

На правах рукописи



Джемилев Керим Нильсович

**Расчеты упругих полей дислокационных петель и кристонов с целью  
идентификации центров зарождения мартенсита**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук

Екатеринбург – 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Уральский государственный лесотехнический университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент,  
Чащина Вера Геннадиевна

Официальные оппоненты: Кондратьев Владимир Васильевич,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики металлов имени М.Н. Михеева» Уральского отделения Российской академии наук, главный научный сотрудник лаборатории прочности.

Наймарк Олег Борисович,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт механики сплошных сред» Уральского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией «Физические основы прочности».

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС" (НИТУ "МИСиС") г. Москва

Защита состоится 24 июня 2016г. в 15:00 ч на заседании диссертационного совета Д 212.285.02 на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19, зал заседаний диссертационных советов (ауд. И-420).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», <http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?id=51&rid=256078>.

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2016г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Алексей Владимирович Ищенко

## **Общая характеристика работы**

### **Актуальность темы**

Изучение физических механизмов реализации мартенситных превращений привлекает внимание большого числа исследователей, поскольку эти превращения обладают богатым спектром особенностей и имеют широкое прикладное значение при создании материалов. Применительно к реконструктивным превращениям с ярко выраженными признаками кооперативных превращений первого рода, типичным примером которых является  $\gamma$ - $\alpha$  (ГЦК-ОЦК или ОЦТ) МП в сплавах железа, удалось построить динамическую теорию (главным образом, усилиями научной школы М.П. Кащенко), решающую, в принципе, ряд фундаментальных проблем, не получавших ранее адекватного объяснения. По существу предложена новая парадигма для подобных превращений, способных протекать в сверхзвуковом режиме. Разумеется, дальнейшее развитие динамической теории представляет актуальную задачу физики конденсированного состояния. Достигнутое понимание механизма волнового управления ростом кристалла мартенсита позволяет выделить в качестве первого этапа превращения – процесс возникновения начального возбужденного состояния (НВС) в локальных областях, характеризующихся экстремумами упругого поля деформаций, создаваемых дефектами (как правило, дислокационной природы). В данной работе основное внимание уделяется развитию именно этого этапа, связанного с расчетами упругих полей, как отдельных дислокационных петель, так и их суперпозиций, сопоставляемых носителям сдвига, локализованного в полосах с ориентировкой границ, как правило, не совпадающих с плоскостями плотной упаковки атомов.

### **Степень разработанности темы исследования**

Постановка задачи об идентификации центров зарождения на основе расчетов упругих полей дефектов в идеологическом отношении

осуществлена (и продемонстрировала свою эффективность и конструктивность на ряде примеров) в рамках динамической теории мартенситных превращений. Однако, многообразие конфигураций дефектов, как и вариантов мартенситных реакций в металлах и сплавах, требуют конкретизации и дальнейшего развития расчетных схем, а также расширения области приложения теории. Более подробно эти вопросы освещаются в первой главе, а также в начале четвертой, пятой и шестой главы.

### **Цель работы**

Цель работы состоит в том, чтобы для идентификации дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) мартенсита в русле динамической теории МП расширить спектр моделей ДЦЗ так, чтобы они могли отражать существенные изменения состояния исходной среды. Акцентируется внимание на изменениях, связанных либо с влиянием точечных дефектов, либо с изменением дислокационной структуры в ходе предварительной пластической деформации.

Достижение этой цели потребовало постановки и решения следующих задач исследования:

1. Исследование влияния на упругое поле дислокационных петель упругих полей точечных дефектов;
2. Исследование влияния изменений ориентаций векторов Бюргерса на области локализации НВС для дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) новой фазы;
3. Обобщение методики расчета упругого поля отдельной дислокационной петли на случаи ансамблей дислокационных петель, моделирующих кристонные носители сдвига;

4. Выполнение анализа возможных сценариев формирования бимодального состава макропластины бейнитного феррита в низкоуглеродистых сталях;

5. Идентификация ДЦЗ мартенсита с габитусами  $\{334\}_\alpha$  и  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$  при  $\alpha$ - $\varepsilon$  (ОЦК-ГПУ) мартенситном превращении в  $T_i$ .

### **Научная новизна**

Впервые получены следующие результаты:

1. Создан программный комплекс, позволяющий по известным упругим модулям и конфигурации дислокационных петель находить упругие поля ДЦЗ, проводить анализ их экстремумов и рассчитывать спектр ожидаемых габитусных плоскостей. Существенным развитием, по сравнению с предыдущей версией комплекса, является возможность рассмотрения суперпозиций петель и их дополнения точечными дефектами.

2. Показано, что распространение кристона в метастабильном аустените, формирующего кристалл мартенсита деформации (внутри полосы сдвига с теряющей устойчивость решеткой) может сопровождаться формированием ансамбля мелких кристаллов, обрамляющих «материнскую» пластину. В частности, указанному выводу соответствует наблюдаемый симбиоз между речными кристаллами с габитусами  $\{557\}_\gamma$  и пластинами частично двойникованных кристаллов с габитусами  $\{225\}_\gamma$ , не получавший ранее объяснения с динамических позиций.

3. Наблюдаемое смещение центров распределения ориентировок габитусных плоскостей кристаллов мартенсита систем Fe-C к полюсам  $\langle 259 \rangle_\gamma$  в отличие от  $\langle 3\ 10\ 15 \rangle_\gamma$  для систем Fe-Ni получило естественную интерпретацию, как следствие модификации упругих полей

дислокационных петель типа «дырка» за счет внедрения в них атомов углерода.

4. Наблюдаемое после предварительной интенсивной пластической деформации обогащение спектра ориентировок габитусных плоскостей, также как и сосуществование кристаллов мартенсита с отличающимися ориентационными соотношениями, объяснено как результат модификации типичных дислокационных центров зарождения и формирования новых центров.

5. Впервые установлено, что в рамках динамического подхода для  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения возможен механизм кооперативной перестройки, связанный с наибо́льшей трансформацией не только плоскостей  $\{110\}_\gamma$  аустенита, ведущей к материальным ориентационным соотношениям, близким к соотношениям Нишиямы, но и плоскостей  $\{111\}_\gamma$  аустенита.

6. Предложены и обсуждены сценарии формирования дополнительной компоненты макропластины бейнитного феррита. Косвенные аргументы свидетельствуют в пользу сценария образования этой компоненты по тому же механизму, что и основная компонента, но в пластинчатых областях двойникового аустенита.

7. Показано, что образование кристаллов  $\epsilon$ -мартенсита с габитусами  $\{334\}_\alpha$  и  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ , при быстрой трансформации плоскости  $\{1\bar{1}0\}_\alpha$ , получает естественное объяснение в динамической теории формирования мартенситных кристаллов. Кристаллам с указанными габитусами сопоставляются ДЦЗ, содержащие в качестве основных сегментов, линии  $\Lambda \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$ .

8. Найдено, что кристаллам с габитусами  $\{334\}_\alpha$  сопоставляется краевой вектор Бюргерса, удовлетворяющий критерию устойчивости Франка.

Причем уже одного пересечения двух стандартных для ОЦК решетки систем скольжения оказывается достаточным для формирования ДЦЗ, упругие поля которого способствуют возникновению необходимого для роста в волновом режиме кристалла.

9. Показано, что переход от габитусов с парой равных индексов  $\{334\}_\alpha$  к габитусам с парой близких, но заметно различающихся индексов  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ , связан с модификацией ДЦЗ, векторы Бюргерса которых приобретают смешанные ориентации.

### **Методология и методы исследования**

Работа выполнена в рамках динамической теории мартенситных превращений. Центральную роль в теории быстрого формирования кристаллов играет концепция НВС. НВС локализуются в определенных областях решетки исходной фазы, симметрия которой нарушается упругим полем дефектов, снижающим межфазный барьер. В связи с этим методология в качестве необходимого этапа исследований включает расчет упругих полей дефектов (как правило, отдельных дислокаций или их ансамблей) с последующим отбором областей, благоприятных для локализации НВС. Колебательный характер НВС позволяет определить наиболее вероятные направления волновых нормалей волн, управляющих ростом мартенситного кристалла и рассчитать ожидаемые морфологические признаки. При совпадении результатов расчета с экспериментальными данными можно с большой степенью вероятности идентифицировать дефекты, играющие роль центров зарождения.

### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Процесс формирования определенных ансамблей мелких мартенситных кристаллов, можно интерпретировать как следствие роста «материнского» кристалла, инициирующего их образование.

2. Наблюдаемое различие центров распределения габитусных плоскостей систем Fe-Ni и Fe-C обуславливается модификацией упругого поля дислокационных петель примесью внедрения.
3. Возможность реализации механизма кооперативной перестройки, может быть связана с наибо́льшей трансформацией не только плоскостей  $\{110\}_\gamma$  аустенита, ведущей к материальным ориентационным соотношениям, близким к соотношениям Нишиямы, но и плоскостей  $\{111\}_\gamma$  аустенита.
4. Образованию бимодальной структуры (БМ) реечных компонент макропластины бейнитного феррита в сплавах на основе железа можно сопоставить три сценария формирования дополнительной компоненты БМ с габитусами вблизи  $\{774\}_\gamma$ : упругие поля ДЦЗ модифицируются полем сжатия от предшествующего реечного кристалла (основной компоненты БМ), формирование происходит в области двойникового аустенита либо соответствует инвариантной плоскости упругого поля ДЦЗ вне экстремальных значений главных деформаций.
5. Дислокационные центры зарождения кристаллов мартенсита с габитусами  $\{334\}_\alpha$  и  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$  в титане различаются ориентациями векторов Бюргера по отношению к линиям  $\langle 110 \rangle_\alpha$ .

### **Научная и практическая ценность работы**

Полученные результаты вносят значительный вклад в развитие динамической теории реконструктивных мартенситных превращений, не только подтверждая и количественно уточняя высказанные ранее предположения, но и расширяя спектр возможностей приложения теории при обработке накопленной информации о мартенситных превращениях для большого числа сплавов. Можно прогнозировать, что развитая методология идентификации ДЦЗ будет востребована не только при



анализе наблюдаемой картины превращения, но и при разработке программ дальнейших экспериментальных исследований.

### **Достоверность результатов работы**

Достоверность результатов работы основывается на сравнительном анализе литературной базы данных, использовании проверенных методик расчета и физических положений, логической согласованности работы и соответствии полученных результатов наблюдаемым экспериментальным фактам.

### **Личный вклад автора**

На всех этапах работы (написание литературного обзора, детализация постановки задачи, выполнение расчетов упругих полей дефектов и их обсуждение) автором внесен существенный вклад. В том числе лично автором реализован программный комплекс, позволяющий значительно сократить время анализа упругих полей дислокационных центров зарождения мартенсита.

### **Апробация работы**

Материалы диссертации были представлены на IV и XII Международной школе – семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах (Барнаул, 1998, 2012), II III и IV Международном семинаре «Актуальные проблемы прочности» им. В.А. Лихачева (Старая Русса, 1998, 1999; Великий Новгород, 2000), XXXV и XXXVI семинаре «Актуальные проблемы прочности» (Псков, 1999; Витебск, 2000), на международной конференции «CADAMT' 2001» (Томск, 2001), на XVI и XXI Уральской школе металловедов - термистов (Уфа, 2002; Магнитогорск, 2012), на Всероссийской конференции «Дефекты структуры и прочность кристаллов» (Черноголовка 2002), VI международном симпозиуме «Современные проблемы прочности» им. В.А. Лихачева (Старая Русса, 2003), на Международном научно-техническом семинаре «Бернштейновские чтения по термомеханической

обработке металлических материалов» (Москва. НИТУ-МиСИС, 2011), на Международной научной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Уфа, 2012), XX Петербургских чтениях по проблемам прочности (Санкт-Петербург, 2012), на VII Международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов» (Черноголовка, 2012), XVII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (Самара, 2012).

### **Публикации**

Результаты работы представлены в 17 научных публикациях, включая 7 статей в рецензируемых научных журналах из рекомендованного списка ВАК РФ.

### **Структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы. Она изложена на 150 страницах машинописного текста, включая 36 рисунков, 9 таблиц и список литературы, содержащий 154 наименования.

### **Основное содержание работы**

Во **введении** обоснована актуальность темы исследования, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, практическая ценность и основные защищаемые положения. Приводится информация об апробации работы, достоверности полученных результатов, личном вкладе автора и структуре диссертации.

В **первой главе** приводится информация, существенная для постановки задач исследования. А именно: освещаются основные представления о реконструктивных мартенситных превращениях (на примере превращения в сплавах на основе железа [1]); раскрывается суть концепций гетерогенного зарождения и волнового роста кристаллов

мартенсита; излагаются основные положения кристонной модели формирования полос сдвига в кристаллах с ГЦК-решеткой [4], включая формирование кристаллов мартенсита деформации; приводятся основные направления исследования данной работы, связанные с учетом влияния точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) (для детализации картины зарождения в сплавах внедрения) и необходимостью расчета упругого поля кристонных конфигураций дефектов; перечисляются задачи, решаемые в работе.

Во **второй главе** излагается стандартная аналитическая часть методики выполнения расчетов упругих полей. Приводится обоснование выбора методики расчетов. За основу взят аппарат функций Грина [2].

Для изучения влияния точечных дефектов на упругое поле дислокационной петли тензор дисторсии упругого поля в окрестности петли (и распределенных внутри нее дефектов) в данной работе рассчитывался как сумма тензоров дисторсии от самой петли и от каждого дефекта в отдельности. Аналогично, при рассмотрении упругого поля кристона, также применялся принцип суперпозиции полей, создаваемых каждой петлей ансамбля, образующего кристон.

Расчет упругого поля дислокационной петли базируется на вычислении тензоров дисторсии 4-х прямолинейных дислокаций, образующих петлю. Методика расчета упругого поля прямолинейной дислокации и дислокационных петель подробно рассмотрена в [3] и основывается на введении тензорной функции  $\mathbf{G}(\mathbf{x})$  – функции Грина. Расчет упругого поля точечных дефектов также проводится с использованием этой функции. В конце главы приводятся расчетные параметры, система отсчета и упрощения модели.

В **третьей главе** излагается программная реализация расчетной методики, основанная на принципах объектно-ориентированного

программирования (ООП). В рамках данной концепции были разработаны классы объектов, соответствующие рассматриваемым дефектам, монокристаллу и системе наблюдения. Иерархия классов, относящихся непосредственно к моделируемой системе, приведена на рисунке (Рисунок 1). Абстрактные классы выделены курсивом. Широкими стрелками показана иерархия наследования, а простыми – взаимосвязи между объектами. В скобках приведены имена классов в исходном коде программ.

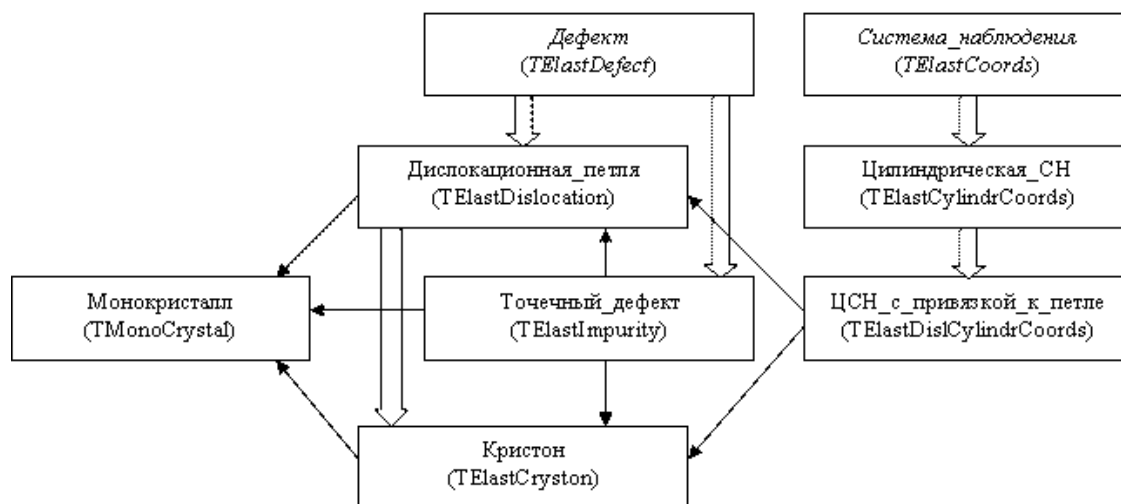


Рисунок 1 – Иерархия классов и связи между объектами

Приводится также информация о составе программного обеспечения, средствах разработки и краткое описание программы расчета упругих полей, ее возможности, способы применения и развития.

**Четвертая глава** посвящена приложению кристонной модели для интерпретации ряда особенностей формирования полос сдвига. В разделе 4.1 кратко обсуждается устойчивость кристонов (геометрические аспекты кристонной модели рассматриваются в первой главе), главным образом, с опорой на критерий Франка. Формирование полос макросдвига в ГЦК-кристаллах с ориентацией границ, отличающейся от плоскостей легкого скольжения, идет в простейшем случае при наличии двух систем

октаэдрического скольжения с пересекающимися плоскостями. Данное обстоятельство указывает на возможность появления новых носителей супердислокационного типа, названных крестонами, вследствие сильного взаимодействия дислокаций двух систем скольжения. Крестоны характеризуются суперпозиционным вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$

$$\mathbf{b} \parallel n \cdot \mathbf{b}_1 + m \cdot \mathbf{b}_2, \quad (1)$$

где векторы  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  относятся к устойчивым дислокациям основной и сопряженной систем скольжения. В качестве наиболее вероятных используются крестоны, удовлетворяющие критерию Франка. Отмечается возможность устойчивости крестонов, моделируемых совокупностями петель с параллельными плоскостями, представленных, например, на рисунке (Рисунок 2).

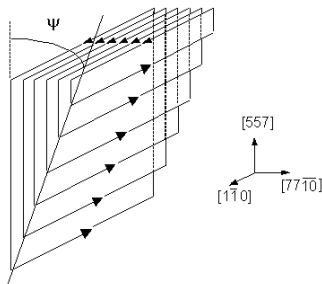


Рисунок 2 – Пример дислокационной модели крестона – носителя простого сдвига  $[77\bar{1}0]_{\gamma} (557)_{\gamma}$

В разделе 4.2 генерация крестонов трактуется как результат действия обобщенного источника Франка–Рида (ОИФР). Критическое напряжение  $\tau_{кр}$

для ОИФР выбирается в стандартной форме:

$$\tau_{кр} \sim \frac{Gb}{L}, \quad (2)$$

где  $G$  – модуль сдвига;

$L$  – длина барьера Ломера–Коттрелла, вблизи которого формируется дислокационный жгут, характеризуемый вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  (1).

В разделе 4.3 для модели ГЦК – кристалла с дополнительной суперрешеткой из рабочих сегментов ОИФР устанавливается связь состава крестона (отношения  $n/m$ ) с пороговыми значениями деформации (через длины сегментов  $L$ ). В этом случае выполняется условие:

$$L^{\perp} \sim \frac{1}{\sqrt{\rho^{\perp}}}, \quad \rho^{\perp} \sim \frac{n}{n+m} = \frac{1}{1+n/m}, \quad (3)$$

где  $\rho^{\perp}$  – плотность барьеров в перпендикулярном к  $[1\bar{1}0]_{\gamma}$  направлении, а  $L^{\perp}$  – параметр суперрешетки. Тогда имеет место соотношение:

$$\frac{L_{\text{ek}}^{\perp}}{L_{\text{ej}}^{\perp}} = \sqrt{\frac{\rho_j^{\perp}}{\rho_k^{\perp}}} = \sqrt{\frac{1+(n/m)_k}{1+(n/m)_j}}, \quad (4)$$

где  $(n/m)_k$  – отвечает отношению долей дислокаций основной и сопряженной систем при деформации  $\varepsilon_k$ , а  $(n/m)_j$  – при деформации  $\varepsilon_j$ , причем  $L_{\text{ek}}^{\perp}$  и  $L_{\text{ej}}^{\perp}$  – экспериментальные значения  $L^{\perp}$ .

В разделе 4.4 показано, что выполненный анализ приводит к разумному соответствию в «реперных» точках кривой  $\sigma$ – $\varepsilon$  для монокристаллов  $[001]$   $\text{Ni}_3\text{Fe}$  при учете анизотропии модуля сдвига по плоскостям  $(hhl)$  и размерах  $L \approx 0.2 L^{\perp}$ . Это позволяет предположить, что кривая  $\sigma(\varepsilon)$  «отслеживает» значения критических напряжений для генерации кристонов, поскольку образование мезо- и макрополос деформации типично в рассматриваемом диапазоне деформаций.

В разделе 4.5 анализируется возможность инициации ансамбля кристаллов мартенсита вблизи полосы сдвига, ориентация границ которой задается кристонным носителем сдвига. Рассмотрение проводится на примере полос сдвига с ориентировками границ типа  $(hhl)_{\gamma}$ :  $(111)_{\gamma}$ ,  $(557)_{\gamma}$  и  $(225)_{\gamma}$ . Исследуются упругие поля при двух вариантах ядер кристона: типа «пластина» (ядро содержит избыточный материал) и типа «дырка». Упругие поля кристонов рассчитываются для железоникелевых сплавов в системе координат, представленной на рисунке (Рисунок 3).

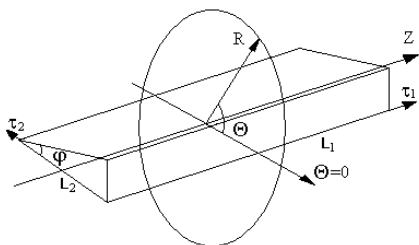


Рисунок 3 – Ориентация цилиндрической системы координат  $(Z, R, \Theta)$ . для расчета упругого поля кристона

На рисунке (Рисунок 4) представлены в наглядной форме результаты расчета. В частности, случай 4) соответствует наблюдаемому варианту симбиоза кристалла с габитусом  $(225)_\gamma$  с ансамблем кристаллов пакетного мартенсита с габитусами  $(557)_\gamma$ .

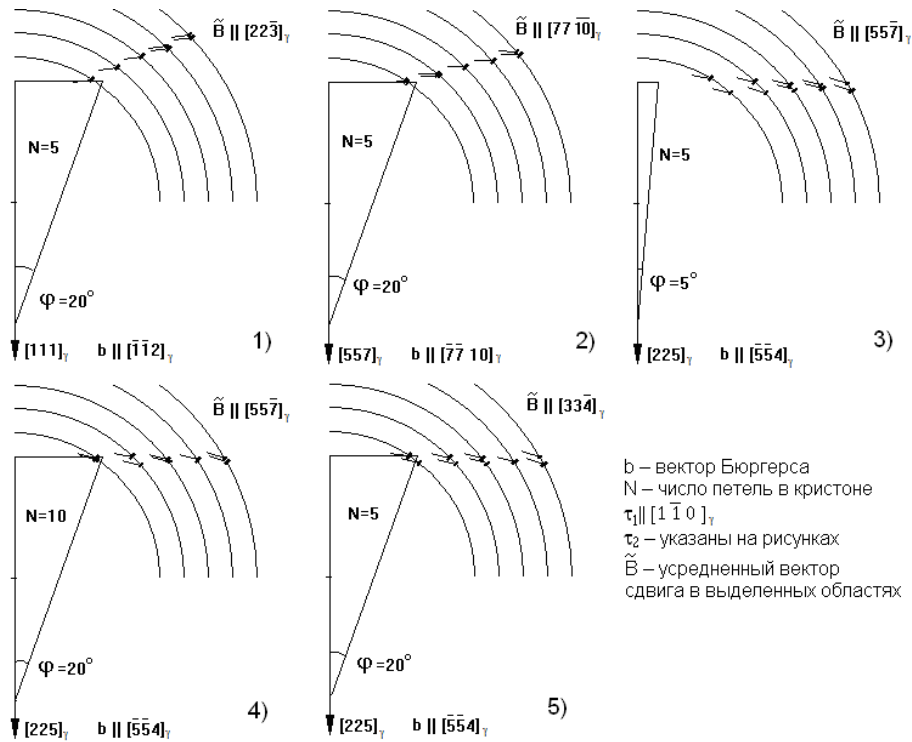


Рисунок 4 – Распределения областей максимального сдвига упругих полей кристонов и областей, в которых собственные векторы  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  коллинеарны осям  $[001]_\gamma$  и  $[110]_\gamma$  ячейки Бейна.

**Пятая глава** посвящена идентификации ДЦЗ мартенсита охлаждения и нижнего бейнита систем Fe-Ni и Fe-C. В **разделе 5.1** показано, что наблюдающееся различие близких габитусов типа  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$  (для систем Fe-(30-33)%Ni) и  $\{259\}_\gamma$  (для систем Fe-(1.4-1.8)масс.%Ni) в динамической теории МП получает естественную интерпретацию как следствие модификации упругого поля призматической прямоугольной дислокационной петли «дырочного» типа (с линиями  $\langle 1\bar{2}1 \rangle$  и  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ ) атомами углерода. В отсутствие примеси внедрения расчетный габитус близок  $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ , тогда как

модифицированный вариант дает  $\{259\}_\gamma$ . Сказанное иллюстрирует рисунок (Рисунок 5), где расчет  $N_w$  выполнен для интервала углов  $90^\circ < \theta < 135^\circ$ .

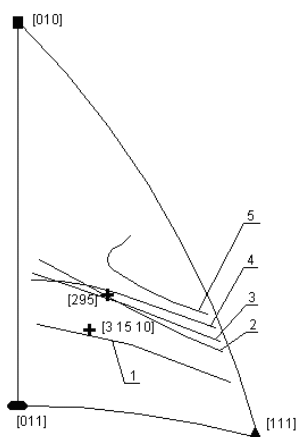


Рисунок 5 – Стереопроекции нормалей  $N_w$ : 1 – без примеси для  $R=200$ ; 2-5 – с примесью для  $R=200, 400, 600, 800$

В разделе 5.2 обсуждается связь различных габитусов с вариантами ориентационных соотношений (ОС) при  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситном превращении в динамической теории. Показано, что после предварительной интенсивной пластической деформации, обогащающей спектр габитусов мартенсита охлаждения, каждому из габитусов может быть поставлены в соответствие свои варианты ДЦЗ и ОС. В частности, достаточно подробный анализ проведен для ДЦЗ, содержащих в качестве основного сегмента линии  $\langle 111 \rangle_\gamma$ . С учетом реальной упругой анизотропии вариант идеальной перестройки плотноупакованных плоскостей за счет плоской деформации оказывается невозможным. Поиск вариантов плоской деформации, приближающихся к идеальному, выполнялся на примере сплава Fe-31.5%Ni из требования близости расчетной ориентации третьей оси (при варьировании векторов Бюргера) тензора деформации упругого поля ДЦЗ к  $\langle 111 \rangle_\gamma$  – направлению. Типичная картина представлена на рисунке (Рисунок 6).

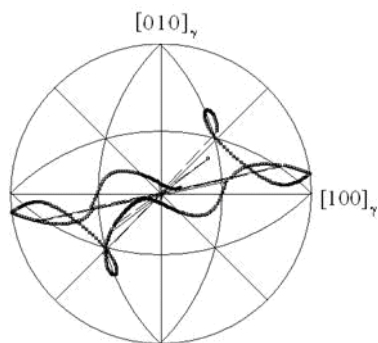


Рисунок 6 – Ориентации векторов  $\xi_3$  тензора деформации упругого поля смешанной дислокации с линией  $\Lambda \parallel [111]_\gamma$  и вектором Бюргера  $\mathbf{b} \parallel [0\bar{1}0]_\gamma$  в анизотропной среде ( $\xi_3$  составляет с  $[111]_\gamma$  наименьший угол  $\approx 0.73^\circ$ )



Следовательно, небольшие разориентировки плоскостей  $\{111\}_\gamma$  и  $\{110\}_\alpha$ , входящих в ОС для свежееобразованного мартенсита, является естественным следствием динамического механизма превращения. По крайней мере, в этом отношении именно ОС Гренингера-Трояно являются предпочтительными.

В разделах 5.2-5.4 анализируется формирование бимодального состава (с габитусами, близкими к  $\{558\}_\gamma$  и  $\{774\}_\gamma$ ) субреек в макропластине бейнитного феррита в динамической теории (Рисунок 7).

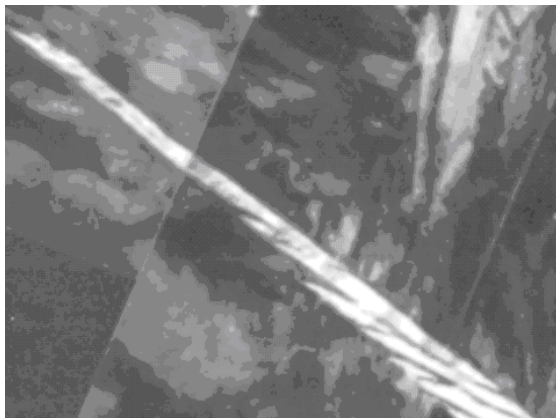


Рисунок 7 – Область пластины бейнитного феррита с бимодальным составом субреек (выделена белым цветом) – фрагмент рисунка 2.3 из [5]

Считается, что кристаллы нижнего бейнитного феррита образуются по мартенситному механизму. Компонента  $\{558\}_\gamma$  близка к стандартному для пакетного мартенсита варианту. Поэтому основное внимание уделяется  $\{774\}_\gamma$  - компоненте. Показано, что ее возникновение может быть связано, как минимум, с двумя основными сценариями. Первый сценарий обусловлен модификацией упругого поля ДЦЗ за счет одноосного поля сжатия вдоль  $\langle 558 \rangle_\gamma$  – направлений, возникающих (в силу объемного эффекта) со стороны появившихся первыми кристаллов с габитусами  $\{558\}_\gamma$ . Второй же сценарий обусловлен формированием бейнита в аустените, имеющем двойниковую ориентировку по отношению к исходному состоянию. Не исключен и вариант сопоставления возникновения кристаллов  $\{774\}_\gamma$  с областью максимума относительного изменения объема в упругом поле ДЦЗ (как в виде одиночных петель, так и кристонов). На рисунке (Рисунок 8) представлен характерный расчет упругого поля ДЦЗ.

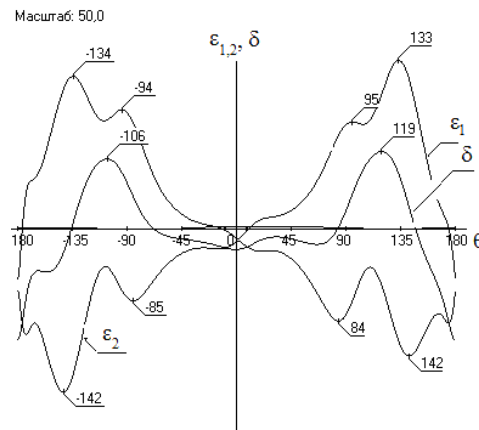


Рисунок 8 – Угловые зависимости собственных чисел  $\epsilon_{1,2}$  тензора деформаций и изменения относительного объема  $\delta$  упругого поля базисной петли для кристонной модели сдвига  $(558)_\gamma [88\bar{1}0]_\gamma$  при  $R = 1500$ ; упругие модули  $C_L = 0.2508$ ,  $C' = 0.0271$ ,  $C_{44} = 0.1034$  (в ТПа)

Области зарождения кристаллов бейнита, как правило, сопоставляются с максимумами значений  $\epsilon_1$  и  $|\epsilon_2|$ .

**Глава 6** посвящена кристаллодинамике образования  $\epsilon$ -мартенсита с габитусами  $\{334\}_\alpha$ ,  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$  в титане. В **разделах 6.1** и **6.2** уточняется информация для постановки задачи. В **разделе 6.3** показано, что кристаллам с габитусами  $\{334\}_\alpha$  сопоставляется краевой вектор Бюргера, удовлетворяющий критерию устойчивости Франка. Причем уже одного пересечения двух стандартных для ОЦК решетки систем скольжения оказывается достаточным для формирования ДЦЗ (с ориентацией основного сегмента дислокационной петли вдоль  $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$  линий), упругие поля которого способствуют возникновению необходимого для роста в волновом режиме кристалла. В **разделе 6.4** найдено, что переход от габитусов с парой равных индексов  $\{334\}_\alpha$  к габитусам с парой близких, но заметно различающихся индексов  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ , связан с модификацией ДЦЗ, векторы Бюргера которых приобретают смешанные ориентации (по отношению к  $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$ ). Отбор направлений волновых нормалей, управляющих перестройкой волн, обусловлен экстремумом

деформации сжатия упругого поля ДЦЗ (соответствующие максимумы деформаций растяжения находятся в близком угловом диапазоне). Типичный результат расчета упругого поля представлен на рисунке (Рисунок 9).

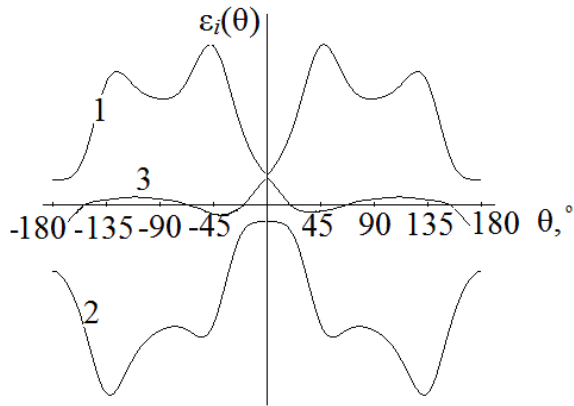


Рисунок 9 – Зависимости  $\varepsilon_i(\theta)$ ,  $i=1, 2, 3$ ;  $\mathbf{B}_2 \parallel [1\bar{1}3]_\alpha$

В **заклучении** отмечается, что успешное создание требуемого программного продукта позволило впервые выполнить содержательный физический анализ нескольких задач, ключом для решения которых, по существу, явилась идентификация ДЦЗ. В качестве базовых ДЦЗ рассматривались дислокационные петли и их суперпозиции, сопоставляемые кристонам. Затем перечисляются важнейшие результаты, отраженные в заключительных частях (4.6, 5.5, 6.5) трех последних оригинальных глав диссертации:

1. Распространение кристона в метастабильном аустените, формирующего кристалл мартенсита деформации (внутри полосы сдвига с теряющей устойчивость решеткой) может сопровождаться формированием ансамбля мелких кристаллов, обрамляющих «материнскую» пластину.
2. Наблюдаемое смещение центров распределения ориентировок габитусных плоскостей кристаллов мартенсита систем Fe-C к полюсам  $\langle 259 \rangle_\gamma$  в отличие от  $\langle 3\ 10\ 15 \rangle_\gamma$  для систем Fe-Ni обусловлено

модификацией упругих полей дислокационных петель типа «дырка» за счет внедрения в них атомов углерода.

3. Наблюдаемое после предварительной интенсивной пластической деформации обогащение спектра ориентировок габитусных плоскостей, также как и сосуществование кристаллов мартенсита с отличающимися ориентационными соотношениями, можно объяснить как результат модификации типичных дислокационных центров зарождения, либо формирование новых центров.

4. Предложены и обсуждены сценарии формирования дополнительной компоненты макропластины бейнитного феррита. Косвенные аргументы свидетельствуют в пользу сценария образования этой компоненты по тому же механизму, что и основная компонента, но в пластинчатых областях двойникового аустенита, что подтверждается совпадением габитусов после перехода от кристаллографического базиса двойникового аустенита к базису исходного аустенита.

5. Трактовка формирования кристаллов  $\varepsilon$ -мартенсита с габитусами  $\{3\ 3\ 4\}_\alpha$  и  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ , как следствия наибоьстрейшей трансформации плоскости получает естественное объяснение в динамической теории формирования мартенситных кристаллов. Кристаллам с указанными габитусами сопоставляются ДЦЗ, содержащие в качестве основных сегментов линии  $\Lambda \parallel \langle 1\ \bar{1}0 \rangle_\alpha$ , но с различающимися векторами Бюргерса.

#### **Список цитируемой литературы**

1. Кащенко, М. П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа / М. П. Кащенко. – Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. – 224с.
2. Теодосиу, К. Упругие модели дефектов в кристаллах / К. Теодосиу. – М.: Мир, 1985. – 352с.

3. Нефедов, А.В. Связь морфологии мартенсита с характеристиками области зарождения в упругих полях дислокаций: дис. ... канд. физ.-мат. наук / А.В. Нефедов. – Екатеринбург. 1997. – 104с.
4. Чашина, В.Г. Развитие динамических моделей управления ростом кристаллов при реконструктивных мартенситных превращениях: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук / В.Г. Чашина. – Екатеринбург, 2011. – 39с.
5. Bhadeshia, H.K.D.N. Bainite in steels / H.K.D.N. Bhadeshia. – 2nd ed. – London: University Press. Cambridge, 2001. – 454p.

### **Список публикаций по теме диссертационной работы**

*Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ:*

1. Кащенко, М.П. Условия генерации кристонов и интерпретация кривой  $\sigma$ - $\varepsilon$  для монокристаллов  $\text{Ni}_3\text{Fe}$  / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // ФММ. – 1999. – Т.88, №3. – С. 17–21 (0,29 п.л. /0,09 п.л.).
2. Кащенко, М.П. Связь различных габитусов с вариантами ориентационных соотношений при  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситном превращении в динамической теории / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т.9, №1. – С. 50–56 (0,41 п.л. /0,17 п.л.).
3. Кащенко, М.П. Возможные сценарии формирования бимодального состава субреек в макропластине бейнитного феррита в динамической теории / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т.9, №1. – С. 452–458 (0,41 п.л. /0,17 п.л.).

4. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика образования  $\varepsilon$ -мартенсита с габитусами  $\{334\}_\alpha$  в титане / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, №9. – С. 67–70 (0,24 п.л. /0,1 п.л.).
5. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика образования  $\varepsilon$ -мартенсита с габитусами  $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$  в титане / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, №10. – С. 115–117 (0,18 п.л. /0,07 п.л.).
6. Кащенко, М.П. Упругие поля кристонов при формировании реечной структуры бейнитного феррита / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана [Электронный ресурс]. – 2013. – №1. – Режим доступа к журналу: <http://technomag.edu.ru/en/doc/529309.html>. – DOI: 10.7463/0113.0529309 (0,81 п.л. /0,41 п.л.).
7. Кащенко, М.П. Инициация формирования ансамбля кристаллов мартенсита кристонным носителем сдвига / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, А.Ф. Рыбалко, Н.М. Рыбалко, В.Г. Чашина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т.12, №1. – С. 89–94 (0,35 п.л. /0,14 п.л.).

*Другие публикации:*

8. Кащенко, М.П. Связь состава кристонов с критической длиной обобщенного источника Франка–Рида / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова, Т.М. Голосова, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Научные труды II Международного семинара «Актуальные проблемы прочности» им. В.А.Лихачева. – Новгород: НовГУ, 1998. – Т.1. – С. 37–41 (0,29 п.л. /0,12 п.л.).
9. Кащенко, М.П. Критическое напряжение генерации кристонов в кристаллах с суперрешеткой при учете анизотропии модуля сдвига / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Научные

- труды III Международного семинара «Современные проблемы прочности» им. В.А. Лихачева. – Новгород: НовГУ, 1999. – Т.1. – С. 141–144 (0,24 п.л. /0,1 п.л.).
10. Кащенко, М.П. Наблюдаемые ориентировки границ полос сдвига и устойчивость кристонов / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чащина // XXXV семинар «Актуальные проблемы прочности»: сборник трудов. – Псков, 1999. – С. 20–23 (0,24 п.л. /0,1 п.л.).
  11. Джемилев, К.Н. Влияние точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения мартенсита / **К.Н. Джемилев**, А.В. Нефедов, М.П. Кащенко // Физика процессов деформации и разрушения и прогнозирование механического поведения материалов: труды XXXVI международного семинара «Актуальные проблемы прочности»: в 2 частях. – Витебск: ВГТУ, 2000. – Ч.II. – С. 506–511 (0,35 п.л. /0,14 п.л.).
  12. Джемилев, К.Н. Влияние точечных дефектов на упругие поля призматических дислокационных петель / **К.Н. Джемилев**, А.В. Нефедов, М.П. Кащенко // Научные труды IV международного семинара «Актуальные проблемы прочности»: в 2т. – Великий Новгород: НовГУ, 2000. – Т.1. – С. 195–199 (0,29 п.л. /0,12 п.л.).
  13. Джемилев, К.Н. Инициация  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения мезоскопическим упругим полем кристона / **К.Н. Джемилев**, М.П. Кащенко // Всероссийская конференция «Дефекты структуры и прочность кристаллов»: тезисы докладов. – Черногловка: СОНГ, 2002. – С. 113 (0,06 п.л. /0,03 п.л.).
  14. Кащенко, М.П. Моделирование упругих полей дефектов / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев** // Научные труды VI международного симпозиума «Современные проблемы прочности» им. В.А.

Лихачева, 20-24 октября 2003г., Старая Русса: в 2т. / под ред. В.Г. Малинина. – Великий Новгород: НовГУ, 2003. – Т.1. – С. 318–323 (0,35 п.л. /0,14 п.л.).

15. Кащенко, М.П. Вероятные дислокационные центры зарождения кристаллов  $\alpha$ -мартенсита охлаждения с габитусами  $\{012\}_\gamma$  после предварительной пластической деформации / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов: материалы XXI Уральской школы металловедов-термистов. – Магн.: Изд-во Магнитогорск гос. техн. ун-та им. Г.И. Носова, 2012. – С. 105–106 (0,12 п.л. /0,05 п.л.).
16. Кащенко, М.П. Вероятные дислокационные центры зарождения кристаллов  $\alpha$  – мартенсита охлаждения, связанные с предварительной пластической деформацией аустенита механическим двойникованием / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // XX Петербургские чтения по проблемам прочности, апрель 2012, Санкт Петербург: сборник материалов. – Ч.1. – С. 236–238 (0,18 п.л. /0,07 п.л.).
17. Кащенко, М.П. Идентификация средствами динамической теории дислокационного центра зарождения мартенсита с габитусами  $\{8\ 9\ 12\}$  при ОЦК-ГПУ превращении в сплавах / М.П. Кащенко, **К.Н. Джемилев**, В.Г. Чашина // 52-я Международная научная конференция «Актуальные проблемы прочности», 4-8 июня 2012г., Уфа: сборник тезисов докладов / отв. за выпуск д-р физ.-мат. наук А.А. Назаров. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2012. – С. 125–126 (0,12 п.л. /0,05 п.л.).