УДК 539.211 : 548.4 : 669.017.3

ЭФФЕКТ РЕАКТИВНОЙ ДВИЖУЩЕЙ СИЛЫ СДВИГОВОГО ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

А. М. Рощупкин

Указано на существование принципиально важной составляющей движущей силы «взрывного» фазового превращения типа смещения, имеющей характер реактивной тяги в механике тел переменной массы и обусловленной скачкообразным изменением импульса кооперативного движения атомов кристалла на перемещающейся когерентной границе раздела фаз.

Рост кристаллов новой фазы в процессе сдвигового превращения происходит, как правило, со скоростями, приближающимися к звуковым [1-3]. Обычно это связывается со значительной величиной «переохлаждения», которое, однако, само по себе не способно объяснить эффект «динамической неустойчивости» кристалла хотя бы из-за действия сил вязкого торможения межфазных границ. Вместе с тем понятно, что природа этого эффекта, обсуждавшегося впервые в [4] для двойникования в одномерной постановке задачи, кроется в самом характере сдвигового превращения, в процессе которого атомы кооперативно смещаются в определенных направлениях с сохранением ближайших соседей [1]. Характеристикой превращения является спонтанная дисторсия, определяемая дуальным произведением единичного вектора нормали $\mathbf{m}$ к инвариантной плоскости и вектора относительного сдвига $\mathbf{s}$ элементов кристалла [2, 3]. Типичной формой зародыша новой фазы является тонкая пластина, ориентированная параллельно инвариантной плоскости [1-3]. Как и в [4], это предопределяет одномерный характер рассматриваемой здесь задачи о динамике роста плоскопараллельной прослойки новой фазы. Обозначим посредством $\xi(t)$ полутолщину такой прослойки, а ее срединную плоскость будем считать совпадающей с плоскостью xOy, что автоматически приводит к выбору направления вектора $\mathbf{m}$ вдоль оси z. Полагая, что все поперечные оси z сечения кристалла имеют одинаковую форму единичной площади, ограничим его размер в продольном направлении координатами $z = \pm L/2$ (рис. 1). В таком случае все рассуждения в дальнейшем можно будет относить только к одной половине кристалла, например $0 \leqslant z \leqslant L/2$. Движение расположенной в этой части кристалла межфазной границы сопровождается кооперативным перемещением атомов в исходной фазе со скоростью $s d\xi/dt$, теряемой при переходе атомов в новую фазу [5]. График поля скоростей, порождаемого движением межфазной границы, изображен на рис. 1. Учитывая его при записи функции Лагранжа рассматриваемой гетерофазной системы, как обычно, в виде разности ее кинетической и потенциальной энергий, будем иметь

$$\mathscr{L} = \frac{\rho s^2}{2}\left(\frac{L}{2} - \xi\right)\left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 - \left[\mu_{\mathrm{I}}\left(\frac{L}{2} - \xi\right) + \mu_{\mathrm{II}}\xi\right]. \quad (1)$$

Здесь ρ — плотность вещества кристалла; μ_{I}, μ_{II} — термодинамические потенциалы единицы объема исходной и новой фаз. Из вида первого слагаемого в (1), представляющего собой суммарную кинетическую энергию атомов кристалла в исходной фазе, можно заключить, что эффективная масса единицы площади межфазной границы

$$M(\xi)=\frac{\rho s^2 L}{2}\left(1-\frac{2\xi}{L}\right) \qquad (2)$$

линейно убывает с увеличением доли новой фазы. Именно это обстоятельство обусловливает специфическую кинетику сдвигового превращения, приводя его к самоускорению. Внешней же движущей силой этого превращения является разность химических потенциалов фаз, учитываемая вторым слагаемым в (1), имеющим с противоположным знаком смысл потенциальной энергии гетерофазной системы.

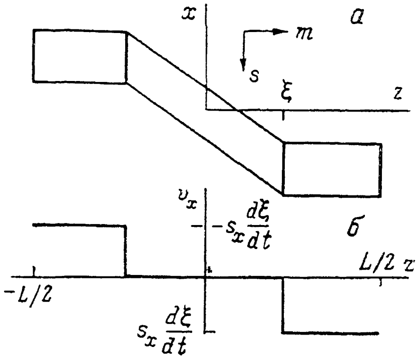

Рис. 1. Геометрия сдвигового превращения (*а*) и эпюра поля скоростей (*б*).

С целью анализа эволюции этой системы под действием внешнего термодинамического стимула $\mu_{\mathrm{I}}-\mu_{\mathrm{II}}$ рассмотрим отвечающее (1) уравнение Лагранжа, которое при включении в него силы динамического торможения границы $-\beta d\xi/dt$ имеет вид

$$M(\xi)\frac{d^2\xi}{dt^2}-\alpha\left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2+\beta\frac{d\xi}{dt}=\mu_{\mathrm{I}}-\mu_{\mathrm{II}}, \qquad (3)$$

где второй существенно отрицательный член в левой части обусловлен реактивным эффектом, имеющим место в динамике тел переменной массы. При этом коэффициент реактивной тяги α определяется как $\rho s^2/2$. Перейдем в (3) с учетом (2) к безразмерным величинам

$$\eta=\frac{2[\xi-\xi(0)]}{L-2\xi(0)}, \quad \tau=\frac{\beta t}{\alpha[L-2\xi(0)]}, \quad \Delta=\frac{4\alpha}{\beta^2}(\mu_{\mathrm{I}}-\mu_{\mathrm{II}}). \qquad (4)$$

Тогда задача о динамике роста прослойки новой фазы сводится к решению следующего уравнения:

$$(1-\eta)\frac{d^2\eta}{d\tau^2}-\frac{1}{2}\left(\frac{d\eta}{d\tau}\right)^2+\frac{d\eta}{d\tau}=\frac{\Delta}{2} \qquad (5)$$

при нулевых начальных условиях $\eta(0)=0$, $d\eta/d\tau\,(0)=0$. Выбирая в качестве новой независимой переменной η, а в качестве неизвестной функции $v(\eta)=d\eta/d\tau$, где $\tau=\tau(\eta)$, придем к дифференциальному уравнению с разделяющимися переменными

$$(1-\eta)v\frac{dv}{d\eta}-\frac{1}{2}v^2+v=\frac{\Delta}{2}. \qquad (6)$$

Его интеграл, отвечающий условию $v(0)=0$, имеет вид

$$\eta=1-\Delta(v^2-2v+\Delta)^{-1}f(v),$$

где в зависимости от значения нормированного термодинамического стимула

$$f(v)=\begin{cases}(1-v/(1-\sqrt{1-\Delta}))^{1/\sqrt{1-\Delta}}(1-v/(1+\sqrt{1-\Delta}))^{-1/\sqrt{1-\Delta}}, & 0<\Delta<1,\\ \exp[2v/(v-1)], & \Delta=1,\\ \exp\left[-\frac{2}{\sqrt{\Delta-1}}\left(\operatorname{arctg}\frac{v-1}{\sqrt{\Delta-1}}+\operatorname{arctg}\frac{1}{\sqrt{\Delta-1}}\right)\right], & \Delta>1.\end{cases}$$

Как видно из рис. 2, *а*, при значениях $\Delta<1$ скорость v монотонно возрастает с увеличением η до своего предельного значения $1-\sqrt{1-\Delta}$, лимитируемого процессами вязкого торможения межфазных границ. Однако при $\Delta>1$ (рис. 2, *а*, *б*) характер зависимости $v(\eta)$ качественно меняется. В этом случае доминирующим является эффект реактивной движущей силы, приводящий в результате к разгону межфазных границ до звуковых скоростей. Таким образом, $\Delta = 1$ является точкой бифуркации уравнения (6). Согласно (4), ей соответствует следующее значение термодинамического стимула:

$$\mu_{\rm I} - \mu_{\rm II} = \beta^2/4\alpha = \beta^2/2\rho s^2.$$

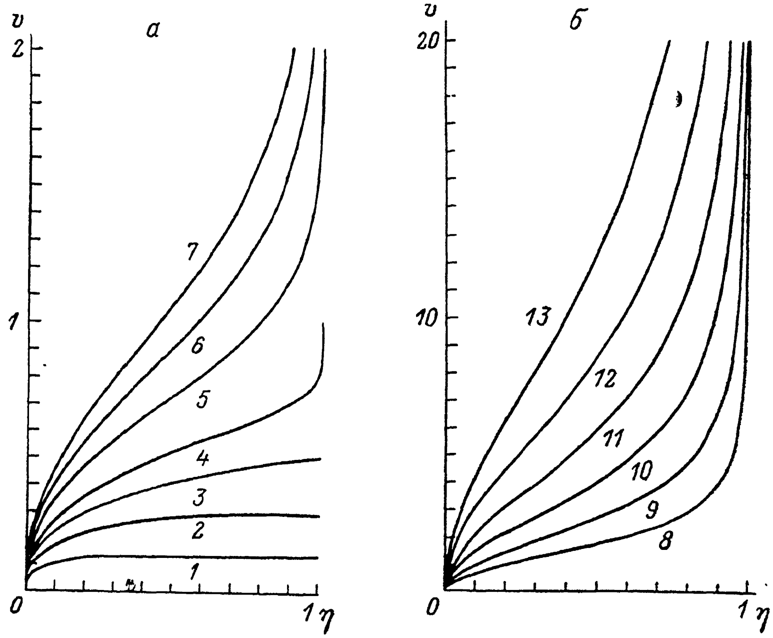

Рис. 2. Зависимость нормированной скорости v роста прослойки новой фазы от ее доли η при возрастающих значениях нормированного термодинамического стимула Δ.
Δ: *1* — 0.25, *2* — 0.5, *3* — 0.75, *4* — 1, *5* — 1.5, *6* — 2, *7* — 2.5, *8* — 5, *9* — 10, *10* — 20, *11* — 40, *12* — 80, *13* — 160.

Принимая здесь $\beta \sim 10^4$ кг/м$^2\cdot$с [6], $\rho \sim 10^4$ кг/м^3 и $s \sim 0.1$ [2], найдем, что бифуркационное значение $\mu_{\rm I} - \mu_{\rm II}$ по порядку величины составляет 1 МДж/м^3. Это хорошо согласуется с известными результатами экспериментальных наблюдений кинетики сдвиговых фазовых превращений в кристаллах [2].

Список литературы

[1] Курдюмов Г. В. // Металлофизика. 1979. Т. 1. № 1. С. 81—91.
[2] Вейман К. М. // Физическое металловедение. Т. 2. М., 1987. С. 365—405.
[3] Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. М., 1978. 807 с.
[4] Лифшиц И. М. // ЖЭТФ. 1948. № 12. Т. 24. С. 1134—1143.
[5] Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М. // Поверхность. 1983. № 10. С. 36—46.
[6] Olson G. B., Cohen M. // Dislocations in Solids. Amsterdam, 1986. V. 7. P. 295—407.

Воронежский политехнический институт

Поступило в Редакцию
5 сентября 1989 г.
В окончательной редакции
1 декабря 1989 г.