльности мидриба подразумевает отсутствие двойниковой компоненты, а не идеальное совершенство кристаллической решетки, то есть термин “монокристалльность” в данном контексте имеет условный характер. При переходе к ВДС с учетом дискретности среды вместо идеального смыкания основных компонент ДС возникает серия прослоек (например, в виде дислокационных петель), и, значит, должны наблюдаться нарушения монокристалльности с частотой следования прослоек между основными компонентами ДС. Заметим, что в [25] сообщалось о наблюдении мелких дислокационных петель в структуре мартенсита высокоуглеродистой стали.

В рассмотренном примере для наибольшей наглядности волновая нормаль квази-продольной ℓ -волны (несущей деформацию сжатия) расположена в плоскости симметрии $(001)_\gamma$, а нормаль продольной ℓ -волны (несущей деформацию растяжения) направлена вдоль оси $[001]_\gamma$. Это позволило получить легко обозримое аналитическое описание. При учете отклонений от указанных ориентаций ℓ -волн длина реальных s -волн, удовлетворяющих (2.3), может возрасти, тогда частота следования прослоек в ВДС будет уменьшаться, а степень приближения к монокристалличности мидриба увеличиваться. Полезно также иметь в виду, что указание кристаллографических индексов габитусов, например, семейства $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$, относится к некоторому центру реального распределения габитусов. Такое “рассеяние” ориентировок отражает неоднородность упругих полей дислокационных петель, приводящих к варьированию НВС и вариантов УВП, наследующих информацию об упругих полях в области локализации стартового состояния. Это означает, что реальным будет и варьирование величины $\text{tg}\psi$ в (2.5). В частности, ясно, что рост значений $\text{tg}\psi$ (при $0 \leq \psi \leq \pi/4$) способствует увеличению значения \tilde{d}_{\max} , сопоставляемого с переходом к ВДС. Напомним, что расчет направления групповой скорости (см. п. 3) приводит к значению угла ψ_g , близкому к $\pi/4$. Предельному значению $\tilde{d}_{\max} = 1/2$ при описании пороговой деформации ϵ_{th} в гармоническом приближении сопоставляется случай $\epsilon_{th} = 0$ на границах s -ячейки с шириной $\lambda_s/2$. Таким образом, рост значения \tilde{d}_{\max} , в сочетании с формированием ВДС, может косвенно указывать на снижение величины ϵ_{th} , либо, в более общей формулировке, на возникновение условий надбарьерного движения.

Переходя к обсуждению влияния сильного магнитного поля на мартенситное превращение, следует разделять термодинамические и динамические причины возможного влияния. Прежде всего, отметим, что влияние поля наиболее ярко проявляется для сплавов, имеющих низкие температуры M_s и обладающих значительным магнито-стрикционным эффектом. В таких сплавах сильное магнитное поле приводит к резкому увеличению M_s , что объясняется с термодинамических позиций [16] как следствие смещения температуры фазового равновесия из-за различия намагниченности фаз (намагниченность мартенсита заметно больше, чем у аустенита). Это объяснение существенно дополняется в динамической теории. Во-первых, есть основания считать, что составы сплавов соответствуют состоянию с большим значением критического диаметра зерна D_c (при диаметрах зерен $D \leq D_c$ превращение не происходит вплоть до температуры абсолютного нуля). Поэтому при величинах D , превышающих D_c (но того же порядка), МП протекает при низких температурах. В [26–28] показано, что величина D_c определяется комбинацией физически значимых параметров, в частности, модулем разности между средней энергией $\bar{\epsilon}_d$ неравновесных d -электронов (активных в генерации фононов) и химическим потенциалом μ . Увеличение $|\bar{\epsilon}_d - \mu|$ в сильном магнитном поле (понижается μ за счет объемной магнито-стрикции) сопровождается резким падением величины D_c и соответственным ростом M_s . Во-вторых, сильное магнитное поле приводит к существенному вкладу в инверсную населенность состояний d -электронов, что обеспечивает повышение амплитуд колебаний (а значит, и деформаций) генерируемых упругих волн. Наиболее ярко этот аспект влияния поля выражается в ориентационном эффекте, когда при ориентации поля вдоль оси симметрии 4 порядка $([001]_\gamma)$ образуются лишь кристаллы мартенсита, габитусы которых составляют наименьшие углы с направлением поля [2, 16, 29, 30]. На наш взгляд, именно этот аспект наиболее существен для обеспечения надбарьерного движения и, в частности, реализации ВДС, если величина \tilde{d} близка к \tilde{d}_{\max} .

Касаясь перспектив использования динамических моделей формирования ДС и ВДС, хотелось бы обратить внимание на формирование кристаллов с габитусами близкими к $\{110\}$. Такие (или близкие) габитусы наблюдаются в цветных сплавах [5].

Поскольку описание габитусов дается парой волн, бегущих в ортогональных направлениях $\langle 100 \rangle$, их скорости равны, а значит, равны и деформации при переходе к финишным значениям. Это обстоятельство позволяет продвинуться в аналитическом описании тетрагональности мартенситных кристаллов, изменению их удельного объема [14] и приводит к хорошему совпадению с результатами для мартенситного превращения в эквиатомном сплаве $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{50}$ [31]. Заметим, что применительно к сплавам железа такой вариант габитусов интересен в связи с формированием зоны тонких кристаллов, примыкающих к мидрибу линзовидных кристаллов.

5. Заключение. Динамическая теория формирования регулярных слоистых структур при МП, включая двойники превращения, позволяет выполнить предельный переход к вырожденной структуре двойников превращения с учетом дискретности кристаллической среды. Впервые показано, что в случае формирования тонкопластинчатых кристаллов с габитусами $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ (или мидрибов линзовидных кристаллов) возможно выполнение условия согласования для скоростей коротковолновых (s) и длинноволновых (ℓ) смещений при учете квазипродольности ℓ -волн, ведущей к существенным отклонениям векторов поляризации и групповой скорости от волновой нормали. Отсутствие у части кристаллов двойниковой компоненты (эффект монокристалльности мидриба), обнаруженный ранее в экспериментах по влиянию сильного импульсного магнитного поля на протекание МП, интерпретируется как переход к вырожденной двойниковой структуре. Этому переходу способствует появление дополнительного вклада в генерацию упругих волн неравновесными электронами, связанного с влиянием сильного магнитного поля.

Благодарности. Авторы признательны участникам XXI Зимней школы по механике сплошных сред (г. Пермь, 18–22 февраля 2019 г.) и международной конференции MGCTF 2019 (Санкт-Петербург, 1–5 июля 2019 г.) за обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977. 240 с.
2. Кащенко М.П. Волновая модель роста мартенсита при γ – α превращении в сплавах на основе железа. Изд. 2-е. испр. и дополн. М.–Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. 280 с.
3. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при γ – α превращении в сплавах железа. Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун-т, 2009. 98 с.
4. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая модель сверхзвукового роста мартенситных кристаллов // УФН. 2011. № 4. С. 345–364.
5. Warlimont H., Delaey L. Martensitic transformations in copper-silver-and gold-based alloys. Oxford: Pergamon Press, 1974. = Варлимонт Х., Дилей Л. Мартенситные превращения в сплавах на основе меди, серебра и золота. М.: Наука, 1980. 206 с.
6. Штремель М.А. Прочность сплавов. Часть II. Деформация. М.: МИСИС, 1997. 527 с.
7. Кащенко М.П., Чащина В.Г., Вихарев С.В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов. I. Управляющий волновой процесс и снятие вырождения по ориентации двойниковых границ при мартенситных превращениях // ФММ. 2010. № 3. С. 212–222.
8. Кащенко М.П., Чащина В.Г., Вихарев С.В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов. II. Предпереходные состояния и соотношения объемов двойниковых компонент // ФММ. 2010. № 4. С. 323–335.
9. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Ключевая роль двойников превращения при сравнении результатов кристаллогеометрического и динамического анализа для тонкопластинчатого мартенсита // ФММ. 2013. № 10. С. 894–898.
10. Kashchenko M.P., Latypov I.F., Chashchina V.G. Correlation of velocities of the waves controlling the thin-plate α -martensite formation and the modulation of the transformation twin structure // Letters on materials. 2017. № 2. P. 146–150.

11. *Кащенко М.П., Чащина В.Г.* Влияние затухания коротковолновых смещений на формирование двойников превращения в кристаллах α -мартенсита // ФММ. 2017. № 4. С. 327–331.
12. *Kashchenko M.P., Kashchenko N.M., Chashchina V.G.* Dynamic options for forming transformation twins // *Materials Today: Proceedings*. 2017. V. 4. P. 4605–4610.
13. *Кащенко М.П., Кащенко Н.М., Чащина В.Г.* Влияние изменения длин волн коротковолновых смещений на формирование фрагмента двойниковой структуры кристаллов α -мартенсита // ФММ. 2018. № 1. С. 3–8.
14. *Kashchenko M.P., Kashchenko N.M., Chashchina V.G.* The formation of martensite crystals with a degenerate structure of transformation twins // *Letters on materials*. 2018. № 4. P. 424–429.
15. *Bunshah R.P., Mehl R.F.* Rate of propagation of martensite // *Trans. AIME*. 1953. V. 197. P. 1251–1258.
16. *Счастливец В.М., Калетина Ю.В., Фокина Е.А.* Мартенситное превращение в магнитном поле. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322 с.
17. *Shibata A., Murakami T., Morito S., Furuhashi T., Maki T.* The origin of midrib in lenticular martensite // *Materials Transactions*. 2008. № 6. P. 1242–1248.
18. *Wechsler M.S., Lieberman D.S., Read T.A.* On the theory of the formation of martensite // *Journal of Metals*. 1953. № 11. P. 1503–1515.
19. *Bowles J.S., Mackenzie J.K.* The crystallography of martensite transformations I // *Acta Metallurgica*. 1954. № 1. P. 129–137.
20. *Кащенко М.П., Кащенко Н.М., Чащина В.Г.* Интерпретация кристаллов пакетного мартенсита в сплавах железа как кристаллов с вырожденной структурой двойников превращения // Тез. докл. Научн. конф. “XXI Зимняя школа по механике сплошных сред”. Пермь: Изд-во ПФИЦ УрО РАН, 2019. С. 139.
21. *Haush G., Warlimont H.* *Acta Met.* **21**, 400 (1973). Haush G., Warlimont H. Single crystalline elastic constants of ferromagnetic face centered cubic Fe–Ni invar alloys // *Acta Met.* 1973. № 4. P. 401–414.
22. *Федоров Ф.И.* Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965. 388 с.
23. *Hallman E.D., Brockhouse B.N.* Crystal dynamics of nickel–iron and copper–zinc alloys // *Canadian J. Phys.* 1969. V. 47. № 10. P. 11–17.
24. *Кащенко М.П., Кащенко Н.М., Чащина В.Г.* Начальное возбужденное состояние и расходимость волновых пучков как факторы реализации волнового процесса, управляющего ростом двойников превращения // ФММ. 2019. № 5. С. 457–463.
25. *Сатдарова Ф.Ф.* Дислокационная структура мартенситного превращения углеродистой стали // ФММ. 2016. № 4. С. 369–377.
26. *Кащенко М.П., Чащина В.Г.* Проблема критического размера зерна при $\gamma \rightarrow \alpha$ мартенситном превращении. Термодинамический анализ с учетом пространственных масштабов, характерных для стадии зарождения мартенсита // *Физ. мезомеханика*. 2010. № 1. С. 29–35.
27. *Кащенко М.П., Чащина В.Г.* Зависимость температуры начала $\gamma \rightarrow \alpha$ мартенситного превращения от размера зерна // *Физ. мезомеханика*. 2010. № 1. С. 37–45.
28. *Кащенко М.П., Чащина В.Г.* Динамическая модель $\gamma \rightarrow \alpha$ мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна. М.–Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. 133 с.
29. *Кащенко М.П.* Интерпретация ряда характерных морфологических признаков мартенсита систем Fe–Ni, Fe–C в модели фононного мазера // ФММ. 1984. № 5. С. 862–869.
30. *Леонтьев А.А., Счастливец В.М., Ромашев Л.Н.* Габитус и ориентация кристаллов мартенсита, образующихся под действием магнитного поля // ФММ. 1984. № 5. С. 950–957.
31. *Кащенко М.П., Кащенко Н.М., Чащина В.Г., Белослудцева Е.С., Укусников А.Н., Пушин В.Г.* Динамические сценарии формирования мартенсита с габитусами $\{110\}$ в сплаве $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{50}$ // ФММ. 2019. № 8. С. 853–860.