УДК 539.211+548.4 : 669.017.3

РЕЛАКСАЦИОННОЕ ТОРМОЖЕНИЕ КОГЕРЕНТНЫХ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ

А. Ю. Пасько, Ю. Н. Коваль

В рамках неравновесной термодинамики получена система уравнений, самосогласованно описывающая динамику когерентных межфазных границ при мартенситных превращениях в вязкоупругой сплошной среде с памятью. Рассмотрено торможение движущейся плоской межфазной границы, связанное с обусловленной макроскопическими явлениями релаксации дисперсией модулей упругости среды. Сила торможения в изотропной среде выражена непосредственно через коэффициенты затухания звуковых волн. Проанализирована зависимость релаксационного торможения когерентной межфазной границы от скорости ее движения и ориентации относительно инвариантной плоскости превращения.

1. Мартенситные фазовые превращения в твердых телах как процессы образования и эволюции гетерофазных структур могут быть рассмотрены с позиций неравновесной термодинамики упругой сплошной среды [1, 2]. Основное содержание теории составляет динамика системы межфазных границ, характер и скорость движения которых являются результатом противодействия термодинамического стимула превращения и сил сопротивления перемещению поверхности раздела фаз. Среди механизмов торможения межфазных границ можно выделить 1) необратимые процессы перестройки кристаллической решетки в ходе фазового перехода, 2) испускание движущейся границей упругих волн, 3) макроскопические процессы релаксации в упругом поле движущейся границы. Первые два фактора рассмотрены в [2], учет релаксационного торможения когерентных межфазных границ при мартенситном превращении проводится в настоящей работе. Внутреннее трение в испытывающей превращение среде можно описать через дисперсию ее модулей упругости [1]. Аналогичный подход был использован ранее при изучении релаксационного торможения дислокаций [3].

Наиболее общий вид линейной связи между механическими напряжениями σ_{ik} и упругой дисторсией w_{lm} есть [3]

$$\sigma_{ik} = \hat{\lambda}_{iklm} w_{lm},$$

где $\hat{\lambda}_{iklm}$ — оператор упругих модулей, действующий на функцию координат $\mathbf{r}$ и времени t. Не учитывая далее пространственную дисперсию, представим для сред с памятью это соотношение в форме интеграла свертки по t

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}, t) = \lambda_{iklm}(t) * w_{lm}(\mathbf{r}, t), \tag{1}$$

причем $\lambda_{iklm}(t < 0) = 0$ согласно принципу причинности. Операторный вид закона Гука пропадает после проведения над уравнением (1) преобразования Фурье, что дает

$$\sigma_{ik}(\mathbf{k}, \omega) = \lambda_{iklm}(\omega)\, w_{lm}(\mathbf{k}, \omega). \tag{2}$$

Компоненты тензора модулей упругости $\lambda_{iklm}(\omega)$ являются комплексными функциями частоты ω. Подобно тому, как наличие мнимой части у диэлектрической проницаемости приводит к поглощению энергии электромагнитных волн, мнимые части упругих модулей отвечают затуханию звуковых колебаний среды [4]. Анализ показывает, что движение и дислокаций, и когерентных межфазных границ в среде с дисперсией модулей упругости сопровождается дополнительной силой торможения. Предложенная феноменологическая теория не конкретизирует механизмов релаксации, которые могут быть весьма разнообразными [3, 4].

2. В рамках неравновесной термодинамики [2] получим систему уравнений эволюции гетерофазной структуры при мартенситном превращении в среде, подчиняющейся обобщенному закону Гука (1). Условие сохранения сплошности среды в процессе превращения, характеризующегося в континуальном приближении собственной дисторсией ε_{ik}, приводит к уравнениям [1]

$$e_{ilm}\frac{\partial w_{mk}}{\partial x_l}=-\rho_{ik},\quad \frac{\partial w_{ik}}{\partial t}-\frac{\partial v_k}{\partial x_i}=j_{ik},\tag{3}$$

где e_{ilm} — символ Леви-Чивиты; v_k — скорость элементов среды; величины

$$\rho_{ik}=e_{ilm}n_l\varepsilon_{mk}\delta(\xi),\quad j_{ik}=V\varepsilon_{ik}\delta(\xi)\tag{4}$$

интерпретируются как компоненты тензора плотности дислокаций превращения и тензора плотности их потока и имеют дельтообразные особенности $\delta(\xi)=\int\limits_{\Gamma}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,d\Gamma'$ на межфазной границе Г; n_l — нормаль к поверхности Г; V — скорость движения границы.

Соотношения баланса импульса, энергии и энтропии [2]

$$\rho\frac{\partial v_i}{\partial t}-\frac{\partial\sigma_{ik}}{\partial x_k}=0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\rho\frac{\partial(v^2/2)}{\partial t}-\frac{\partial(v_i\sigma_{ik})}{\partial x_k}+\frac{\partial q_i}{\partial x_i}=0,$$

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{q_i}{T}\right)\geqslant 0\tag{5}$$

действуют во всем объеме кристалла, включая как предельный случай межфазные границы. Здесь ρ — плотность вещества; q_i — тепловой поток; T — температура, которую считаем непрерывной функцией координат; U, S — плотности внутренней энергии и энтропии. Используя интегральную форму упругой части внутренней энергии [5], запишем определяющие уравнения

$$U(t)=U_0^{(\alpha)}+CT(t)+\frac{1}{2}\int\int\limits_{-\infty}^{t}P_{iklm}(t-t_1,\ t-t_2)\,dw_{ik}(t_1)\,dw_{lm}(t_2),$$

$$S(t)=S_0^{(\alpha)}+C\ln T(t),\tag{6}$$

пренебрегая для простоты различием физических характеристик контактирующих фаз. Здесь индекс $\alpha=1$, 2 нумерует фазы, C — теплоемкость, функции $P_{iklm}(t_1,\ t_2)$ непрерывны при $t_1\geqslant 0$, $t_2\geqslant 0$.

После несложных преобразований из (3), (5), (6) получаем

$$\rho\frac{\partial^2 w_{ik}}{\partial t}-\frac{\partial^2\sigma_{kl}}{\partial x_i\partial x_l}=\frac{\partial j_{ik}}{\partial t},\tag{7}$$

$$C\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\partial q_i}{\partial x_i}=V(\Delta U_0-\{\sigma_{ik}\}\varepsilon_{ik})\delta(\xi)+$$

$$+\frac{\partial w_{ik}}{\partial t}\left[\sigma_{ik}-\int\limits_{-\infty}^{t}P_{iklm}(t-t',\ 0)\,dw_{lm}(t')\right]-$$

$$-\frac{1}{2}\int\int\limits_{-\infty}^{t}\frac{\partial P_{iklm}(t-t_1,\ t-t_2)}{\partial t}\,dw_{ik}(t_1)dw_{lm}(t_2), \tag{8}$$

$$q_i\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{1}{T}+V(\Delta F_0-\{\sigma_{ik}\}\varepsilon_{ik})\,\delta(\xi)+\frac{\partial w_{ik}}{\partial t}\left[\sigma_{ik}-\int\limits_{-\infty}^{t}P_{iklm}(t-t',\ 0)\,dw_{lm}(t')\right]-$$

$$-\frac{1}{2}\int\int\limits_{-\infty}^{t}\frac{\partial P_{iklm}(t-t_1,\ t-t_2)}{\partial t}\,dw_{ik}(t_1)\,dw_{lm}(t_2)\geqslant 0, \tag{9}$$

где $\Delta F_0=\Delta U_0-\{T\}\Delta S_0$ представляет собой скачок плотности свободной энергии на межфазной границе, $\Delta U_0=U_0^{(1)}-U_0^{(2)}$, $\Delta S_0=S_0^{(1)}-S_0^{(2)}$, фигурные скобки обозначают полусумму значений заключенной в них функции координат по обе стороны поверхности раздела фаз. В силу независимости необратимых процессов, вносящих вклад в производство энтропии (9), запишем кинетические определяющие уравнения

$$q_i=-\varkappa_{ik}\frac{\partial T}{\partial x_k},\quad \Delta F_0-\{\sigma_{ik}\}\,\varepsilon_{ik}=\beta(V)\,V, \tag{10), (11}$$

где $\varkappa_{ik}$ — коэффициенты теплопроводности, β — параметр вязкого сопротивления движению границы вследствие неравновесного характера собственно фазового перехода. Диссипативное неравенство (9) накладывает также условия на функции $P_{iklm}(t_1,\ t_2)$, которые должны образовывать неотрицательно определенную интегральную форму

$$-\int\int\limits_{-\infty}^{t}\frac{\partial P_{iklm}(t-t_1,\ t-t_2)}{\partial t}\,dw_{ik}(t_1)\,dw_{lm}(t_2)\geqslant 0$$

и производить модули упругости по правилу

$$\lambda_{iklm}(t)=P_{iklm}(0,\ 0)\,\delta(t)+\frac{\partial P_{iklm}(t,\ 0)}{\partial t}. \tag{12}$$

Из соотношений (1), (3), (7), (8), (10)—(12) следуют уравнение для поля упругой дисторсии

$$\rho\frac{\partial^2 w_{ik}}{\partial t^2}-\lambda_{klmn}*\frac{\partial^2 w_{in}}{\partial x_l\partial x_m}=\rho\frac{\partial j_{ik}}{\partial t}-e_{imp}\lambda_{klmn}*\frac{\partial\rho_{pn}}{\partial x_l} \tag{13}$$

и уравнение теплопроводности

$$C\frac{\partial T}{\partial t}-\varkappa_{ik}\frac{\partial T}{\partial x_i\partial x_k}=V(\{T\}\,\Delta S_0+\beta V)\,\delta(\xi)-$$

$$-\frac{1}{2}\int\int\limits_{-\infty}^{t}\frac{\partial P_{iklm}(t-t_1,\ t-t_2)}{\partial t}\,dw_{ik}(t_1)\,dw_{lm}(t_2), \tag{14}$$

которые совместно с уравнением баланса движущих сил превращения и сил сопротивления (11) самосогласованно описывают динамику когерентных межфазных границ при мартенситном превращении в среде с дисперсией модулей упругости.

3. В дальнейшем удобно перейти к Фурье-представлению, в котором свертке функций соответствует произведение их образов. Уравнение (13) приобретает вид

$$-\rho w^2\omega_{ik}(\mathbf{k},\ \omega)+\lambda_{klmn}(\omega)\,k_lk_mw_{in}(\mathbf{k},\ \omega)=-i\omega\rho j_{ik}(\mathbf{k},\ \omega)\quad -ik_ll_{imp}\lambda_{klnn}(\omega)\,\rho_{pn}(\mathbf{k},\ \omega)$$

Его решение выражается через Фурье-образ тензорной функции Грина динамического уравнения теории упругости в данной среде $G_{kq}(\mathbf{k},\ \omega)$

$$w_{ik}=w^e_{ik}-i\,(\rho\omega j_{iq}+e_{imp}k_l\lambda_{qlmn}\rho_{pn})\,G_{kq}, \tag{15}$$

где w^e_{ik} — образ внешнего упругого поля.

Пусть плоская бесконечно протяженная межфазная граница движется с постоянной скоростью V вдоль оси x, тогда

$$\rho_{ik}=(2\pi)^3\,e_{i1m}\varepsilon_{mk}\delta\,(k_1V-w)\,\delta\,(k_2)\,\delta\,(k_3),$$
$$j_{ik}=(2\pi)^3\,V\varepsilon_{ik}\delta\,(k_1V-\omega)\,\delta\,(k_2)\,\delta\,(k_3). \tag{16}$$

Из (2), (15), (16), производя над σ_{ik} ($\mathbf{k}$, ω) обратное преобразование Фурье и интегрируя по компонентам волнового вектора k_2 и k_3, находим для напряжений на границе (т. е. при $x=Vt$)

$$\{\sigma_{ik}\}=\{\sigma^e_{ik}\}-\frac{i}{2\pi}\int\int dk_1d\omega\delta\,(k_1V-\omega)\,\lambda_{iklm}\,(\omega)\,(\rho V\varepsilon_{lq}\omega+e_{lsp}e_{plr}\varepsilon_{rn}k_1\lambda_{q1sn}\,(\omega))\times$$
$$\times\,\tilde{G}_{mq}\,(k_1,\ \omega), \tag{17}$$

где σ^e_{ik} — поле внешних напряжений, $\tilde{G}_{mq}$ (k_1, ω) — значения образа функции Грина при $k_2=k_3=0$. В случае изотропной среды

$$\lambda_{iklm}=\rho c_l^2\,(\omega)\,\delta_{ik}\delta_{lm}+\rho c_t^2\,(\omega)\,(\delta_{il}\delta_{km}+\delta_{im}\delta_{kl}-2\delta_{ik}\delta_{lm}), \tag{18}$$

$$\tilde{G}_{mq}=\frac{1}{\rho}\,\delta_{mq}\,\frac{1}{c^2_{(m)}\,(\omega)\,k_1^2-(\omega+i0)^2}, \tag{19}$$

где δ_{ik} — символ Кронекера; $c_{(1)}=c_l$, $c_{(2)}=c_{(3)}=c_t$ — комплексные, зависящие от ω скорости распространения продольных и поперечных упругих волн в среде. Подставляя (19) в (17) и интегрируя по k_1, получаем

$$\{\sigma_{ik}\}=\{\sigma^e_{ik}\}\ -\frac{i}{4\pi}\int d\omega\lambda_{iklm}\,(\omega)\times$$
$$\times\left[V\varepsilon_{lm}\left(\frac{1}{(c_{(m)}\,(\omega)-V)\,\omega-i0}-\frac{1}{(c_{(m)}\,(\omega)+V)\,\omega+i0}\right)+\right.$$
$$\left.+\,e_{lsp}e_{p1r}\varepsilon_{rn}\,\frac{\lambda_{m1sn}\,(\omega)}{\rho c_{(m)}\,(\omega)}\left(\frac{1}{(c_{(m)}\,(\omega)-V)\,\omega-i0}+\frac{1}{(c_{(m)}\,(\omega)+V)\,\omega+i0}\right)\right]. \tag{20}$$

Интересующие нас силы сопротивления обусловлены обратным действием на межфазную границу ее собственного упругого поля, возбуждаемого при движении. Структура выражения (20) показывает, что уравнение (11) можно представить в виде

$$\Delta F_0-\{\sigma^e_{ik}\}\,\varepsilon_{ik}=f_{\rm rad}+f_{\rm rel}+\beta\boldsymbol{V}. \tag{21}$$

Сила радиационного торможения межфазной границы $f_{\rm rad}$, вызванная испусканием движущейся границей упругих волн, появляется при интегрировании полюсов функции Грина, и в соответствии с [2]

$$f_{\rm rad}=\frac{\rho c_lV}{2}\,\frac{1}{1-V^2/c_l^2}\left[e_{11}+\left(1-2\,\frac{c_t^2}{c_l^2}\right)(e_{22}+e_{33})\right]^2+$$
$$+\,2\rho c_tV\,\frac{1}{1-V^2/c_t^2}\,(e_{12}^2+e_{13}^2), \tag{22}$$

где $c=c$ (0), $e_{ik}=(\varepsilon_{ik}+\varepsilon_{ki})/2$. Сила релаксационного торможения границы $f_{\rm rel}$ обусловлена диссипацией упругой энергии в релаксирующей среде: мнимые части модулей упругости являются нечетными функциями ω и соответствующие интегралы в (20) не равны нулю; из (18) и (20) получаем

$$f_{\rm rel}=-\frac{i}{2\pi}\int\frac{d\omega}{\omega}\left[\frac{V^2}{1-V^2/c_l^2\,(\omega)}\left(e_{11}+\left(1-2\,\frac{c_t^2\,(\omega)}{c_l^2\,(\omega)}\right)(e_{22}+e_{33})\right)^2+\right.$$
$$\left.+\,4\,\frac{V^2}{1-V^2/c_t^2\,(\omega)}\,(e_{12}^2+e_{13}^2)-4c_t^2\,(\omega)\left(\left(1-\frac{c_t^2\,(\omega)}{c_l^2\,(\omega)}\right)(e_{22}^2+e_{33}^2)-e_{22}e_{33}+e_{23}^2\right)\right]. \tag{23}$$

Для учета конечной ширины межфазной границы a в рамках макроскопической теории, как и при изучении релаксационного торможения дислокаций, интегрирование в (23) следует ограничить пределами $\pm k_0 V$, где $k_0 \sim 1/a$ [3].

Введем коэффициенты пространственного затухания продольных и поперечных упругих волн в среде $\gamma_{l,t}(\omega) = \operatorname{Im} k_{l,t}(\omega)$. Предположим, что в рассматриваемом интервале частот выполняется неравенство

$$c \frac{\gamma(\omega)}{\omega} \ll 1 - \frac{V^2}{c^2}. \tag{24}$$

В этом случае дисперсия невелика, можно положить $\operatorname{Re} c^2(\omega) \simeq c^2$, $\operatorname{Im} c^2(\omega) \simeq -2c^3\gamma(\omega)/\omega$, и (23) принимает вид

$$f_{\rm rel} = \frac{2\rho c_l^3}{\pi}(A_l e_{11} + (B-1)(e_{22}+e_{33}))^2 \int\limits_0^{k_0V} d\omega \frac{\gamma_l(\omega)}{\omega^2} + \frac{8\rho c_t^3}{\pi}(A_l e_{11}(e_{22}+e_{33}) +$$

$$+ B(e_{22}+e_{33})^2 + A_t^2(e_{12}^2+e_{13}^2) - e_{22}e_{33} + e_{23}^2) \int\limits_0^{k_0V} d\omega \frac{\gamma_t(\omega)}{\omega^2},$$

где

$$A_{l,t} = V^2/(c_{l,t}^2 - V^2), \quad B = (c_l^2 - 2c_t^2)/(c_l^2 - V^2).$$

Пусть скачок собственной дисторсии представляет собой простой сдвиг величины ε, а плоскость межфазной границы составляет угол φ к инвариантной плоскости превращения, причем угол между направлением сдвига и осью поворота границы равен ψ, тогда

$$f_{\rm rel} = \frac{2}{\pi}\rho\varepsilon^2 c_t^3 \left[\frac{c_t}{c_l}\frac{1}{1-V^2/c_l^2}\sin^2 2\varphi \sin^2\psi \int\limits_0^{k_0V} d\omega \frac{\gamma_l(\omega)}{\omega^2} + \right.$$

$$+\left(\frac{V^4}{c_t^4}\frac{1}{1-V^2/c_t^2}(\cos^2 2\varphi + \sin^2\varphi\cos^2\psi) + \right.$$

$$\left. + \left(1 - 2\frac{c_t^2}{c_l^2}\frac{1}{1-V^2/c_l^2}\right)\sin^2 2\varphi \sin^2\psi + \sin^2\varphi\cos^2\psi\right)\int\limits_0^{k_0V} d\omega \frac{\gamma_t(\omega)}{\omega^2}\right]. \tag{25}$$

При некоторых предположениях каждый механизм диссипации упругой энергии описывается своим временем релаксации τ_n, а коэффициент поглощения звука можно представить в виде суммы [3, 4]

$$\gamma(\omega) = \sum_n K_n \frac{\tau_n\omega^2}{1+\tau_n^2\omega^2}. \tag{26}$$

Подставляя (26) в (25) и интегрируя по ω, получаем при $V \ll c$

$$f_{\rm rel} = \frac{2}{\pi}\rho\varepsilon^2 c_t^3 \sum \left[\frac{c_t}{c_l}\sin^2 2\varphi \sin^2\psi K_l \operatorname{arc\,tg}\frac{\tau_l V}{a} + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{V^4}{c_t^4}\cos^2 2\varphi + \left(1 - 2\frac{c_t^2}{c_l^2}\right)\sin^2 2\varphi\sin^2\psi + \sin^2\varphi\cos^2\psi\right)K_t \operatorname{arc\,tg}\frac{\tau_t V}{a}\right]. \tag{27}$$

Анализ выражения (27) приводит к следующим выводам. Сила релаксационного торможения существенно зависит от взаимной ориентации когерентной межфазной границы и инвариантной плоскости мартенситного превращения. Если они строго параллельны, то плотность эквивалентных дислокаций превращения $\rho_{ik} = 0$,

$$f_{\rm rel} = \frac{2}{\pi}\frac{\rho\varepsilon^2}{c_t}V^4 \sum \operatorname{arctg}\frac{\tau_t V}{a},$$

и для достаточно малых скоростей границы $f_{\rm rel} \backsim V^5$. В противном случае даже в состоянии покоя на границе существует скачок напряжений, и при $V \ll a/\tau$ соответствующее слагаемое силы торможения описывается обычным законом пропорциональности $f_{\rm rel} \sim \rho\varepsilon^2 c^3 K (\sin^2 \varphi)\tau V/a \backsim V$, а в области скоростей $a/\tau \lessapprox V \ll c$ имеет порядок величины $f_{\rm rel} \sim \sim \rho\varepsilon^2 c^3 K \sin^2 \varphi$ и не зависит от V. Для всех релаксационных процессов макроскопической природы заведомо выполняется неравенство $c\tau \gg a$ [3], поэтому, несмотря на небольшую величину поглощения звука ($cK \ll 1$), сила релаксационного торможения может быть сравнима с силой радиационного торможения свободной межфазной границы $f_{\rm rad} \sim \rho\varepsilon^2 cV$ [2], а нелинейная зависимость $f_{\rm rel}$ от V, как и в случае дислокаций [3], возможна при довольно малых скоростях движения границы.

В заключение авторы выражают благодарность А. А. Лихачеву за обсуждение работы.

Список литературы

[1] Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М. // Поверхность. 1983. № 10. С. 36—45.
[2] Пасько А. Ю., Коваль Ю. Н. // Металлофизика. 1989. Т. 11. № 3. С. 38—45.
[3] Косевич А. М., Нацик В. Д. // ФТТ. 1966. Т. 8. № 4. С. 1250—1259.
[4] Постников В. С. Внутреннее трение в металлах. М.: Металлургия, 1974. 352 с.
[5] Ильюшин А. А., Победря Б. Е. Основы математической теории термовязкоупругости. М.: Наука, 1970. 280 с.

Институт металлофизики АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
4 апреля 1989 г.