

Расчетные значения теплоемкости  $C_p$  кристаллов  $Hg_2X_2$ , полученные по формуле (1), приведены в табл. 2; там же указаны экспериментальные значения теплоемкости  $C_p^{эксп}$  [3-5]. В четвертом столбце табл. 2 показано отклонение расчетных значений теплоемкости от экспериментально измеренных, которое не превышает 0.4 % для  $Hg_2Cl_2$ , 5 % для  $Hg_2(Cl_{0.6}Br_{0.4})_2$  и 1 % для  $Hg_2Br_2$ . Такое хорошее соответствие между рассчитанными и экспериментальными значениями теплоемкости может свидетельствовать о правильности выбранной модели расчета.

Авторы благодарят А. А. Каплянского, М. Ф. Лимонова, Б. А. Струкова за обсуждение результатов работы.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Proc. of the second Intern. Symposium on Univalent Mercury Halider, Trutnov, 1989.
- [2] Barta Č., Silvestrova I. M., Pisarevskij Ju. V., Moiseeva N. A., Beljaev L. M. // Kristall und Technik. 1977. V. 12. N 9. P. 987—996.
- [3] Барта Ч., Жигалов В. П., Задохин Б. С., Коврянов А. Н., Марков Ю. Ф., Чашкин Ю. Р. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 10. С. 3116—3117.
- [4] Барта Ч., Задохин Б. С., Марков Ю. Ф., Тихонов В. В. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 7. С. 2206—2207.
- [5] Барта Ч., Жигалов В. П., Задохин Б. С., Марков Ю. Ф. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2159—2162.
- [6] Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М., 1963. 312 с.
- [7] Барта Ч., Задохин Б. С., Каплянский А. А., Малкин Б. З., Марков Ю. Ф., Морозова О. В., Савченко Б. А. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 12. С. 3664—3670.
- [8] Барта Ч., Задохин Б. С., Марков Ю. Ф., Морозова О. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 5. С. 1515—1518.
- [9] Барта Ч., Задохин Б. С., Каплянский А. А., Малкин Б. З., Марков Ю. Ф., Морозова О. В., Савченко Б. А. // Кристаллография. 1979. Т. 24. № 11. С. 2835—2837.
- [10] Барта Ч., Каплянский А. А., Марков Ю. Ф. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 11. С. 2835—2837.
- [11] Dobrzanski G. F., Kaplyanski A. A., Limonov M. F., Markov Y. F. // Ferroelectrics. 1983. V. 48. N 1. P. 69—80.
- [12] Petrelt J., Mayerova I., Barta C., Kislovskii L. D. // Czech. J. Phys. B. 1973. V. 23. P. 845—854.
- [13] Барта Ч., Лимонов М. Ф., Марков Ю. Ф. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 12. С. 3724—3727.
- [14] Betts D. D., Bhatia A. V., Wyman M. // Phys. Rev. 1956. V. 104. N 1. P. 37—43.
- [15] Задохин Б. С., Каплянский А. А., Лимонов М. Ф., Марков Ю. Ф. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 1. С. 187—195.
- [16] Най Дж. Физические свойства кристаллов. М., 1967. 385 с.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
4 декабря 1990 г.

## ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ЦЕНТРЫ ЗАРОЖДЕНИЯ $\alpha$ -МАРТЕНСИТА И ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ПРИ $\gamma \rightarrow \alpha$ ПРЕВРАЩЕНИИ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА

В. П. Верещагин, М. П. Кащенко

Одна из характерных черт гетерофазных состояний, возникающих в результате кооперативных структурных переходов первого рода в твердых телах — существование вполне определенных закономерностей во взаимном расположении решеток фаз, которые представляются обычно

в виде ориентационных соотношений (ОС). Указанные закономерности связаны с механизмом превращения фаз, поэтому физическая трактовка ОС представляется необходимой для теории структурных переходов такого типа. Классический пример кооперативного структурного перехода  $\gamma \rightarrow \alpha$  мартенситное превращение (МП) в сплавах железа, обсуждение проблемы ОС для которого и является целью работы. Для  $\alpha$ -мартенсита массивных образцов традиционно выделяются [1] два крайних варианта ОС

$$\{111\}_{\gamma} \parallel \{110\}_{\alpha}, \quad \langle 1\bar{1}0 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\bar{1}1 \rangle_{\alpha}, \quad (1)$$

$$\{111\}_{\gamma} \parallel \{110\}_{\alpha}, \quad \langle 1\bar{2}1 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_{\alpha}, \quad (2)$$

(1) — Курдюмова—Закса, (2) — Нишиямы. Формальный переход от (1) к (2) осуществляется поворотом на угол  $\psi \approx 5^\circ$ . Реально (с ошибкой в пределах градуса) наблюдаются промежуточные ориентировки. Возникает вопрос: какой из идеализаций (1), (2) отдавать предпочтение в каждом конкретном случае? Этот вопрос приобретает принципиальное значение, если учесть, что за ОС стоят физические механизмы МП. В кристаллогеометрических теориях [2], использующих однозначную связь между положением плоской границы фаз — габитусной плоскости (ГП), конкретным вариантом ОС между решетками  $\gamma$  и  $\alpha$  фаз и параметрами макроскопического сдвига, — остаются нераскрытыми физические причины, ответственные за морфологические характеристики образующегося мартенситного кристалла МК, поскольку указанные теории имеют по существу формальный характер и идут от конечного продукта превращения. В этом плане более конструктивной представляется точка зрения, связывающая формирование структурных особенностей МК с влиянием упругого поля дислокационного центра зарождения (ДЦЗ), обеспечивающим снижение энергетического барьера для зарождения  $\alpha$  фазы. Последний включает в себя объемный и поверхностный вклады. Геометрически снижение объемного вклада должно проявляться в сближении решеток  $\gamma$  и  $\alpha$  фаз, а снижение поверхностного — в существовании слабоискаженных плоскостей (СП) в поле ДЦЗ. Энергетически выгодная возможность для сопряжения фаз по слабоискаженной плоскости обеспечивается и на стадии роста, если допустить, что граница фаз, выделяемая в процессе распространения пороговой деформации и отождествляемая с ГП [3, 4], совпадает с СП. Эта гипотеза, связывая СП и морфологию (габитус) МК, позволяет на основе анализа упругих полей, типичных для  $\gamma$  фазы дислокаций, отобрать вероятные ДЦЗ и каждому поставить в соответствие МК с определенными структурными признаками. Существование соответствия ДЦЗ  $\rightleftharpoons$  морфология МК имеет принципиальное значение для понимания и самого факта неединственности идеальных ОС, и причин, выделяющих тот или иной вариант ОС в каждом конкретном случае. Действительно, в окрестности бесконечной прямолинейной дислокации с линией  $\Lambda$  есть только одно направление  $\Lambda$ , вдоль которого заведомо отсутствуют искажения решетки и которое сохраняет свою ориентацию. Так что сопряжению фаз, включающему в себя множественные контакты вдоль отрезков параллельных  $\Lambda$ , и лежащих в плоскостях, параллельных плоскости скольжения дислокации, будет отвечать наименьший проигрыш в энергии. Более того, среди плоскостей семейства  $\{111\}_{\gamma}$  плоскости, параллельные плоскостям скольжения ДЦЗ  $\alpha$ -мартенсита в сплавах железа, испытывают наименьшее изменение в ориентации. Перечисленные обстоятельства указывают на причастность упругого поля ДЦЗ к выделению направления и плоскости, а именно направления, параллельного линии  $\Lambda$  ДЦЗ, и плоскости, параллельной плоскости скольжения ДЦЗ, которые должны входить в ОС между решетками МК и  $\gamma$  фазы. Если учесть, что центрами зарождения МК с ГП типа  $\{557\}_{\gamma}$ ,  $\{225\}_{\gamma}$  и  $\{259\}_{\gamma}$  —  $\{3\ 10\ 15\}_{\gamma}$ , наблюдаемыми в сплавах железа, служат, согласно [5, 6], соответственно  $60^\circ$  дислокации с линиями  $\langle 1\bar{1}0 \rangle_{\gamma}$  и  $30^\circ$  дислокации с линиями  $\langle 1\bar{2}1 \rangle_{\gamma}$ , то в качестве идеальных ОС

для МК с ГП из первых двух семейств следует принять ОС (1), а для МК с ГП из последнего семейства — ОС (2). Что касается отклонения наблюдаемых ОС от идеальных, то его естественно связывать с реакцией аустенитной матрицы на кооперативную перестройку решетки, упругими искажениями, возникающими в исходной и образующейся фазах, пластической релаксацией напряжений на границах МК. Однако за начальное, затравочное, нарушение ориентации направлений, входящих в идеальные ОС, ответственной является динамическая пороговая деформация, обеспечивающая на стадии роста МК кооперативное преодоление межфазного энергетического барьера, которая возбуждается в упругом поле ДЦЗ при зарождении МК и переносит «память» о ДЦЗ, распространяясь в волновом режиме.

Подводя итоги, заметим, что включение ориентационных соотношений в набор морфологических характеристик мартенсита, допускающих интерпретацию в рамках развиваемого авторами подхода, подтверждает вывод [5, 6] о наличии двух различных дислокационных центров зарождения  $\alpha$ -мартенсита в сплавах железа.

Авторы признательны А. Е. Романову за обсуждение работы.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Курдюмов Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977, 238 с.
- [2] Wayman C. M. Introduction to the crystallography of martensitic transformations. New York: Mc Millan, 1964. 68 p.
- [3] Кащенко М. П. // Изв. вузов, физика. 1982. № 2. С. 7—9.
- [4] Кащенко М. П., Верещагин В. П. // ФММ. 1984. Т. 58. № 3. С. 450—457; 1985. Т. 60. № 5. С. 855—863.
- [5] Верещагин В. П., Кащенко С. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 5. С. 287—289.
- [6] Верещагин В. П., Кащенко С. М., Кащенко М. П. // V Всесоюзный семинар «Структура дислокаций и механические свойства металлов и сплавов». Тез. докл. Свердловск, 1990. Ч. II. С. 193.

Уральский лесотехнический институт  
им. Ленинского комсомола  
Свердловск

Поступило в Редакцию  
8 октября 1990 г.  
В окончательной редакции  
5 декабря 1990 г.

## МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВИНЕЦСОДЕРЖАЩИХ МАРГАНЦЕВЫХ ПЕРОВСКИТОВ

Г. С. Кринчик, Е. А. Ганьшина, А. Ю. Трифонов

Введение ионов висмута в марганцевые перовскиты приводит к значительному возрастанию их магнитооптической активности (МОА) в районе энергий 4.2—4.5 эВ [1, 2]. По мнению авторов [1, 2], это может быть вызвано 1) проявлением перехода в ионе висмута  $^1S_0$ — $^3P_1$ , энергия которого в различных кристаллических структурах колеблется в пределах 3.7—5.3 эВ [3]; 2) примешиванием  $6p$ -орбиталей висмута к молекулярным орбиталям комплекса  $Mn$ — $O$ , что вызывает значительное увеличение спин-орбитального взаимодействия, а следовательно, и МОА. Анализ данных [1, 2] затрудняется наличием в исследованных веществах двух типов магнитоактивных ионов  $Mn^{3+}$  и  $Mn^{4+}$ , которые должны давать вклад в магнитооптику.

Ионы  $Pb^{2+}$  и  $Bi^{3+}$  изоэлектронны и обладают сходными физическими свойствами, в частности  $6p$ -электроны этих ионов обладают аномально