

УДК 548.33; 538.913

УПРАВЛЯЮЩИЙ ВОЛНОВОЙ ПРОЦЕСС И МАТЕРИАЛЬНЫЕ ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ПРИ РЕКОНСТРУКТИВНЫХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ

Кашенко М. П., Чащина В. Г.

*Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург,
mpk46@mail.ru*

Мартенситные превращения (МП) в кристаллических твердых телах представляют собой варианты реализации полиморфизма, особенностью которых является кооперативный характер смещений атомов. В большинстве случаев МП протекают как фазовые переходы первого рода, что предполагает гетерогенный характер зарождения. Для определенности рассматриваются реконструктивные МП, при которых симметрии исходной и конечной фаз не связаны отношением соподчинения. С позиций динамики кристаллической решетки при описании таких МП концепция «мягкой моды» непосредственно не применима. Рост кристаллов осуществляется за счет распространения управляющего процесса, несущего пороговую деформацию. Морфологические признаки, характерные для отдельных мартенситных кристаллов, позволяют в большинстве случаев реконструировать основные черты кристалло-динамики мартенситной реакции и идентифицировать центры зарождения.

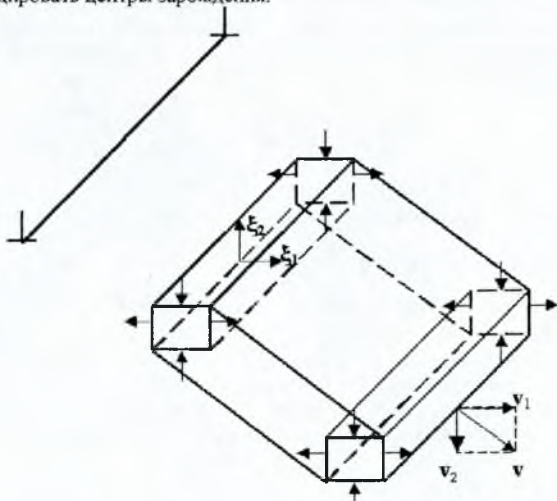


Рис. 1. Волновая модель управления ростом мартенситного кристалла

Для самоорганизующейся (при достижении температуры начала МП) мартенситной реакции достаточно универсальной является модель управляющего волнового процесса (УВП), в которой однородная (на мезомасштабе порядка толщины кристалла) пороговая деформация близка к плоской (типа растяжения сжатия в ортогональных направле-

ниях). Именно УВП задает пластинчатую форму кристаллов и ориентацию их габитусной плоскости, наследуя и перенося информацию об ориентации главных осей тензора деформации упругого поля дефекта в области зарождения. Этот процесс (см. рис.1.) применительно к ИЦК-ОЦК превращению подробно анализируется в [1], [2].

Роль объемного элемента, в котором осуществляется переход коллектива атомов через энергетический барьер (с выделением энергии и возбуждением колебаний), играет трехмерная ячейка в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда. Его грани попарно колеблются в противофазе, стимулируя пороговую деформацию типа растяжение – сжатие во взаимно ортогональных направлениях, совпадающих с направлениями распространения волновых пучков, излучаемых колеблющимся параллелепипедом. Решетка последовательно теряет устойчивость, образуя пластинообразную область там, где налагаются волновые пучки с благоприятным для реализации пороговой деформации полем смещений атомов. Формирование пластинчатого прообраза мартенситного кристалла естественно интерпретировать как перемещение параллелепипеда со скоростью V , являющейся векторной суммой скоростей V_1 и V_2 волновых пучков. Начальное возбужденное состояние в форме колеблющегося параллелепипеда, представляющее собой критическую флуктуацию поля смещений атомов, возникает в упругих полях, создаваемых дефектами. Расчеты упругих полей позволяют идентифицировать дефекты как вполне определенные дислокации (на рис. 1 отрезок, ограниченный символами \perp , соответствует линии дислокации). Ребра параллелепипеда совпадают с выделенными (главными) направлениями ξ_i упругого поля дефекта в области, наиболее благоприятной для зарождения и последующего быстрого роста. Таким образом, направления распространения волновых пучков, а значит, и направление роста кристалла генетически связаны с особенностями упругого поля дефекта в области зарождения. Принципиально важно при этом выполнение кинематического и динамического согласования, позволяющего выразить отношение пороговых деформаций через отношение скоростей упругих волн:

$$\alpha = |V_2 / V_1| = k = \frac{1 - |\varepsilon_2| \left(\frac{\varepsilon_1 (2 + \varepsilon_1)}{|\varepsilon_2| (2 - |\varepsilon_2|)} \right)^{\frac{1}{2}}}{1 + \varepsilon_1} \quad (1)$$

Учитывая, что при пороговой деформации $\varepsilon_1, |\varepsilon_2| \ll 1$, в (1) можно полагать $k \approx \sqrt{\varepsilon_1 |\varepsilon_2|^{-1}}$. Подчеркнем, например, что из (1) следует: при положительном объемном эффекте, когда $\varepsilon_1 > |\varepsilon_2|$, деформацию растяжения несет волна, имеющая меньшую скорость.

Материал может обладать подсистемой, позволяющей реализовать механизм трансформации выделяющейся в ходе превращения энергии для поддержания УВП, тогда рост кристалла мартенсита имеет непрерывный характер. Если же такая подсистема отсутствует или не эффективна для поддержания УВП, то формируются мартенситные кристаллы реечного типа. Один из размеров таких кристаллов лимитируется расстоянием, на которое распространяется управляющий процесс за время превышения начальными амплитудами колебаний (в области зарождения) пороговых значений. В результате процесс формирования мартенсита даже в изотермических условиях будет представлять собой последовательность актов быстрого (атермического) скачкообразного роста, разделенных промежутками времени, длительность которых по порядку величины превышает интервалы времени образования отдельных кристаллов – «реек».

Характерные для наномасштаба черты кристаллодинамики, обусловленные коротковолновыми смещениями, отвечают как за формирование тонкой внутренней двойниковой структуры кристаллов (см. [3], [4]), так и за спектр перетасовочных сме-

щений, меняющих последовательность чередования наиболее плотноупакованных кристаллических плоскостей, а значит, и симметрию кристаллической решетки. Согласно с УВП действие перетасовочных смещений заключается в том, что при наличии фазы растяжения на мезомасштабе в направлении, ортогональном к направлению перетасовочного (существенно неоднородного) сдвига, понижается сопротивление к сдвигу за счет увеличения расстояния между плотноупакованными плоскостями, смена последовательности чередования которых задает новую симметрию решетки. Важно, что при этом самопроизвольное смятение поперечных мод не является обязательным, оно «индуцируется» конечными продольными смещениями. Следует отметить, что механизм стимуляции коротковолновых перетасовок деформацией растяжения может реализоваться не только за счет воздействия УВП указанного выше типа.

В случае ОЦК-ГПУ мартенситного превращения предпочтение естественно отдать УВП, стимулирующему наиболее быструю трансформацию плоскостей $\{110\}_c$ кубической решетки в плотноупакованные плоскости $\{0001\}_h$ гексагональной решетки [5]. Это достигается, если волновой процесс несет деформацию сжатия вдоль направления $\langle 001 \rangle_c$ и растяжения вдоль $\langle 110 \rangle_c$. Уместно подчеркнуть, что развивающаяся (после потери устойчивости исходной ОЦК решетки) однородная (на мезомасштабе порядка толщины кристалла) деформация, меняет атомный потенциальный рельеф, индуцируя статическую неустойчивость к сдвигу каждой второй перестраивающейся плоскости $(110)_c$ в направлении, коллинеарном $[1\bar{1}0]_c$ исходной ОЦК решетки. Этот релаксационный сдвиг (для краткости, его часто также называют "перетасовочным") и завершает формирование ГПУ решетки.

Для динамического анализа самоорганизующейся мартенситной реакции, ключевой, на наш взгляд, является еще одна идея. А именно: высокая скорость превращения и его динамический характер позволяют ожидать, что потерявшая устойчивость пластинкообразная область решетки, стремясь в стесненных условиях к новой симметрии расположения атомов, сохраняет неизменным отношение главных деформаций, заданное УВП. Тогда при пороговых деформациях порядка предела упругости, как следует из (1), это отношение равно α^2 . В результате, все стандартные морфологические признаки (габитусная плоскость, макросдвиг, межфазные ориентационные соотношения), а также относительное изменение объема (и даже параметр решетки мартенсита) нетрудно выразить, рассчитав предварительно направления ξ_i , через один и тот же параметр α . Детальный анализ ОЦК-ГПУ превращения на примере титана этот вывод подтверждает.

Проиллюстрируем сказанное на примере ориентационных соотношений (ОС) для ОЦК-ГПУ перестройки, полагая, что УВП несет деформацию сжатия вдоль направления $\langle 001 \rangle_c$ и растяжения вдоль $\langle 110 \rangle_c$. Кроме выполнения (1) существенно также условие трансформации плоскости, с распределением атомов той же симметрии, что и в $(110)_c$, в плоскость с симметрией расположения атомов, характерной для плотнейшей упаковки:

$$(1 - |\varepsilon_2|) \sqrt{3} = (1 + \varepsilon_1) \sqrt{2}. \quad (2)$$

Количественные оценки проводились с использованием значений (в ГПа) упругих модулей для ОЦК – титана: $C_{11}=134$, $C_{12}=110$, $C_{44}=36$. При ориентации волновых нормалей вдоль осей симметрии, то есть при $\mathbf{n}_1 \parallel [110]_c$ и $\mathbf{n}_2 \parallel [001]_c$, для отношения пороговых деформаций $(\varepsilon_1 / |\varepsilon_2|)_h$ из (1) имеем:

$$(\varepsilon_1 / |\varepsilon_2|)_h \approx \alpha^2 = (2C_{11}) / (C_{11} + C_{12} + 2C_{44}), \quad (3)$$

откуда для титана получаем $(\varepsilon_1 / |\varepsilon_2|)_h \approx 0,8481$.

Обычно ОС задают, указывая параллельные плоскости исходной и конечной фаз (как правило, с наибольшей плотностью упаковки атомов) и, дополнительно, направления в этих плоскостях, составляющие между собой наименьший угол (как правило, направления атомных рядов с плотнейшей упаковкой). В рассматриваемом случае естественно считать, что в ОС входит плоскость, испытавшая наибо́льшую перестройку:

$$\{110\}_c \parallel \{0001\}_h. \quad (4)$$

Остается найти соответствие между кристаллографическими направлениями, лежащими в плоскостях. Для этого достаточно рассчитать угол поворота репера из ортогональных осей $\langle \bar{2}110 \rangle_h$, $\langle 01\bar{1}0 \rangle_h$, лежащих в $\{0001\}_h$, относительно положения репера ортогональных осей $\langle 001 \rangle_c$, $\langle 110 \rangle_c$, лежащих в $\{110\}_c$. Если бы рассматриваемая плоская деформация протекала в нестесненных условиях, то угол поворота равнялся бы нулю. Однако превращающийся материал фактически оказывается в плоском "канале" из аустенита, не потерявшего устойчивости, то есть, вынужден завершать формирование новой симметрии решетки в стесненных условиях без нарушения макроскопической сплошности, что с неизбежностью приводит к развороту решетки. Значит, в условиях быстрого роста трансформация репера $\langle 001 \rangle_c$, $\langle 110 \rangle_c$ в конечный репер ГПУ решетки носит непрерывный характер, обусловленный особенностью развития деформации теряющей устойчивости решетки ОЦК фазы в пространственной пластинчатой области, формируемой УВП, и угол разориентации решеток не равен нулю.

На рис. 2 затемненная область соответствует устойчивому состоянию аустенита. Плоскость рисунка совпадает с плоскостью $(1\bar{1}0)_c$. Оси главных деформаций соответствуют вертикальному и горизонтальному направлениям. Прямоугольник со стрелками соответствует мгновенному (в некоторый момент t_0) положению сечения прямоугольного параллелепипеда, образующего при распространении пластинчатую область (светлая область на рис. 2), играющую роль плоского "канала" в аустените в пороговом режиме (при уровнях деформаций $\sim 10^{-3} + 10^{-4}$).

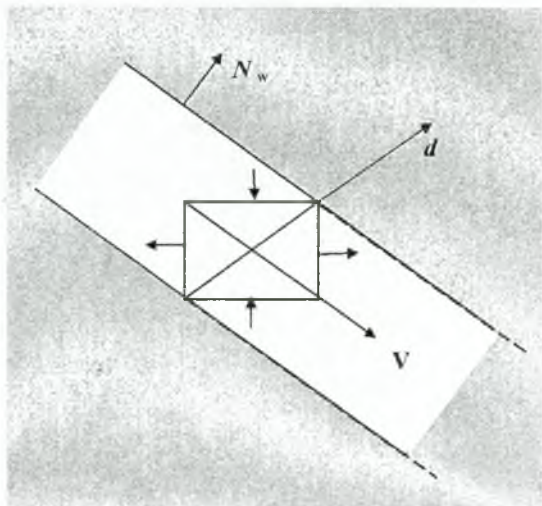


Рис. 2. Формирование канала мартенситной реакции пороговыми деформациями.

Из рис. 2 очевидно, что сечение «канала» последовательно «заметается» диагональю (коллинеарной вектору d) прямоугольника, касающейся обеих стенок «канала». Сам факт касания указывает, что деформация на стенке является пороговой и, в силу малости, не может быть графически отражена при выбранном на рисунке масштабе. Нормаль к габитусной плоскости N задается УВП (см. [1]):

$$N \parallel N_w \parallel n_2 - n_1 \text{ в.} \quad (5)$$

На рис. 3 приведен увеличенный фрагмент рис. 2, с областью материала, содержащей диагональ в момент t_0 (штриховая линия) и в момент $t_0 + \Delta t$ (сплошная линия, коллинеарная вектору d'), соответствующий завершению процесса сжатия – расширения превращающегося материала. Перемещения $\Delta S_{1,2}$ в ходе деформации граничных точек диагонали представлены как результирующие конечных смещений вдоль главных осей деформации. Очевидно, что новое положение диагонали с измененной длиной соответствует повороту в стесненных условиях на угол φ вокруг оси $[1 \bar{1} 0]$. Пунктирные линии, параллельные исходным границам «канала», показывают конечные положения границ (при условии $|\varepsilon_2| > \varepsilon_1$).

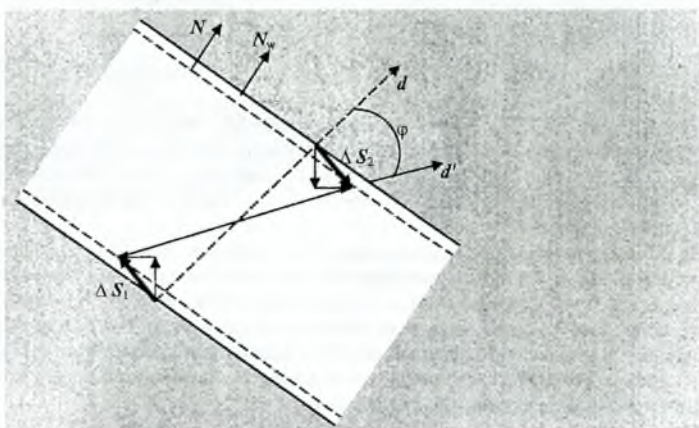


Рис. 3. Угол поворота превращающейся решетки при конечных деформациях

Для нахождения значения угла поворота вычисляется

$$\cos \varphi = \frac{(d, d')}{d d'}, \quad (6)$$

где $(,)$ – символ скалярного произведения векторов, при учете соотношений:

$$d \parallel v_1 - v_2 = n_1 v_1 - n_2 v_2, \quad (7)$$

$$d' \parallel v_1(1 + \varepsilon_1) - v_2(1 - |\varepsilon_2|) = n_1 v_1(1 + \varepsilon_1) - n_2 v_2(1 - |\varepsilon_2|). \quad (8)$$

Подставляя (8) и (7) в (6) и учитывая (2), для идеальной ОЦК – ГПУ мартенситной перестройки окончательно получаем:

$$\cos \varphi(x) = \frac{\sqrt{\frac{3}{2} + x^2}}{\sqrt{(\frac{3}{2} + x^2)(x^2 + 1)}} \quad (9)$$

Таким образом, из динамической модели роста мартенситного кристалла, управляемого волновым процессом, вытекает ориентационное соотношение, в котором впервые, насколько известно авторам, получена аналитическая зависимость ОС от упругих свойств материала, отражаемая параметром x (1):

$$\{110\}_c \parallel \{0001\}_h,$$

$$\langle 001 \rangle_c \wedge \langle \bar{2}110 \rangle_h = \langle 110 \rangle_c \wedge \langle 01\bar{1}0 \rangle_h = \varphi(x) = \arccos \frac{\sqrt{\frac{3}{2} + x^2}}{\sqrt{(\frac{3}{2} + x^2)(x^2 + 1)}}. \quad (10)$$

Связь угла φ , задающего разворот ортогональных реперов, с углом между ближайшими (и одновременно наиболее плотными) направлениями рядов атомов в плоскостях (4) при выполнении идеального соотношения (10) имеет вид:

$$\{110\}_c \parallel \{0001\}_h, \quad [11\bar{1}]_c \wedge [11\bar{2}0]_h = \varphi(x) - \varphi_0, \quad \varphi_0 = \arccos \frac{1 + \sqrt{6}}{2\sqrt{3}} = 5.26439^\circ. \quad (11)$$

При $\varphi(x) - \varphi_0 = 0$ соотношения (11) называют ОС Бюргерса, которое, согласно (10) и (11), выполняется лишь при $x^2 = 2$. Используя данные для титана, находим: $\varphi(x) - \varphi_0 \approx 0.43827^\circ$. Учитывая, что в ОС (10) и (11) явно входят упругие свойства материала, на наш взгляд, эти ОС уместно наименовать как “материальные ориентационные соотношения”.

Проведенное рассмотрение показывает, что впервые на основе динамического подхода в теории мартенситных превращений установлен алгоритм описания ОС (аналогичные заключения можно сделать для всех морфологических характеристик) в виде аналитических зависимостей от упругих свойств исходной фазы. Реально продемонстрировано, как управляющий волновой процесс, задавая наибоыстрейшие пути мартенситной перестройки, предопределяет конечные характеристики, охватывая по глубине управления несколько порядков по деформации.

Список литературы

1. Кашенко М. П. Волновая модель роста мартенсита при γ - α превращении в сплавах на основе железа. - Екатеринбург.: УИФ “Наука”, 1993. - 224 с.
2. Kashchenko M.P. The wave model of martensite growth for the FCC-BCC transformation of iron-based alloys. arXiv: cond-mat/0601569 v3 4 Feb 2006.
3. Чащина В.Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига // дисс. на соискание уч. ст. к. ф.-м. н., Екатеринбург 2000г. - 139 с.
4. Кашенко М. П., Чащина В.Г., Выхарев С.В., Иванов С.В. // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007г.: сборник материалов. Ч. II. - СПб., 2007. С. 278-280.
5. Кашенко М. П., Чащина В.Г. // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007г.: сборник материалов. Ч. II. - СПб., 2007. С. 281.