УДК 537.226

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКУЮ ОРИЕНТИРОВКУ ГАБИТУСНЫХ ГРАНЕЙ КРИСТАЛЛОВ НОВОЙ ФАЗЫ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ МАРТЕНСИТНОГО ТИПА

В. Н. Нечаев, А. М. Рощупкин

В настоящем сообщении приведены результаты исследования влияния точечных дефектов на ориентацию габитусных граней кристаллов новой фазы, образующихся в результате фазового превращения мартенситного типа. Указанный эффект есть экспериментально установленный факт [1, 2]. До настоящего времени в литературе обсуждалась лишь ситуация, когда спонтанная деформация, сопровождающая фазовое превращение, есть деформация с инвариантной плоскостью

$$u^{*}_{ik} = {}^1/_2\,(m_i s_k + m_k s_i),$$

где $\mathbf{m}$ — единичный вектор нормали к инвариантной плоскости; $\mathbf{s}$ — вектор сдвига, характеризующий относительное смещение атомных плоскостей, параллельных инвариантной плоскости. Очевидно, что при этом межфазная граница располагается вдоль инвариантной плоскости, и тогда остается только по известной спонтанной деформации фазового превращения определить кристаллографическую ориентацию инвариантной плоскости [3, 4].

Более общий случай сопряжения двух фаз реализуется, если фазовое превращение происходит в кристалле с точечными дефектами, обладающими разной собственной энергией в контактирующих фазах, ибо в этом случае спонтанная деформация является деформацией общего типа без инвариантной плоскости, поскольку вклад в нее вносят точечные дефекты. Для анализа этой ситуации предположим, что в исходной фазе I с макроскопически однородным распределением точечных дефектов — центров дилатации — с объемной концентрацией c_0^{I} образуется прослойка новой фазы II. Обозначим посредством Ω, ε соответственно изменение объема и свободной энергии фазы, вызываемое одним точечным дефектом. Учитывая, что бездиффузионные фазовые превращения мартенситного типа происходят с достаточно большой скоростью, позволяющей пренебречь диффузией точечных дефектов, запишем спонтанную деформацию фазового превращения в виде

$$u^{p}_{ik} = {}^1/_2\,(m_i s_k + m_k s_i) + {}^1/_3\,\delta_d \delta_{ik}, \tag{1}$$

где $\delta_d = c_0^{\mathrm{I}}\,(\Omega_{\mathrm{II}} - \Omega_{\mathrm{I}})$.

Изменение свободной энергии кристалла ΔF при переходе в новую фазу объема V_{I} исходной фазы в приближении теории слабых растворов, поскольку в напряженном состоянии находится только прослойка [5], равно

$$\Delta F = V_{\mathrm{I}}\left(\frac{1}{2}\,\lambda_{iklm} u_{ik} u_{lm} + c_0^{\mathrm{I}}\,(\varepsilon_{\mathrm{II}} - \varepsilon_{\mathrm{I}}) - (H_{\mathrm{II}} - H_{\mathrm{I}})\,\frac{T - T_0}{T_0}\right), \tag{2}$$

где λ_{iklm} — тензор упругих модулей,

$$u_{ik} = {}^1/_2\,(n_i W_k + n_k W_i) - u^{p}_{ik} \tag{3}$$

— упругая деформация; $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к прослойке, направленный внутрь ее, $\mathbf{W}$ — полный вектор сдвига структурных элементов кристалла при фазовом превращении; H — энтальпия единицы объема; T_0 — температура равновесия фаз в бездефектном кристалле. При записи (3) учтено, что вектор полного геометрического смещения точек среды $\mathbf{u}$ есть непрерывная функция координат [6]. Варьируя выражение (2) по V_Γ и $\mathbf{n}$, придем к условиям механического равновесия прослойки новой фазы

$$\frac{1}{2}\sigma_{ik}u_{ik}+c_0^{\mathrm{I}}(\varepsilon_{\mathrm{II}}-\varepsilon_{\mathrm{I}})-(H_{\mathrm{II}}-H_{\mathrm{I}})\frac{T-T_0}{T_0}=0, \tag{4}$$

$$(\sigma_{ik}-n_i n_l \sigma_{lk})\,W_k=0. \tag{5}$$

Отметим, что (4) согласуется с более общим условием равновесия [6], полученным для произвольной конфигурации границы. Уравнение (5) совместно с условием механического равновесия упругой среды на границе раздела фаз $\sigma_{ik}n_k=0$ позволяет определить как вектор сдвига $\mathbf{W}$, так и вектор $\mathbf{n}$, задающий ориентацию прослойки. Решая эту систему уравнений, находим, что при наличии дефектов прослойка новой фазы поворачивается на угол φ вокруг оси, перпендикулярной плоскости, в которой лежат векторы $\mathbf{m}$ и $\mathbf{s}$

$$\varphi=\arccos\left[\frac{1}{2}\sqrt{\left(1+\frac{\mathbf{ms}}{s}+\frac{2}{3}(1+\nu)\frac{\delta_d}{s}\right)\left(1+\frac{\mathbf{ms}}{s}\right)}-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{2}\sqrt{\left(1-\frac{\mathbf{ms}}{s}-\frac{2}{3}(1+\nu)\frac{\delta_d}{s}\right)\left(1-\frac{\mathbf{ms}}{s}\right)}\right], \tag{6}$$

где ν — коэффициент Пуассона. Выражение (6) упрощается в предельном случае, когда

$$\frac{2}{3}(1+\nu)\frac{\delta_d}{s}\ll\min\left[\left(1+\frac{\mathbf{ms}}{s}\right);\ \left(1-\frac{\mathbf{ms}}{s}\right)\right].$$

Тогда в линейном по концентрации дефектов приближении угол поворота прослойки новой фазы будет определяться формулой

$$\varphi=\frac{1}{3}\frac{1}{\sqrt{1-(\mathbf{ms}/s)^2}}(1+\nu)\frac{\delta_d}{s}. \tag{7}$$

Численные оценки угла поворота показывают, что даже при сравнительно небольшой концентрации дефектов ($c\sim10^{18}\div10^{19}$ см$^{-3}$) φ может составлять несколько градусов, что согласуется с экспериментальными данными [1, 2].

Определяя вторую вариацию ΔF по $\mathbf{n}$, можно убедиться, что полученное решение является устойчивым.

В заключение авторы выражают благодарность за обсуждение работы В. Л. Инденбому, А. П. Леванюку, С. А. Минюкову, А. Л. Ройтбурду.

Литература

[1] Уманский Я. С., Скаков Ю. А. Физика металлов. М., 1978. 352 с.
[2] Курдюмов Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. И. // Металловедение и термическая обработка стали. Ч. II. М., 1983. 367 с.
[3] Sapriel J. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 11. P. 5128—5140.
[4] Батаронов И. Л., Косилов А. Т., Рощупкин А. М. // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 5. С. 1082—1088.
[5] Ройтбурд А. Л. // УФН. 1974. Т. 133. № 1. С. 69—104.
[6] Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М. // Поверхность. 1983. № 10. С. 36—50.

Воронежский политехнический институт
Воронеж

Поступило в Редакцию
6 июня 1988 г.
В окончательной редакции
20 сентября 1988 г.