

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Уральский государственный лесотехнический университет»

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

Диссертация на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
доцент Чашина Вера Геннадиевна

Екатеринбург – 2015

Оглавление

Оглавление	2
Введение	4
Глава 1. Информация, значимая для постановки задачи	13
1.1 Характерные черты спонтанного γ - α мартенситного превращения (при охлаждении) в сплавах на основе железа	13
1.2 Основные положения волновой модели роста мартенситного кристалла....	14
1.3 Модель гетерогенного зарождения мартенсита в упругих полях дислокаций, совместимая с волновой моделью роста	16
1.4 Кристонная модель образования полос сдвига в кристаллах с ГЦК-решеткой, включая формирование кристаллов мартенсита деформации	18
1.5 Основные направления исследования данной работы	19
1.5.1. Необходимость учета влияния точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) для детализации картины зарождения в сплавах внедрения	20
1.5.2. Необходимость расчета упругого поля кристонных конфигураций дефектов	21
1.5.3. Задачи, решаемые в работе	22
Глава 2. Методика расчетов	23
2.1 Выбор методики	23
2.2 Нахождение оптимального выражения функции Грина для численных методов вычислений	24
2.3 Методика расчета упругого поля дислокационной петли	27
2.4 Методика расчета упругого поля точечного дефекта	27
2.5 Расчетные параметры, система отсчета и упрощения модели	29
Глава 3. Программная реализация методики расчетов	31
3.1 Актуальность использования методов объектно-ориентированного программирования (ООП) для моделирования системы дефектов	31
3.2 Основные положения ООП в контексте моделируемой системы	32
3.3 Иерархия объектов, и их параметризация	35
3.4 Состав программного обеспечения и средства разработки	39
3.5 Краткое описание программы расчета упругих полей	40
3.6 Возможности развития системы	48
Глава 4. Приложение кристонной модели для интерпретации ряда особенностей формирования полос сдвига	49
4.1 Устойчивость кристонов по критерию Франка	49
4.2 Условия генерации кристонов	50
4.3 Состав кристона и пороговые значения деформации	52
4.4 Интерпретация кривой σ - ϵ для монокристаллов $[001]_{\gamma} \text{Ni}_3\text{Fe}$	55
4.5 Возможность инициации формирования ансамбля кристаллов мартенсита кристонным носителем сдвига	59
4.6 Заключение к главе 4	65

Глава 5. Модифицированные дислокационные центры зарождения мартенсита охлаждения и нижнего бейнита систем Fe-Ni и Fe-C	67
5.1 Влияние точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения мартенсита.....	67
5.1.1. Вводные замечания	67
5.1.2. Результаты расчета и их анализ.....	69
5.2 Связь различных габитусов с вариантами ориентационных соотношений при γ - α мартенситном превращении в динамической теории.....	72
5.2.1. Вводные замечания	72
5.2.2. Качественная постановка задачи.....	74
5.2.3. Пример упругого поля краевой дислокации с линией $[1\ 1\ 1]_{\gamma}$ в изотропной среде.....	77
5.2.4. Упругое поле дислокации с линией $[1\ 1\ 1]_{\gamma}$ в ГЦК решетке.....	80
5.2.5. Заключительные замечания.....	85
5.3 Два сценария формирования бимодального состава субреек в макропластине бейнитного феррита в динамической теории	87
5.3.1. Вводные замечания	87
5.3.2. Дополнительные характеристики морфологии бейнитного реечного феррита и качественная постановка задачи	90
5.3.3. О выборе ориентации векторов n_1 и n_2 при описании габитусов $(hh\ell)$...	92
5.3.4. Сценарий I	94
5.3.5. Сценарий II	98
5.4 Упругие поля кристонов при формировании реечной структуры бейнитного феррита	99
5.4.1. Вводные замечания	99
5.4.2. Упругое поле базисной петли кристонной модели сдвига $(558)_{\gamma}$ $[8\ 8\ \bar{1}0]_{\gamma}$	100
5.4.3. Упругое поле кристона, моделирующего процесс сдвига $(558)_{\gamma}$ $[8\ 8\ \bar{1}0]_{\gamma}$	106
5.4.4. Обсуждение результатов по формированию бейнитного феррита	107
5.5 Заключение к главе 5	109
Глава 6. Кристаллодинамика образования ε -мартенсита с габитусами $\{334\}_{\alpha}$, $\{8\ 9\ 12\}_{\alpha}$ в титане	111
6.1 Условие трансформации плоскости $\{110\}_{\alpha}$ в базисную плоскость $\{0001\}_h$ ГПУ – структуры.....	111
6.2 Анализ упругого поля ДЦЗ с линией $\langle 1\ \bar{1}0 \rangle_{\alpha}$ при краевой ориентации вектора Бюргера и описание габитусов $\{334\}_{\alpha}$	113
6.3 Анализ упругого поля ДЦЗ с линией $\langle 1\ \bar{1}0 \rangle_{\alpha}$ при смешанной ориентации вектора Бюргера и описание габитусов $\{8\ 9\ 12\}_{\alpha}$	116
6.4 Заключение к главе 6	119
Заключение	121
Список сокращений	126
Список литературы	127

Введение

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 γ - α (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 кристолные 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 α - ε (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 γ - α 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 ϵ -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.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. Интерпретация процесса формирования ансамбля мелких мартенситных кристаллов, как следствие роста «материнского» кристалла, инициирующего их образование.

2. Расчет упругого поля дислокационных петель, модифицированного влиянием примеси внедрения, объясняющий причину наблюдаемого различия в центрах распределения габитусных плоскостей систем Fe-Ni и Fe-C.
3. Обоснование возможности реализации механизма кооперативной перестройки, связанного 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. Предложенные сценарии формирования речных компонент макропластины бейнитного феррита в сплавах на основе железа.
5. Идентификацию дислокационных центров зарождения кристаллов мартенсита с габитусами $\{334\}_\alpha$ и $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ в титане.

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 публикациях, включая 7 статей в 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.

В первой главе приводится сжатая информация о характерных чертах мартенситных превращений. Кратко перечисляются ключевые позиции динамической теории для описания этих превращений. Излагаются наблюдаемые особенности образования полос сдвига в монокристаллах с ГЦК решеткой и базисные положения кристального подхода. Заключение содержит список задач, поставленных в диссертации.

Во второй главе (не являющейся оригинальной) для удобства ознакомления с работой излагается стандартная аналитическая часть методики выполнения расчетов упругих полей.

В третьей главе приводится описание программной реализации (являющейся оригинальной) расчетной методики, распространяющей стандартный подход для отдельных дефектов на их суперпозиции.

В четвертой главе обсуждаются две задачи, связанные с ролью кристонов в пластической деформации. Проводится сопоставление эволюции морфологии полос сдвига с ходом кривой σ – ε при одноосном сжатии монокристаллов Ni_3Fe . Кроме того, рассматривается возможность

формирования ансамбля мартенситных кристаллов, инициированного ростом «материнского» кристалла мартенсита.

В пятой главе освещаются вопросы, относящиеся к дислокационным центрам зарождения мартенсита охлаждения и нижнего бейнита систем Fe-Ni и Fe-C, связанные как с влиянием углерода, так и предварительной пластической деформации.

В шестой главе приводятся расчеты упругих полей ДЦЗ и обсуждение особенностей морфологических признаков, наблюдаемых при ОЦК-ГПУ превращении в титане.

В Заключении приводятся основные выводы и перспективы ближайших исследований.

Глава 1. Информация, значимая для постановки задачи

1.1 Характерные черты спонтанного γ - α мартенситного превращения (при охлаждении) в сплавах на основе железа

Согласно [1], решетка высокотемпературной γ -фазы (аустенит) имеет ГЦК структуру, а решетка низкотемпературной α -фазы (мартенсит) – ОЦК для сплавов замещения и ОЦТ решетку для сплавов внедрения.

Спонтанное (при охлаждении) γ - α мартенситное превращение (МП) относится к типу реконструктивных структурных переходов, при которых симметрия высоко- и низкотемпературных фаз не связаны соотношением соподчинения [2]. Это кооперативное превращение обладает выраженными признаками фазового перехода 1-го рода. Кооперативность превращения приводит к совокупности морфологических признаков, связанных между собой. Эти вопросы неоднократно излагались как в обзорах, так и в монографиях (см. напр. [1], [3]-[11]). Поэтому отметим лишь, что наиболее существенной для нашего анализа являются кристаллографические ориентации габитусных плоскостей (ГП) кристаллов α -фазы. В [12] ГП выбрана в качестве базового признака, получающего наглядное описание в схеме (см. п.1.2) волнового роста мартенситного кристалла (МК). Обычно наблюдается небольшое число характерных ориентаций ГП. Так, в сплавах Fe-C, Fe-Ni ГП близки к $\{557\}_\gamma$ и $\{111\}_\gamma$ (до 0.6 мас. % C, до 29 мас. % Ni), $\{225\}_\gamma$ – (0.6-1.4 мас. % C), $\{259\}$ и $\{3\ 10\ 15\}$ – (1.4-1.8 мас. % C, 29-34 мас. % Ni). Кроме того, для решеток фаз имеются ориентационные соотношения, а кристаллы мартенсита могут формировать определенные ансамбли.

Принципиально важно, что скорость роста отдельного МК может превышать скорость продольных упругих волн. Количественные

результаты измерения скорости роста мартенситных кристаллов приведены в таблице (Таблица 1.1, из [12]).

Таблица 1.1 – Экспериментальные данные о скорости роста мартенсита

Материал	Скорость роста, $\times 10^3$ м/с	Источник
Fe – 29 % Ni	1	[13]
Fe – 30% Ni	1.8÷2.0	[14]
Fe – 32% Ni	0.1	[15]
Fe – 32% Ni	1.1 / 0.2	[16]
Fe - 0.35 % C - 8 %	6.6	[17, 18]
Сталь типа 18-8	0.1÷0.2	[19]

Достаточно подробные комментарии к таблице имеются в [12].

1.2 Основные положения волновой модели роста мартенситного кристалла

Считается, что деформация при температуре M_s начала МП близка к пределу упругости, а сама пороговая деформация является плоской с главными значениями, имеющими разные знаки. Тогда ориентацию ГП описывает простая двухволновая модель, впервые предложенная в [20].

Схема, приведенная на рисунке (Рисунок 1.1), наглядно демонстрирует подобную деформацию, порождающую пластинчатую форму МК, и позволяет понять механизм, обеспечивающий высокую (сверхзвуковую) скорость торцевого роста МК. Для этого достаточно учесть, что ГП заматаются линиями, принадлежащими фронтам пар плоских волн с ортогональными волновыми векторами, а деформируемая в каждый момент времени волнами область имеет вид вытянутого прямоугольного параллелепипеда (с поперечными размерами порядка половин длин волн $\lambda_{1,2}/2$).

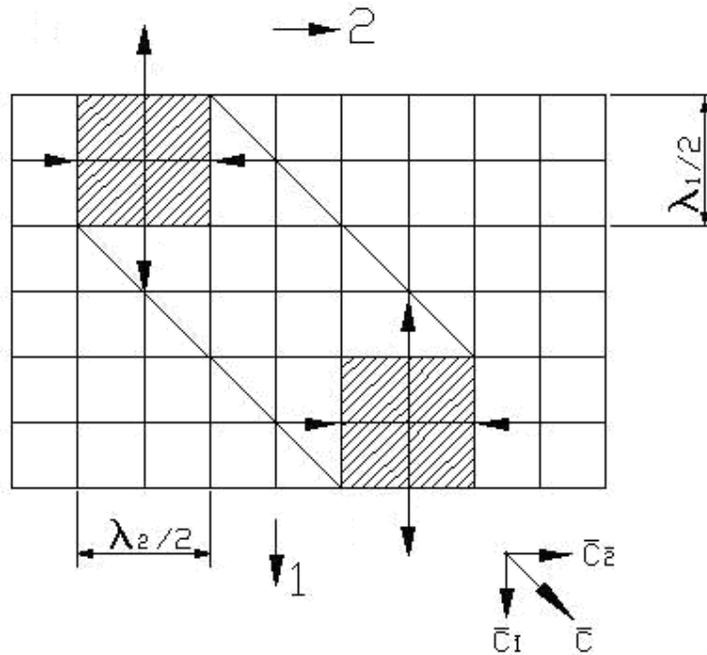


Рисунок 1.1 – Двухволновая схема формирования прообраза МК. C_1 и C_2 – скорости, а λ_1 и λ_2 – длины волн.

Нормаль \mathbf{N} к плоскости габитуса задается выражением:

$$\mathbf{N} \parallel [(\mathbf{C}_1 + \mathbf{C}_2) \times [\mathbf{C}_1 \times \mathbf{C}_2]] \quad (1.1)$$

На рисунке (Рисунок 1.1) заштрихованы участки поперечных сечений с инициирующими превращением напряжениями в начальный момент времени t_0 и некоторый последующий момент t . Жирные линии выделяют сечение пластинчатого прообраза МК. Легко преобразовать (1.1) к виду:

$$\mathbf{N} \parallel \left(\frac{\mathbf{n}_2}{C_2} - \frac{\mathbf{n}_1}{C_1} \right) \parallel (\mathbf{n}_2 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_1), \quad (1.2)$$

где $\mathbf{n}_1 = \frac{\mathbf{C}_1}{C_1}$, $\mathbf{n}_2 = \frac{\mathbf{C}_2}{C_2}$, $\mathbf{a} = \frac{\mathbf{C}_2}{C_1}$.

Разумеется, более реалистичной является схема с парой волновых пучков.

1.3 Модель гетерогенного зарождения мартенсита в упругих полях дислокаций, совместимая с волновой моделью роста

Приведенная на рисунке (Рисунок 1.1) схема управления ростом МК естественно приводит к выводу, что старт роста кристалла связан с возникновением начального возбужденного состояния (НВС) в виде колеблющегося вытянутого прямоугольного параллелепипеда, порождающего волновые пучки. Важно, что это представление конкретизирует начальную флуктуацию и позволяет перейти к отбору дефектов, выполняющих роль центра зарождения МК. По сути, требуется найти в упругом поле дефекта области решетки, которые характеризуются деформацией с главными значениями $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$ и $\varepsilon_3 \approx 0$. Затем естественно полагать, что ребра прямоугольного колеблющегося параллелепипеда возникающего НВС направлены вдоль трех собственных векторов ξ_i тензора деформации. Полезно также иметь в виду, что для деформации $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$, $\varepsilon_3 = 0$ имеются инвариантные плоскости с нормальными $\mathbf{N}_{\text{ИП}}$:

$$\mathbf{N} \parallel \xi_2 \pm k \xi_1, |\xi_{1,2}| = 1, \quad (1.3)$$

Где

$$k = \frac{1 - |\varepsilon_2|}{1 + \varepsilon_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 (2 + \varepsilon_1)}{|\varepsilon_2| (2 - |\varepsilon_2|)}}. \quad (1.4)$$

При деформации в области упругости $\varepsilon_1, |\varepsilon_2| \ll 1$, в (1.3), (1.4) $k \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}$. Если $\varepsilon_3 \neq 0$, но $|\varepsilon_3| \ll \varepsilon_1, |\varepsilon_2|$, то формула (1.3) определяет нормали $\mathbf{N}_{\text{СП}}$ слабоискаженных плоскостей.

Требование

$$\mathbf{N} = \mathbf{N}_{\text{СП}}. \quad (1.5)$$

отражает объединение представлений о гетерогенном зарождении и волновом росте МК в рамках новой парадигмы.

Подставляя (1.2) и (1.3) в (1.5) при условии $\mathbf{n}_1=\xi_1$, $\mathbf{n}_2=\xi_2$ находим:

$$\frac{C_2}{C_1} = \varkappa \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}, \quad (1.6)$$

что позволяет согласовать волновое и деформационное описания габитуса [12, 21].

Такой подход оказался конструктивным, позволив провести первичную идентификацию наиболее вероятных дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) не только для прямого γ - α МП в сплавах на основе железа [22-29], но и для обратного α - γ МП [30] (и близкого к нему перехода в сплавах Cu-Zn [31]), а также для В2-В19 превращения в системе Ti-Ni [32-36]. В свою очередь, идентификация ДЦЗ указывает пути интерпретации формирования наблюдаемых ансамблей МК [37-40].

Кроме того, удалось построить динамическую модель формирования регулярной структуры двойников превращения [41-49].

Важным достижением динамической теории явилось описание перехода от пороговых деформаций к финальным, превышающим пороговые на два-три порядка [50-58]. Этот вопрос был впервые решен для модели ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. Переход к финальным деформациям позволил проводить не только сравнение расчетных ориентировок габитусных плоскостей с наблюдаемыми, но и сравнение ориентационных соотношений и макросдвига.

После достигнутого в рамках динамического подхода объяснения влияния размера зерна на реализацию мартенситного превращения [59-64] имеются все основания утверждать [65, 66], что преодолен принципиальный этап построения динамической теории для мартенсита охлаждения. По степени полноты описания особенностей мартенситного

превращения динамический подход в настоящее время превосходит другие подходы, отраженные, например, в [67-92].

1.4 Крестонная модель образования полос сдвига в кристаллах с ГЦК-решеткой, включая формирование кристаллов мартенсита деформации

Эксперименты [93, 94] показывают, что формирование полос макросдвига идет при наличии двух систем октаэдрического скольжения с пересекающимися плоскостями. Это свидетельствует в пользу возникновения носителей сдвига супердислокационного типа (названных для краткости крестонами) из-за контактного взаимодействия дислокаций двух систем скольжения в условиях, когда их плотности возрастают.

Наиболее просто описываются ориентировки границ полос сдвига типа $(hh\ell)_\gamma$. В [95-97] предложена модель такой полосы, которая формируется крестоном с суммарным вектором Бюргерса \mathbf{b} , включающим n векторов \mathbf{b}_1 и m векторов \mathbf{b}_2 дислокаций с линиями $[1\bar{1}0]_\gamma$, принадлежащих основной (плоскость скольжения $(111)_\gamma$) и сопряженной (плоскость скольжения $(11\bar{1})_\gamma$) системам скольжения ($n \geq m$), соответственно.

Из требования принадлежности суммарного вектора Бюргерса

$$\mathbf{b} \parallel n \cdot \mathbf{b}_1 + m \cdot \mathbf{b}_2 \quad (1.7)$$

плоскости $(hh\ell)_\gamma$ следует

$$\frac{h}{l} = \frac{n - m}{n + m}. \quad (1.8)$$

Например, при $m = 0$, имеем $h/l=1$, то есть тривиальное скольжение по плоскости $(111)_\gamma$. При $n = m$ получаем $h/l=0$ и сдвиг по плоскости $(001)_\gamma$.

Соотношение (1.8) позволяет дать простую интерпретацию скачкообразной смене [93] ориентировок типа $(11\ 11\ 13)_\gamma \rightarrow (557)_\gamma$ и более длинной последовательности [94]:

$$(23\ 23\ 25)_\gamma \rightarrow (11\ 11\ 13)_\gamma \rightarrow (5\ 5\ 7)_\gamma \rightarrow (1\ 1\ 2)_\gamma. \quad (1.9)$$

В таблице (Таблица 1.2). приведены ориентировки $(hh\ell)_\gamma$ и значения n/m , однозначно им соответствующие.

Таблица 1.2 – Ориентировки границ полос $(hh\ell)_\gamma$ и вклады взаимодействующих дислокаций

(hhℓ)	(23 23 25)	(11 11 13)	(5 5 7)	(1 1 2)
n/m	24/1	12/1	6/1	3/1

Ясно, что смена ориентировок обусловлена последовательным ростом доли дислокаций из сопряженной системы.

Согласно [94], переход к полосам сдвига с границами $(113)_\gamma$ имеет место при уровне деформации $\varepsilon=0.47$. Поэтому можно ожидать, что фактически во всем объеме образца реализуется соотношение $n/m=2$. Наблюдаемая трехэтапная смена ориентировок $(hh\ell)_\gamma$ отражает, на наш взгляд, изменение состава кристонов, возникающих в неоднородной дислокационной субструктуре сетчатого типа. Как установлено в [98], достижение степени деформации 0.47 приводит к разрушению такой субструктуры. Поэтому при среднем значении $n/m=2/1$ в составе кристонов (как и дисклинаций [99]) может содержаться большое число дислокаций.

1.5 Основные направления исследования данной работы

В рамках изложенной выше идеологии управления формированием мартенситных кристаллов охлаждения, напряжения и деформации, а также формирования полос сдвига на стадии развитой пластической деформации, имеется достаточно много задач.

Перечислим вкратце лишь те, которые имеют отношение к данной работе. Одно направление связано с уточнением и развитием исследований классических объектов типа систем Fe-Ni и Fe-C. Другое направление связано с распространением предложенных подходов на иные системы, которые могут обладать и другим вариантом превращения. Примером может служить превращение ОЦК-ГПУ в титане.

Наконец, принципиальный интерес представляет учет модификации упругих суперпозиционных полей дефектов, включающих как чисто дислокационные конфигурации, так и некоторые варианты их комбинирования с точечными дефектами, что может оказаться актуальным для сплавов внедрения. Целесообразно осветить эту проблему несколько подробнее.

1.5.1. Необходимость учета влияния точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) для детализации картины зарождения в сплавах внедрения

Одной из наблюдаемых морфологических особенностей реализации мартенситных превращений в сплавах железа типа замещения, например, систем Fe-Ni при концентрациях Ni (30-34)%, и внедрения, например, систем Fe-C при концентрациях углерода 1.4-1.8 массового %, является фиксируемое различие центров распределения габитусных плоскостей, близких, соответственно, к $\{3\ 10\ 15\}$ для систем Fe-Ni и к $\{2\ 5\ 9\}$ для систем Fe-C. Поскольку в сплавах внедрения углерод может заполнять вакансионные дислокационные петли, которые могут возникать в процессе охлаждения (предварительной закалки), влияние подобного заполнения должно модифицировать упругое поле петли. Действительно, поле отдельного точечного дефекта убывает по закону r^{-3} , поэтому следует ожидать, что плоское распределение внедренных дефектов должно приводить к убыванию суперпозиционного упругого поля по

закону r^{-1} , типичному для прямолинейных дислокаций. Следовательно, на пространственных масштабах, когда доминирует вклад одного из сегментов дислокационной петли, должно наблюдаться отличие упругого поля петли с внедренными атомами от случая поля петли без подобного заполнения.

Разумеется, аналогичный вывод можно рассчитывать получить и для суперпозиций петель, моделирующих кристонные носители сдвига.

1.5.2. Необходимость расчета упругого поля кристонных конфигураций дефектов

Следует подчеркнуть, что для расчета упругих полей дефектов, моделирующих носители сдвига кристонного типа, необходимо разработать программный комплекс, позволяющий выполнить расчет при наличии данных об упругих модулях системы и конфигурациях дефектов. Особенно актуален этот вопрос при идентификации ДЦЗ для кристаллов мартенсита охлаждения и напряжения в случае значительной пластической деформации, изменяющей ансамбли дефектов. Кроме того, поскольку возникновение мартенситного кристалла, сопровождается макросдвигом, помимо рождения отдельных дислокаций (в ходе релаксации напряжений), торцы возникшего кристалла могут создавать более мощные упругие поля, для анализа которых вновь можно использовать суперпозиционные дислокационные модели.

Наконец, знание упругих полей носителей сдвига кристонного типа полезно, как при описании формирования кристаллов мартенсита деформации, так и при описании формирования полос сдвига на стадии развитой пластической деформации без изменения фазового состава. При этом распространяющийся носитель сдвига может инициировать своим упругим полем формирование сопутствующего ансамбля кристаллов.

После сделанных пояснений приведем перечень решаемых задач с указанием их распределения в тексте диссертации.

1.5.3. Задачи, решаемые в работе

Для удобства ознакомления с работой стандартная (не являющаяся оригинальной) аналитическая часть методики выполнения расчетов упругих полей, излагается в главе 2.

Программная реализация (являющаяся оригинальной) расчетной методики, распространяющая стандартный подход для отдельных дефектов на их суперпозиции, приведена в главе 3.

Две задачи, связанные с ролью кристонов в пластической деформации, излагаются в главе 4.

Вопросы, относящиеся к дислокационным центрам зарождения мартенсита охлаждения и нижнего бейнита систем Fe-Ni и Fe-C, связанные как с влиянием углерода, так и предварительной пластической деформации, освещаются в главе 5.

Расчеты упругих полей и обсуждение особенностей морфологических признаков, наблюдаемых при ОЦК-ГПУ превращении в титане приводятся в заключительной главе 6.

В главах, как правило, вначале даются дополнительные сведения и уточнения решаемой задачи, а завершаются главы выводами и краткими указаниями направлений дальнейших исследований.

Глава 2. Методика расчетов.

2.1 Выбор методики

Как известно, одним из критериев достоверности результатов является использование хорошо апробированных методик, как экспериментальных, так и теоретических (включая численный анализ). К последним методикам, безусловно, относится аппарат функций Грина. Несмотря на то, что имеются достаточно подробные руководства по его применению, включая и расчеты упругих полей (например, [100]), для удобства чтения диссертации, целесообразно кратко остановиться на его использовании для решения поставленных в работе задач. Тем более, что многие важные детали подобной методики вычислений, как правило, остаются «за кадром».

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 [101] и основывается на введении тензорной функции $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ – функции Грина. Как будет показано в дальнейшем, расчет упругого поля точечных дефектов также может быть проведен с использованием этой функции.

Для нахождения собственно тензоров дисторсии интересна не сама функция Грина, а ее 1-я и 2-я производные. Кроме того, учитывая применение в дальнейшем численных методов при расчете тензора дисторсии и других параметров, характеризующих потенциальные центры зарождения мартенсита, для нахождения производных функции Грина необходимо подготовить соответствующий математический аппарат.

2.2 Нахождение оптимального выражения функции Грина для численных методов вычислений

Как было сказано выше, расчет упругого поля дислокационной петли и точечных дефектов основывается на введении тензорной функции Грина $G(\mathbf{x})$ [100], определяемой уравнением:

$$C_{ijkl}G_{kp,lj}(\mathbf{x}) + \delta_{ip}\delta(\mathbf{x}) = 0, \quad i, p = 1, 2, 3, \quad (2.1)$$

где C_{ijkl} – тензор упругих постоянных 2-го порядка;

$G_{kp,\ell j}$ – производная по ℓ и j компонентам аргумента тензорного элемента G_{kp} ;

δ_{ip} – символ Кронекера;

$\delta(\mathbf{x})$ – распределение Дирака.

Применив преобразования Фурье функции Грина, выражение (2.1) можно представить как:

$$C_{ijkl}k_l k_j \tilde{G}_{kp}(\mathbf{k}) = \delta_{ip}, \quad (2.2)$$

где \mathbf{k} – волновой вектор;

$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \int_{\varepsilon} G(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} dV$ – фурье-образ функции $G(\mathbf{x})$.

Используя тензор Кристоффеля ($\Gamma_{ik} = C_{ijkl}k_l k_j$), можно переписать (2.2) в тензорном виде: $\Gamma(\mathbf{k})\tilde{G}(\mathbf{k}) = 1$, а затем, с помощью обратного преобразования Фурье, явно выразить функцию Грина:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^3} \operatorname{Re} \int_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\tilde{\mathbf{v}} = \frac{1}{8\pi^3} \operatorname{Re} \int_{\tilde{\varepsilon}} \Gamma^{-1}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\tilde{\mathbf{v}}, \quad (2.3)$$

где $\tilde{\varepsilon}$ – фазовое пространство;

$d\tilde{\mathbf{v}}$ – элемент объема $\tilde{\varepsilon}$.

Для численных методов расчета эффективнее преобразовать тройные несобственные интегралы (2.3) в однократные интегралы по единичному кругу в плоскости, перпендикулярной вектору \mathbf{x} .

Перепишем формулу (2.3) в виде:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^2} \int_{\varepsilon} \frac{1}{k^2} \Gamma^{-1}[\xi] \cos(kr\xi \cdot \rho) d\tilde{\mathbf{v}}, \quad (2.4)$$

где ξ и ρ – единичные векторы в направлениях \mathbf{k} и \mathbf{x} соответственно.

Для произвольного фиксированного \mathbf{x} выбирается ортогональная система координат $\{\alpha, \beta, \rho\}$ таким образом, чтобы вектор α лежал в плоскости $\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2$ (Рисунок 2.1).

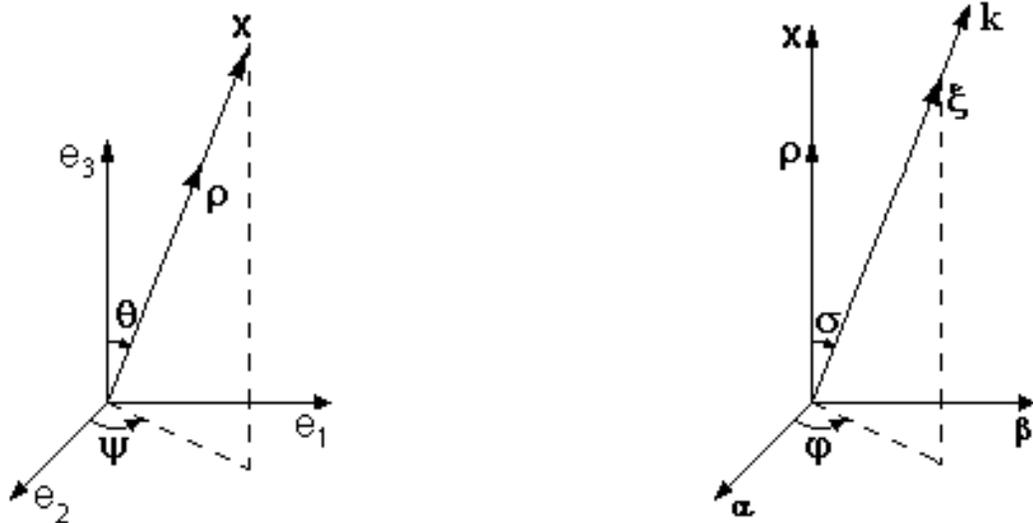


Рисунок 2.1 – Ортогональные системы координат, используемые при вычислении тензорной функции Грина

При этом компоненты единичных векторов α, β, ρ в базисе $\{e_1, e_2, e_3\}$, относительно которого задан тензор C_{ijkl} , имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \sin \psi, & \alpha_2 &= -\cos \psi, & \alpha_3 &= 0 \\ \beta_1 &= \cos \theta \cos \psi, & \beta_2 &= \cos \theta \sin \psi, & \beta_3 &= -\sin \theta \\ \rho_1 &= \sin \theta \cos \psi, & \rho_2 &= \sin \theta \sin \psi, & \rho_3 &= \cos \theta, \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

где ψ и θ – углы в связанной с $\{e_k\}$ сферической системой координат. Далее необходимо вычислить интеграл (2.4) в сферических координатах k, σ, φ , связанных с новым базисом $\{\alpha, \beta, \rho\}$. Исходя из того, что $d\tilde{v} = k^2 \sin \sigma dk d\sigma d\varphi$, а $\xi \cdot \rho = \cos \sigma$, получаем из (2.4):

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \Gamma^{-1}(\xi) \sin \sigma d\sigma \int_0^\infty \cos(kr \cos \sigma) dk. \quad (2.6)$$

Кроме того, имеем:

$$\int_0^\infty \cos(k \cos \sigma) dk = \pi \delta(\cos \sigma) = \frac{\pi}{\sin \sigma} \delta(\sigma - \pi/2). \quad (2.7)$$

Интеграл (2.6) вычисляется в плоскости, задаваемой единичными векторами α и β , т.е. $\sigma = \pi/2$. С учетом этого, а также (2.7), интеграл (2.6) сводится к:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^2 |\mathbf{x}|} \int_0^{2\pi} \Gamma^{-1}[\xi(\varphi)] d\varphi. \quad (2.8)$$

Из рисунка (Рисунок 2.1) очевидно, что:

$$\xi(\varphi) = \alpha \cos \varphi + \beta \sin \varphi. \quad (2.9)$$

И поскольку Γ^{-1} является четной функцией ξ , можно завершить цепочку преобразований следующим интегралом:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi^2 |\mathbf{x}|} \int_0^\pi \Gamma^{-1}[\xi(\varphi)] d\varphi. \quad (2.10)$$

2.3 Методика расчета упругого поля дислокационной петли

Решение уравнений равновесия упругой среды через тензорную функцию Грина $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ описывается выражением [100]:

$$\chi_{pr}(\mathbf{x}) = \oint_L \epsilon_{njr} b_i C_{ijkl} G_{kp,l}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dx'_n, \quad (2.11)$$

где ϵ_{njr} – символ Леви-Чивита;

\mathbf{b} – вектор Бюргерса;

\mathbf{C} – тензор упругих постоянных 2-го порядка;

$G_{kp,\ell}$ – производная по ℓ -компонентам аргумента тензорного элемента G_{kp} ; интегрирование проводится по контуру L с суммированием по повторяющимся индексам.

Дифференцируя (2.10), получаем:

$$G_{ik,s}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi^2 r^2} \int_0^\pi [\xi_s F_{ik} - \rho_s \Gamma_{ik}^{-1}] d\varphi, \quad (2.12)$$

где

$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}, \quad (2.13)$$

$$F_{ik} = \sum_{lmnq} C_{lmnq} \Gamma_{il}^{-1} \Gamma_{nk}^{-1} (\xi_m \rho_q + \xi_q \rho_m). \quad (2.14)$$

Такое представление позволяет провести численный анализ упругих полей. Их расчет для прямолинейных дислокаций и дислокационных петель подробно описан в [101] и в данной работе реализован на уровне программного обеспечения.

2.4 Методика расчета упругого поля точечного дефекта

В качестве точечных дефектов могут выступать как примеси внедрения, так и вакансии («дырки»). Проведем расчет упругого поля примеси внедрения, которая может быть рассмотрена в линейном упругом теле как центр сжатия. Компоненты тензора дисторсии такого дефекта определяются уравнением:

$$\chi_{ij} = u_{i,j}(\mathbf{x}), \quad (2.15)$$

где \mathbf{x} – радиус-вектор от центра сжатия до точки наблюдения;
 $u_{i,j}$ – производная i -го элемента поля смещений \mathbf{u} по j -компоненте аргумента.

Для вакансии формула (2.15) будет отличаться только знаком в правой части.

В свою очередь, поле смещений $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, согласно [100], выражается через первую производную тензорной функции Грина для бесконечной упругой среды:

$$u_i(\mathbf{x}) = \sum_k G_{ik,k}(\mathbf{x}), \quad (2.16)$$

т.е. можно переписать (2.15) в виде:

$$\chi_{ij} = \sum_k G_{ik,kj}(\mathbf{x}). \quad (2.17)$$

После взятия второй производной от (2.10) матричные элементы тензора $\hat{\chi}$ в базисе $\{\mathbf{e}_i\}$, образованном правой тройкой ортов, направленных вдоль осей четвертого порядка, выражаются формулами:

$$\chi_{ij} = \sum_k G_{ik,kj} = \frac{1}{4\pi^2 r^3} \int_0^\pi [2\rho_k \rho_j \Gamma_{ik}^{-1} - 2(\xi_k \rho_j + \xi_j \rho_k) F_{ik} + \xi_k \xi_j A_{ik}] d\varphi, \quad (2.18)$$

где r и F_{ik} представлены в (2.13) и (2.14) соответственно;

$$A_{ik} = \sum_{lmnq} C_{lmnq} [(\xi_m \rho_q + \xi_q \rho_m)(F_{il} \Gamma_{nk}^{-1} + F_{nk} \Gamma_{il}^{-1}) - 2\Gamma_{il}^{-1} \Gamma_{nk}^{-1} \rho_q \rho_m].$$

Формула (2.18) применялась для численного расчета тензора дисторсии примеси внедрения (и вакансий, но с другим знаком) при написании пакета программ.

2.5 Расчетные параметры, система отсчета и упрощения модели

Для расчетов применялся набор упругих модулей $C_L=0,2508$; $C_{44}=0,1034$; $C'=0,0271$ для монокристаллов Fe-31,5%Ni при температуре $T=673\text{K}$, когда аномалия упругих свойств, связанных с магнитным упорядочением, еще не проявляется. По отношению к системе Fe-C, строго говоря, этот набор является модельным.

Для определения влияния точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения расчеты производились для призматических петель типа «дырка» с основной линией $[11\bar{2}]$ и дополнительной $[111]$ и размерами сторон $L_1=7000$ и $L_2=1000$, что примерно отвечает наблюдаемым параметрам и дает возможность сравнивать результаты с более ранними [101]. Здесь и далее в качестве единицы длины принят параметр решетки (a) исходной фазы.

Векторы α и β , используемые в качестве базисных для ξ в (2.9), определялись как: $\alpha = \rho \times \tau_1$, $\beta = \rho \times \alpha$, где τ_1 и τ_2 – единичные векторы в направлениях основной и дополнительной линий.

Для определения точек наблюдения была выбрана цилиндрическая система наблюдения (ЦСН) с осью Z , совпадающей с τ_1 и началом координат на середине стороны L_1 петли. Отсчет полярного угла θ осуществлялся от плоскости петли (нулевому значению соответствует направление «от» контура петли).

Выбрано равномерное однослойное распределение примеси внутри контура петли.

Следует заметить, что для сокращения времени расчета при большом ($>10^4$) количестве примесей внутри петли группа примесей заменялась одной эффективной примесью, но с введением в формулу (2.18) множителя, численно равного количеству примесей в группе. Это

допущение справедливо в силу использования принципа суперпозиции при вычислении суммарного тензора дисторсии. Если рассматривать группу, например, из 10 примесей, расположенных в квадрате 10×10 , то на расстояниях порядка 100 и более параметров решетки от любой примеси группы векторы \mathbf{x} от каждой из этих примесей совпадают с достаточной точностью.

Глава 3. Программная реализация методики расчетов

3.1 Актуальность использования методов объектно-ориентированного программирования (ООП) для моделирования системы дефектов

Более ранние результаты [101] получены при исследовании упругих полей отдельных дислокационных петель. В данной работе возникла необходимость моделирования различных структурных нарушений – и одиночных петель, и точечных дефектов, и кристонов, которые могут рассматриваться в виде набора петель, причем как с физической точки зрения, так и с позиций программной реализации системы. Все расчеты, как и в работе [101], проводились в одной системе наблюдения. Разумно предположить, что в дальнейшем может возникнуть необходимость более глубокого моделирования системы, а также возможно расширение спектра рассматриваемых объектов (под объектами в данном случае подразумеваются и различные дефекты, и сам включающий их монокристалл, и системы наблюдения). Поэтому с самого начала автором была поставлена задача создания адекватной модели сложной системы, с одной стороны, допускающей ряд упрощений (например, в рамках данной работы не рассматривается взаимодействие отдельных дефектов внутри монокристалла), а с другой стороны имеющей возможность дальнейшего развития без повторного проектирования всего комплекса программного обеспечения. Причем во главу угла было поставлено именно моделирование системы объектов, а не расчет каких-то отдельных параметров на основе конкретной конфигурации дефектов (дислокационной петли с точечными дефектами, либо набора петель – кристона).

Цель данной главы – продемонстрировать широкие возможности дальнейших исследований, обусловленные применением объектно-

ориентированного стиля программирования и проектированием архитектуры системы.

Поскольку в работе [101] рассматривалась одиночная дислокационная петля, для решения поставленных задач было достаточно методов процедурного и, отчасти, модульного программирования, так как не было необходимости выделять отдельные объекты (упругие модули монокристалла использовались непосредственно при расчете упругого поля дислокационной петли). Увеличение числа объектов системы, которые можно выделить естественным образом, а также необходимость дальнейшего развития системы обуславливают выбор в пользу ООП. Использование этого стиля позволяет, кроме того, отделить моделируемую физическую систему от интерфейса программы (редактирования входных параметров, визуализации и обработки результатов), который тоже проектируется в рамках данной идеологии.

Для дальнейшего изложения целесообразно кратко остановиться на основных положениях ООП.

3.2 Основные положения ООП в контексте моделируемой системы

Основным понятием ООП является *объект*. Его можно определить как совокупность *свойств* и *методов*, а также *событий*, на которые он может реагировать [102]. С этой точки зрения объектами являются и монокристалл, и входящие в его состав дефекты, и системы наблюдения, в которых ведутся расчеты, а также отдельные элементы интерфейса с пользователем самой расчетной программы (например, меню, кнопки или окна вывода различной графической информации).

При проектировании сложной системы и выделении различных объектов важно определить, какие свойства и методы могут быть доступны другим объектам или пользователю. Они будут определять

интерфейс объекта. Внутренняя же реализация может быть различной и должна быть скрытой, что, с одной стороны, защищает внутренние данные объекта от случайного изменения, а с другой стороны, позволяет менять реализацию одного объекта, не изменяя всей системы. Это принцип *инкапсуляции* – сокрытие данных и методов, влияющих на работу самого объекта, но недоступных другим объектам. Например, объекту *Монокристалл* известны размеры объекта *Дислокационная_петля*, которой он владеет (ее координаты, ориентировка и вектор *Бюргерса*)¹.

Кроме того, объект *Монокристалл* может получить данные об упругом поле петли в требуемой точке, путем вызова соответствующего метода *Тензор_дисторсии* объекта *Дислокационная_петля*. Но закрытые данные, используемые объектом *Дислокационная_петля* для расчета создаваемого им упругого поля, равно как и методы расчета тех или иных интегралов, недоступны. Аналогично, для самой программы расчета известны упругие модули объекта *Монокристалл* (и эти модули могут быть изменены), а также количество дефектов, которыми он владеет. Тогда, например, при расчете тензора дисторсии в нужной точке *Монокристалл* «опрашивает» все входящие в него дефекты и суммирует результат, но «внутренняя жизнь» *Монокристалла* остается закрытой.

Описание и реализация совокупности свойств, методов и событий, на которые может реагировать объект, называется *классом*. А отдельные объекты класса – его *экземпляры* (в примерах предыдущего абзаца *Монокристалл* и *Дислокационная_петля* представляли собой именно экземпляры класса). Важным свойством классов является возможность *наследования* – создания одних классов на основе других. Классы-наследники сохраняют свойства и возможности классов-предков и

¹ Для упрощения понимания здесь и далее приводятся не названия объектов, присутствующие в исходном коде программ, а привычные для физики твердого тела понятия.

приобретают какие-то новые свойства. Таким образом, необязательно близкие по ряду свойств объекты проектировать и создавать с нуля – они могут быть созданы или на основе друг друга, или одного класса-предка, обладающего общими для них характеристиками². Например, в основе расчета упругих полей всех дефектов, рассматриваемых в данной работе, лежит тензорная функция Грина и ее производные. Кроме того, все дефекты требуют параметризации, включающей в любом случае выбор «точки привязки» внутри объекта *Монокристалл*. Этот параметр и общие для всех дефектов методы реализованы в *абстрактном* классе *Дефект*. В свою очередь, от класса *Дефект* наследуются все остальные классы реальных дефектов. Абстрактным класс *Дефект* является потому, что на его уровне невозможно реализовать метод *Тензор_дисторсии*. Его реализации отличаются для разных дефектов, поэтому в классе *Дефект* данный метод описан как *виртуальный*. Дело в том, что описание этого метода в базовом абстрактном классе позволяет использовать еще один важный атрибут ООП – *полиморфизм*. Различают [103] *полиморфизм времени выполнения* и *полиморфизм времени компиляции* (или *параметрический полиморфизм*). В нашем случае использование полиморфизма времени выполнения позволяет объекту *Монокристалл* рассматривать все дефекты, которыми он владеет, как экземпляры базового класса *Дефект*. При этом объекту *Монокристалл* не обязательно «знать», к какому классу дефекты реально относятся, и он может вызывать те методы, которые описаны в классе *Дефект* и являются общими для всех наследников. Это позволяет в дальнейшем создавать новых наследников класса *Дефект* (или его потомков), моделируя новые реальные дефекты, с которыми объект *Монокристалл* «сможет» работать, ничего «не зная» об особенностях их реализации (дефекты могут быть различными, но иметь общий интерфейс).

² В общем случае, ООП допускает множественное наследование, т.е. класс может быть создан на основе нескольких классов. В данной работе такой необходимости не возникает.

3.3 Иерархия объектов, и их параметризация

Иерархия классов, относящихся непосредственно к моделируемой системе, приведена на рисунке (Рисунок 3.1). Абстрактные классы выделены курсивом. Широкими стрелками показана иерархия наследования, а простыми - взаимосвязи между объектами. В скобках приведены имена классов в исходном коде программ.

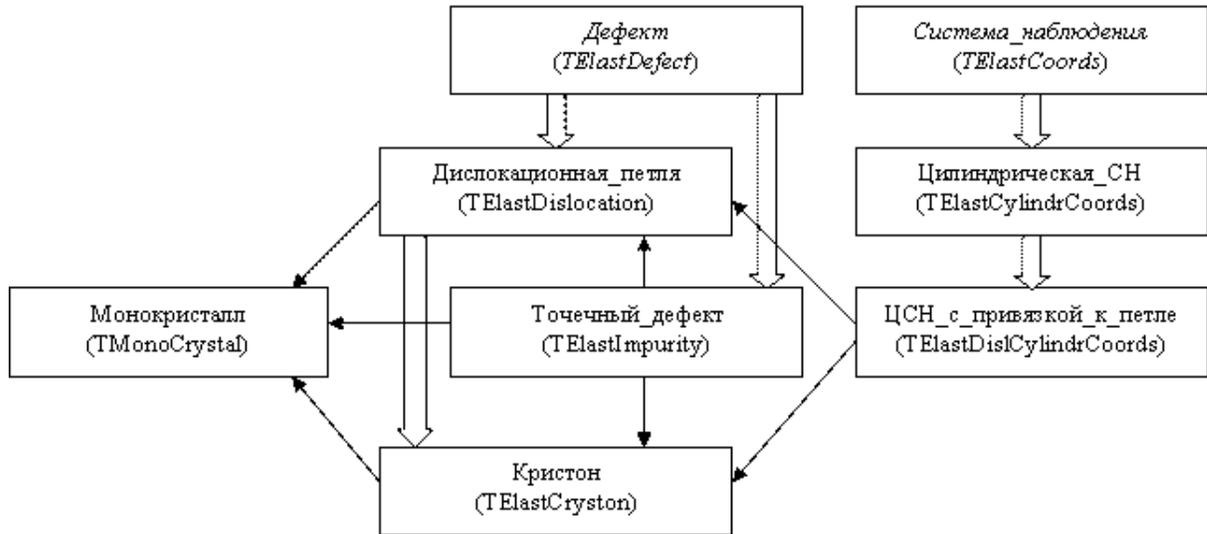


Рисунок 3.1 – Иерархия классов и связи между объектами

Ниже приведены основные параметры объектов (жирным шрифтом выделены векторные параметры), относящиеся к их физической сути, и графические пояснения:

- ◆ Монокристалл:
 - C_L, C_{44}, C' – упругие модули;
 - **Material** – материал – позволяет выбрать один из predetermined наборов упругих модулей для ряда сплавов.
- ◆ Дислокационная петля (Рисунок 3.2):
 - **Origin** – координаты точки привязки (в декартовой системе координат кристалла);

- L_1, L_2 – длина основной и дополнительной линий петли (в параметрах решетки);
- τ_1, τ_2 – направление основной и дополнительной линий петли;
- \mathbf{b} – вектор Бюргерса.

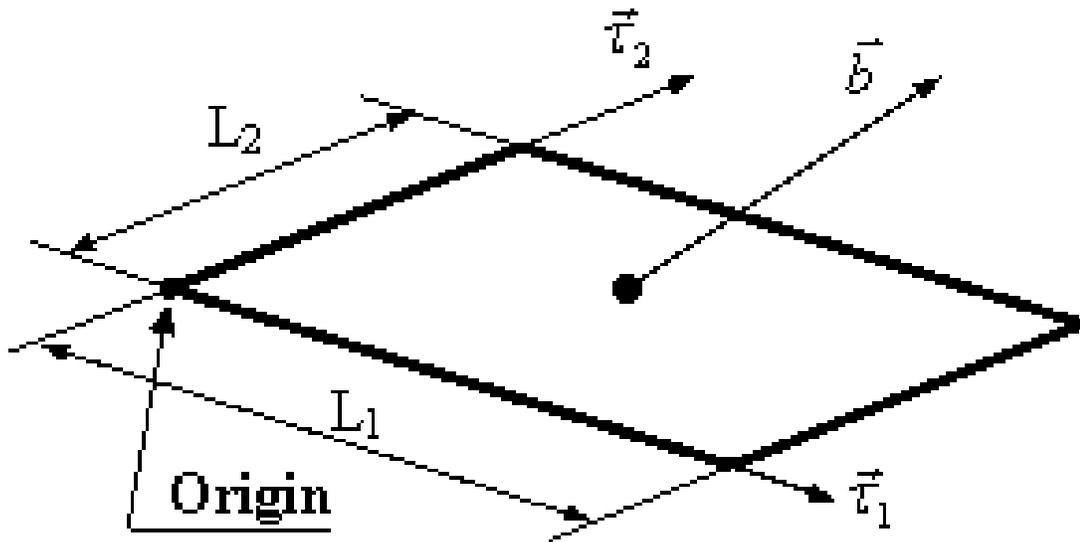


Рисунок 3.2 – Параметры дислокационной петли

◆ Кристон (Рисунок 3.3):

- **Origin** – координаты точки привязки;
- L_1, L_2 – длина основной и дополнительной линий 1-й петли;
- τ_1, τ_2 – направление основной и дополнительной линий петель кристона;
- L_1', L_2' – длина основной и дополнительной линий последней петли;
- \mathbf{b} – вектор Бюргерса;
- **Layers** – количество дислокационных петель в кристоне (слоев);
- **Step** – расстояние между петлями (в параметрах решетки);
- **VertexFoot₁**, **VertexFoot₂** – определяют проекцию «вершины» кристона на «основание» (1-ю петлю). $\text{VertexFoot}_1 = l_1/L_1$; $\text{VertexFoot}_2 = l_2/L_2$ (см. Рисунок 3.3 и Рисунок 3.4);

- CrystonType – позволяет выбрать одну из predeterminedных геометрических конфигураций кристона (Рисунок 3.4). Параметры VertexFoot₁ и VertexFoot₂ для этих конфигураций указаны на рисунке.

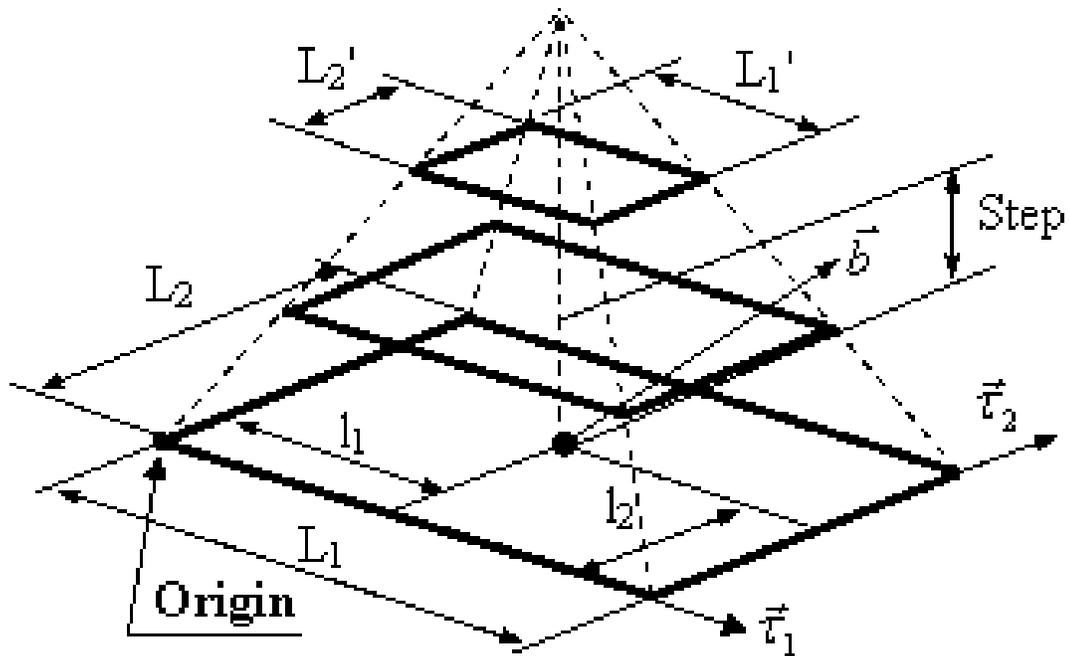


Рисунок 3.3 – Параметры кристона

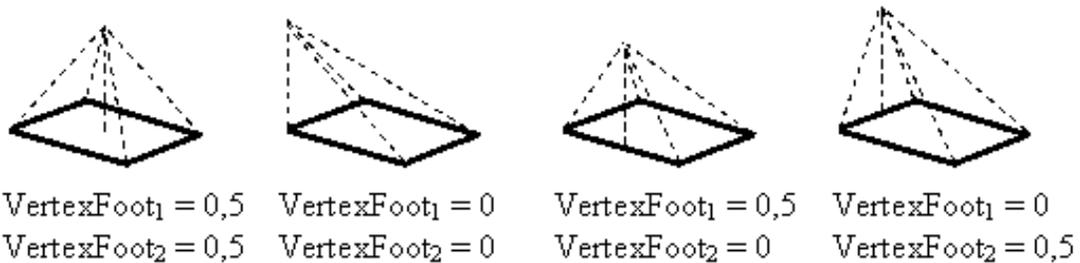


Рисунок 3.4 – Предопределенные геометрические конфигурации кристонов

◆ Точечный дефект (Рисунок 3.5):

- **Origin** – координаты точки привязки³;

³ Точка привязки, ориентировка и размеры области, в которой распределены точечные дефекты, определяются автоматически при задании параметра Dislocation; в случае привязки к кристону точечные дефекты заполняют все петли, образующие кристон.

- Dislocation – дислокационная петля или кристон, внутри которых распределены точечные дефекты;
- DimTau₁, DimTau₂ – количество точечных дефектов вдоль основной и дополнительной линий петли⁴;
- Multiplier – множитель «замещения» точечных дефектов (см. п.2.4 и Рисунок 3.5 (б));
- ImpType – тип точечного дефекта (примесь внедрения или вакансия).

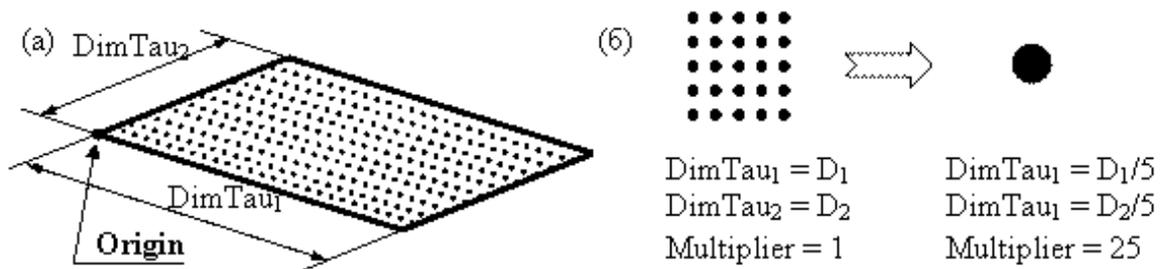


Рисунок 3.5 – Параметры точечного дефекта. (а) Распределение дефектов внутри дислокационной петли. (б) Замещение группы дефектов одним эффективным дефектом с эквивалентным увеличением параметра Multiplier

- ◆ Цилиндрическая система наблюдения с привязкой к дислокационной петле (Рисунок 3.6):
 - **Origin** – координаты точки привязки;
 - OriginPointType – тип точки привязки: к середине стороны L_1 или к пересечению диагоналей (Рисунок 3.6);
 - Dislocation – дислокационная петля или кристон, к которым привязывается система наблюдения;
 - **AxisX** – ось X (после привязки к петле или кристону автоматически выставляется в направлении τ_1);

⁴ В случае привязки точечных дефектов к кристону параметры DimTau₁ и DimTau₂ определяют их количество вдоль основной и дополнительной линии 1-й петли; для остальных петель кристона эти параметры пересчитываются для сохранения плотности распределения дефектов по площади.

- **AxisZ** – ось Z (после привязки к петле или кристону автоматически выставляется в направлении, противоположном τ_2);
- Z – координата по оси Z ;
- R – радиус «обхода» точек наблюдения;
- **StartTeta** – начальный угол «обхода» точек наблюдения;
- **StopTeta** – конечный угол «обхода» точек наблюдения;
- **Points** – количество точек наблюдения.

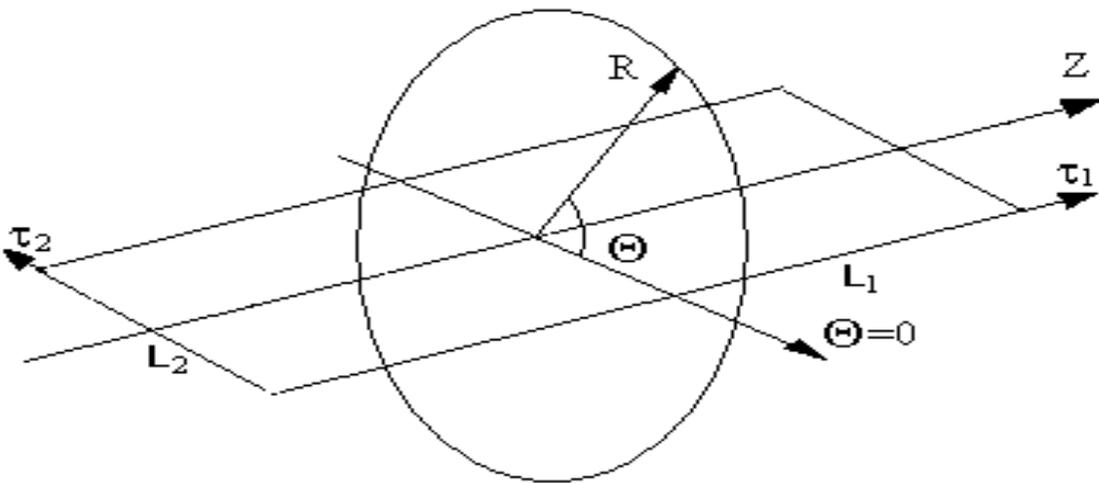


Рисунок 3.6 – Параметры цилиндрической системы наблюдения с привязкой к дислокационной петле

3.4 Состав программного обеспечения и средства разработки

В процессе данной работы был написан ряд программ для моделирования упругих дефектов и обработки результатов расчетов. Все они были реализованы в среде разработки Borland C++ Builder версии 5.

Основой последней на данный момент версии пакета является программа ElasticPro, включающая в себя конструктор системы дефектов и расчетную часть.

3.5 Краткое описание программы расчета упругих полей

Внешний вид главной формы программы ElasticPro приведен на рисунке (Рисунок 3.7).

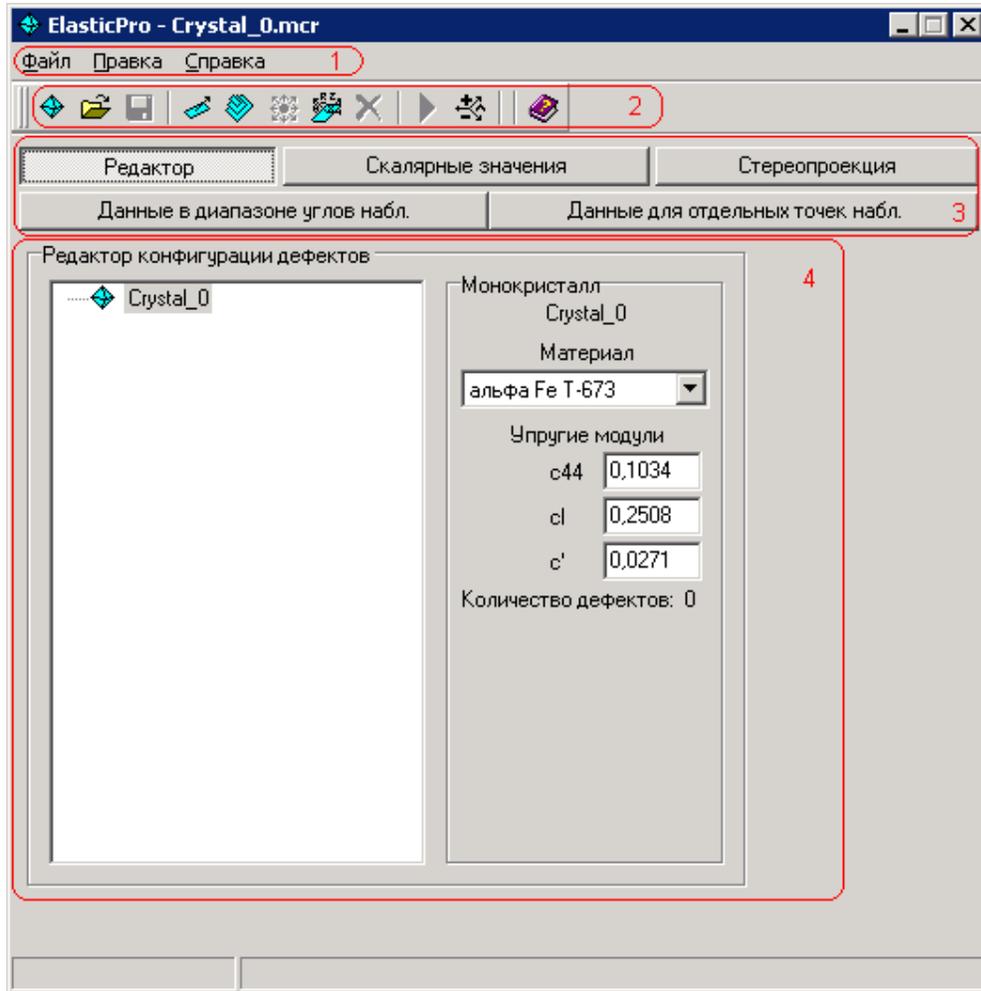


Рисунок 3.7 – Главная форма программы ElasticPro

На главной форме можно выделить четыре области:

- 1) главное меню;
- 2) инструментальная панель с функциональными кнопками;
- 3) панель с кнопками выбора режима рабочей области;
- 4) рабочая область главной формы.

Доступ к большинству функций программы дублирован – они могут быть вызваны из меню, с помощью кнопок на инструментальной панели, либо посредством контекстного меню, вызываемого нажатием правой кнопки мыши на том или ином элементе интерфейса программы.

Меню содержит следующие пункты (также приведены соответствующие пиктограммы кнопок инструментальной панели):

◆ Файл:

-  Создать – создание новой конфигурации дефектов (с запросом на сохранение существующей и ее очисткой);
-  Открыть... – открытие сохраненной ранее конфигурации;
-  Сохранить – сохранение конфигурации;
- Сохранить как... – сохранение конфигурации под другим именем;
- Сохранить результаты... – сохранение результатов вычисления в специальном формате для обработки другими программами пакета;
- Сохранить результаты как текст... – сохранение результатов вычисления в текстовом формате;
- Сохранить скалярные результаты как рисунок... – сохранение графических результатов вычисления скалярных величин в цветном формате;
- Сохранить скалярные результаты как ч/б рисунок... – сохранение графических результатов вычисления скалярных величин в ч/б формате;
- Сохранить векторные результаты как рисунок... – сохранение графических результатов вычисления векторных величин в цветном формате;
- Сохранить векторные результаты как ч/б рисунок... – сохранение графических результатов вычисления векторных величин в ч/б формате;

◆ Правка:

-  Добавить петлю – добавление дислокационной петли к монокристаллу;
-  Добавить кристон – добавление кристона к монокристаллу;
-  Добавить примесь – добавление примеси к выделенному дефекту;

-  Удалить объект – удаление выделенного объекта.

Кнопки, не имеющие аналогичных пунктов меню:

- ◆  – выполнить расчет;
- ◆  – изменить тип курсора – кнопка доступна только в режиме просмотра скалярных результатов в графическом виде; переключает курсор с вертикальной линии на окружность, позволяющую осуществлять автоматизированный поиск экстремумов на выбранном участке графика;
- ◆  – открыть векторный калькулятор;
- ◆  – выбор шрифта для надписей – вызов диалога настройки параметров шрифта для оформления графических и текстовых результатов.

Единственный пункт контекстных меню, недоступный другим способом – это назначение выбранной системы наблюдения активной («Сделать активной»).

В зависимости от выбранного режима и состояния программы те или иные пункты меню и кнопки на инструментальной панели могут быть не доступны.

Сразу после запуска активным является режим редактора конфигулятора дефектов. В левой части рабочей области расположено «дерево» конфигурации дефектов с объектом «монокристалл» в качестве корневого узла. В правой части – редактор параметров выбранного в данный момент объекта в дереве.

Рассмотрим создание конфигурации с одной дислокационной петлей с помощью контекстных меню.

Для этого нужно:

- 5) в «дереве» конфигурации дефектов выбрать монокристалл левой кнопкой мыши;

- б) правой кнопкой мыши вызвать контекстное меню и выбрать пункт «Добавить петлю» – при этом будет выделена добавленная петля;
- 7) вызвать контекстное меню петли и выбрать пункт «Добавить цил.с.н.» (цилиндрическую систему наблюдения);
- 8) в контекстном меню системы наблюдения выбрать пункт «Сделать активной».

Далее можно отредактировать параметры каждого из объектов и выполнить расчет, нажав кнопку  на инструментальной панели.

По окончании расчета можно посмотреть результаты:

◆ Скалярные значения:

- ε_1 – 1-е собственное число тензора деформации;
- ε_2 – 2-е собственное число тензора деформации;
- ε_3 – 3-е собственное число тензора деформации;
- η – параметр степени близости к инвариантной плоскости;
- δ – объемный эффект;
- S_1 – модуль 1-го вектора сдвига;
- S_2 – модуль 2-го вектора сдвига;
- S_3 – модуль 3-го вектора сдвига;
- $||\varepsilon_1/\varepsilon_2| - \kappa^2|$ – где κ – отношение модулей скоростей;

◆ Стереопроекции (векторных значений):

- h_1 – 1-я слабоискаженная плоскость;
- h_2 – 2-я слабоискаженная плоскость;
- S_1 – 1-й вектор сдвига;
- S_2 – 2-й вектор сдвига;
- S_3 – 3-й вектор сдвига;
- nw_1 – 1-я волновая нормаль;
- nw_2 – 2-я волновая нормаль;

- ξ_1 – 1-й собственный вектор;
 - ξ_2 – 2-й собственный вектор;
 - ξ_3 – 1-й собственный вектор;
- ◆ Данные в диапазоне углов наблюдения – текстовое представление результатов расчета по всем точкам наблюдения;
 - ◆ Данные для отдельных точек наблюдения – текстовое представление результатов расчета для точек наблюдения, выбранных вручную в режиме просмотра графических результатов вычисления скалярных значений.

Пример графических результатов вычисления скалярных значений представлен на рисунке (Рисунок 3.8).

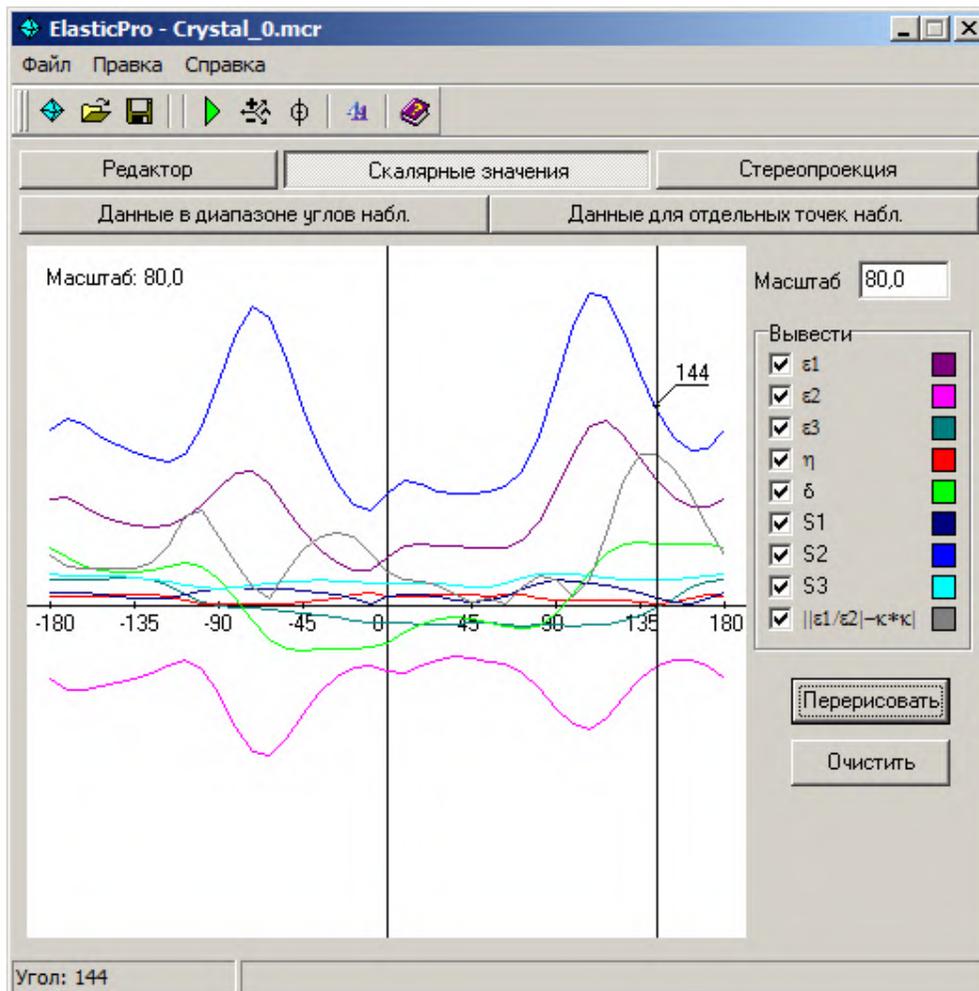


Рисунок 3.8 – Скалярные значения

В правой части рабочей области расположено поле выбора выводимых на экран значений и цветовая легенда. По-умолчанию курсор в этом режиме представляет собой вертикальную линию с риской. При нажатии левой кнопки мыши в точке пересечения вертикальной линии и риски на рисунке появляется выносная линия со значением угла наблюдения; для этого угла наблюдения производится расчет всех значений, текстовое представление которых доступно в режиме просмотра результатов для отдельных точек наблюдения. С помощью кнопки ϕ курсор переключается в режим «прицела». В этом режиме осуществляется автоматизированный поиск экстремумов графиков (Рисунок 3.9).

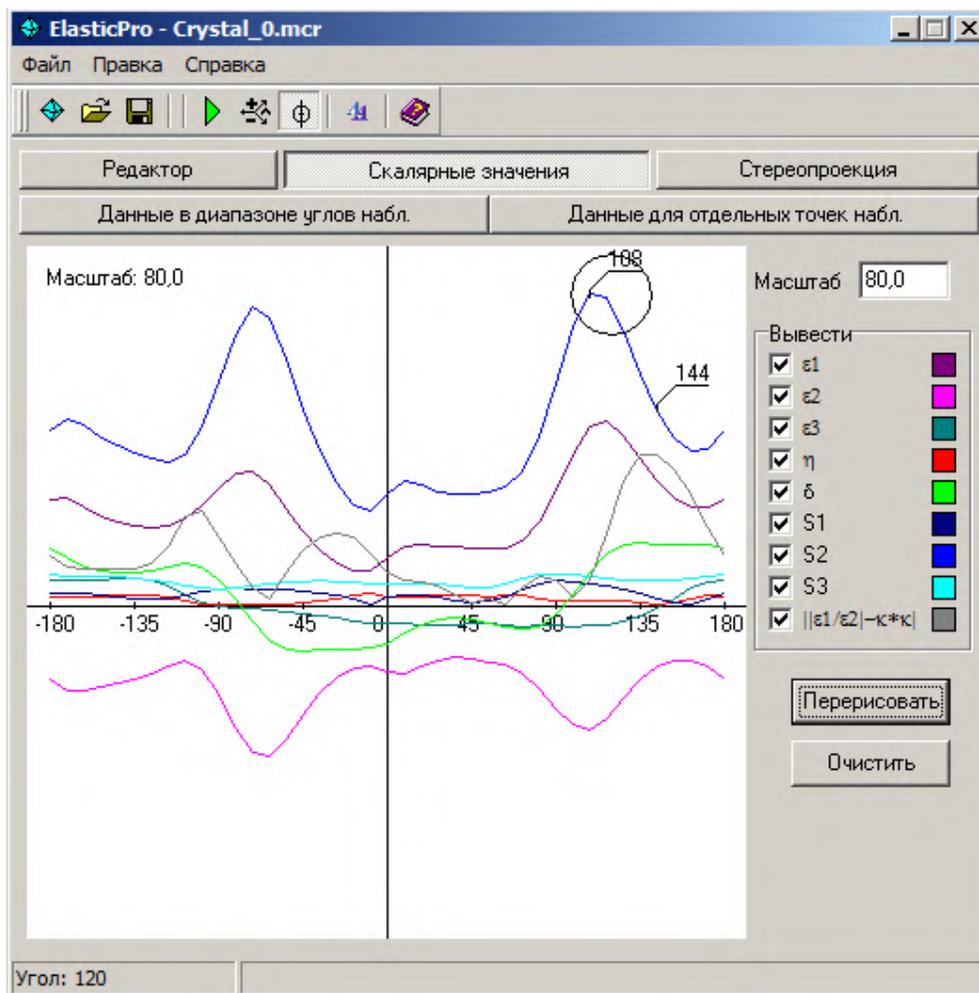


Рисунок 3.9 – Скалярные значения – поиск экстремума

Достаточно навести окружность, радиус которой можно изменить с помощью колеса мыши, на область экстремума и нажать левую кнопку мыши, и точка экстремума будет вычислена автоматически. Для нее также будет произведен дополнительный расчет и подпись угла наблюдения с выносной линией.

Пример графических результатов вычисления векторных значений в виде стереопроекций представлен на рисунке (Рисунок 3.10).

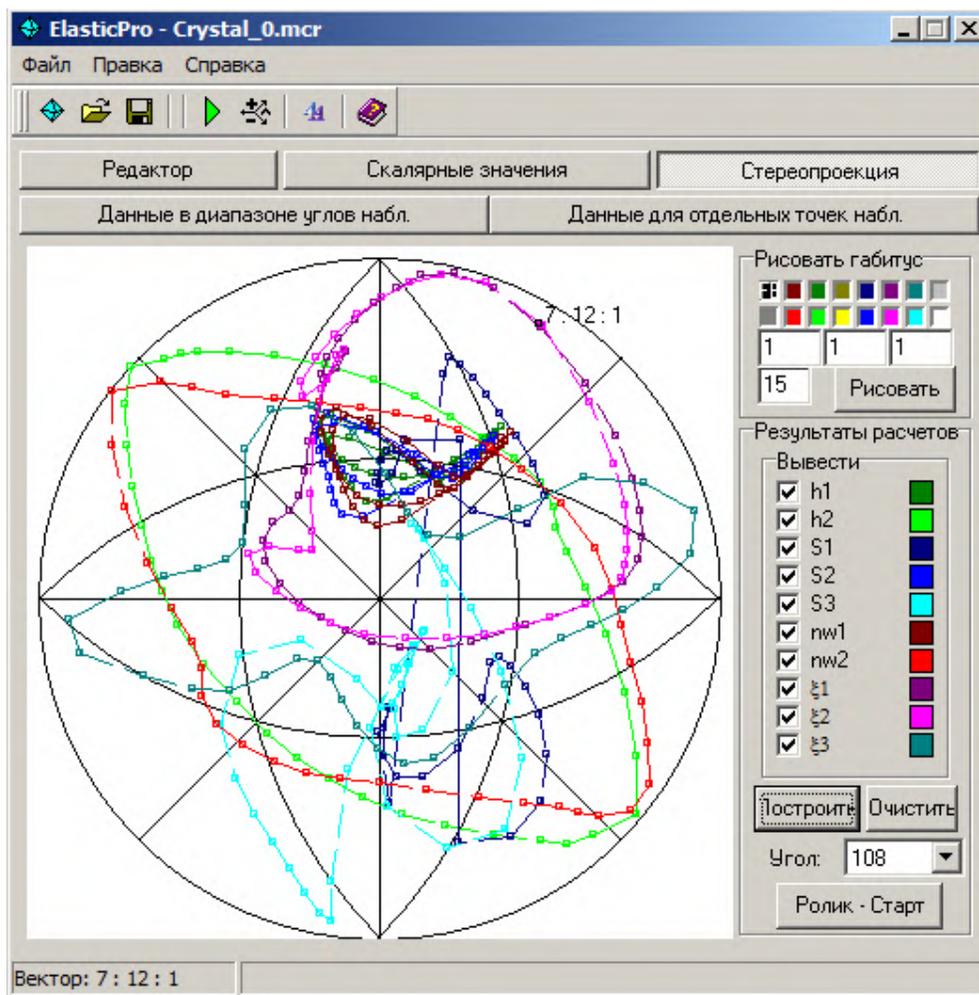


Рисунок 3.10 – Векторные значения

Как и для скалярных результатов, в правой части рабочей области расположено поле выбора выводимых на экран значений и цветовая легенда. Кроме того, можно нарисовать произвольный вектор либо

нажатием левой кнопки мыши, либо по его компонентам, а также включить последовательное выделение векторов всех величин для всех углов наблюдения («ролик»).

Пример текстового представления результатов приведен на рисунке (Рисунок 3.11).

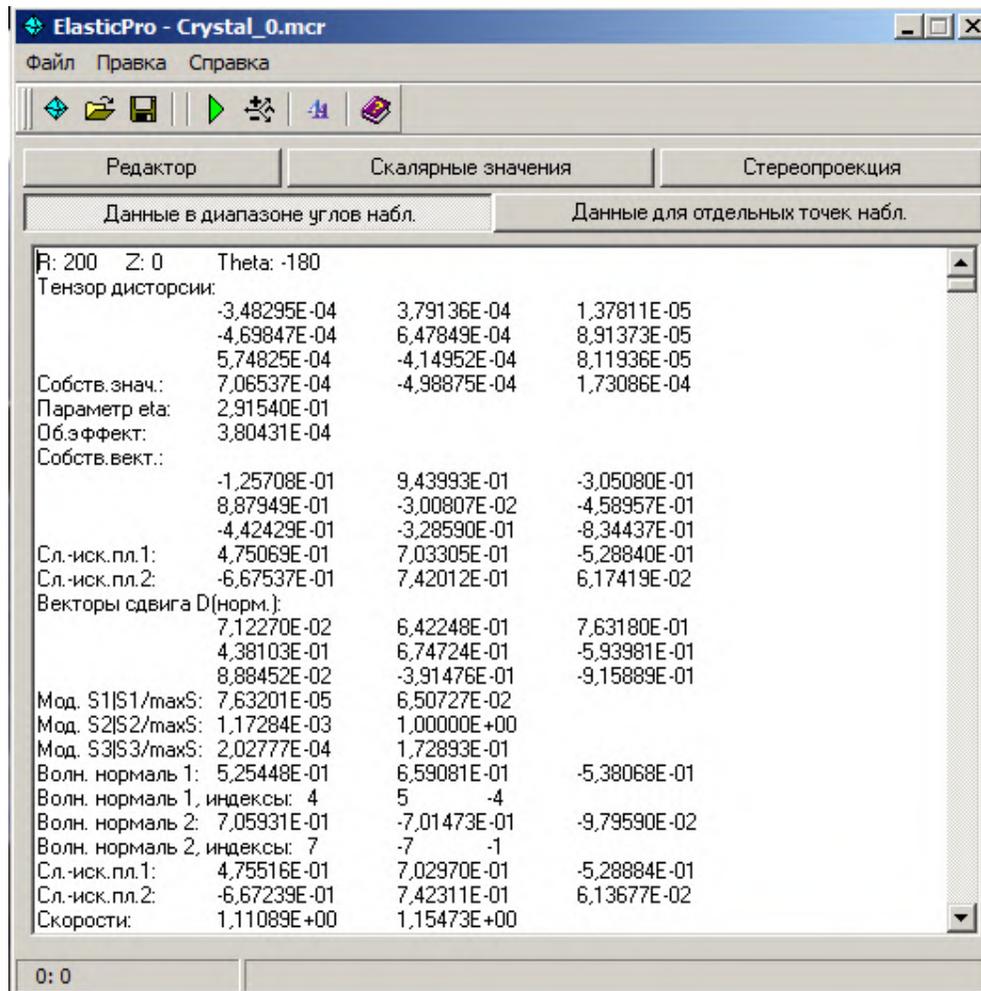


Рисунок 3.11 – Результаты вычислений в текстовом виде

Данные для отдельных точек наблюдения представлены в таком же формате.

С помощью кнопки  вызывается форма векторного калькулятора, позволяющего производить операции с векторами: сложение, вычитание,

скалярное и векторное умножение, нормализация вектора и поиск целочисленных индексов.

В пакет входит несколько программ для обработки полученных результатов.

3.6 Возможности развития системы

Архитектура программного обеспечения, в частности, классов упругих дефектов, позволяет развивать программный продукт в следующих направлениях:

- ◆ новые функциональные возможности в предметной области:
 - добавление новых дефектов;
 - добавление новых систем наблюдения;
 - добавление алгоритмов, обеспечивающих выбор точек наблюдения по результатам проведенных ранее расчетов;
 - расчет изменения состояния монокристалла и упругих дефектов во времени;
 - расчет взаимодействия разных дефектов;
- ◆ новые функциональные возможности по использованию продукта пользователями:
 - использование реляционной СУБД для сохранения конфигураций дефектов и результатов;
 - создание web-сервиса, позволяющего удаленным авторизованным пользователям использовать возможности программного продукта и делать результаты исследований доступными другим пользователям;
 - новые способы визуализации результатов.

Глава 4. Приложение кривонной модели для интерпретации ряда особенностей формирования полос сдвига

Изложенная в Главе (Глава 1) модель кривона носит в основном геометрический характер, поэтому, прежде чем ее применять с целью выявления дополнительных (к ориентациям границ полос сдвига) физических характеристик, полезно рассмотреть кратко вопросы устойчивости и генерации кривонов.

4.1 Устойчивость кривонов по критерию Франка

Для квадрата вектора Бюргерса \mathbf{b} (1.7) выполняется равенство

$$b^2 = (n\mathbf{b}_1)^2 + (m\mathbf{b}_2)^2 + 2nm(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2), \quad (4.1)$$

значит в энергетическом отношении возникновение кривона выгодно [104] при $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) < 0$. Именно этому варианту отвечают полосы сдвига (при $h < \ell$), наблюдавшиеся в [93, 94].

Тем не менее, сделаем ряд замечаний. 1. При плотности дислокаций $\rho \approx 10^{12} \div 10^{13} \text{ см}^{-2}$ выполнение критерия Франка не является обязательным. 2. Случай ортогональных векторов Бюргерса выпадает из области влияния критерия Франка. 3. Формирование полос с границами типа $\{hh\ell\}_\gamma$ для случая $h/\ell > 1$ возможно при распространении устойчивых суперкривонов, возникающих при действии обобщенных источников Франка-Рида (ОИФР) в областях контактов различных кристаллических фрагментов [105]. 4. Для быстро движущихся краевых дислокаций [106] при достижении ими скорости волн Рэлея отталкивание сменяется притяжением, поэтому, например, движущийся кривон в виде пачки призматических петель может быть устойчив (Рисунок 4.1).

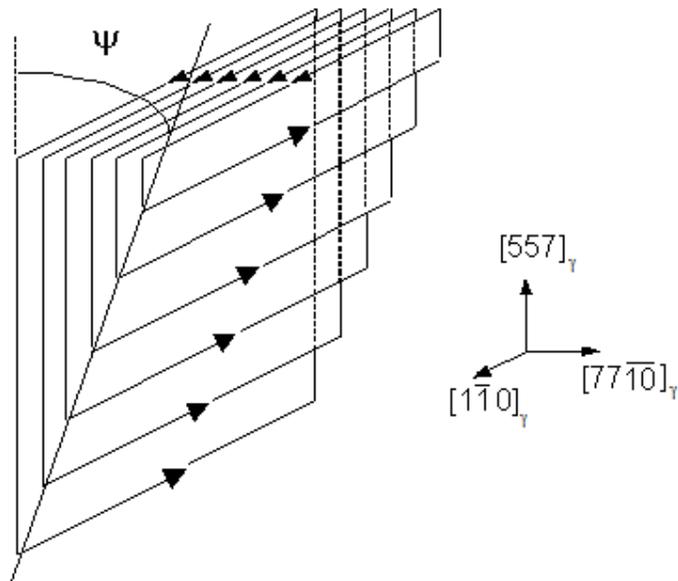


Рисунок 4.1 – Пример кристона – носителя сдвига $[77\bar{1}0]_{\gamma}$ (557) $_{\gamma}$

Ясно, что модели смещения на рисунке (Рисунок 4.1) можно сопоставить нелинейную волну солитонного типа. Подобные решения, как известно [107], существуют. Заметим, что в [108] распространение полос сдвига связывалось с быстрым волновым режимом.

4.2 Условия генерации кристонов

При макроскопическом описании процесса деформации общепринятым является построение зависимости σ – ε (напряжение–деформация) как для поли-, так и для монокристаллических образцов. Как правило, на кривой σ – ε можно выделить несколько стадий, различающихся динамическим коэффициентом упрочнения. Наибольший интерес представляют стадии, связанные с развитой пластической деформацией (десятки процентов ε), характеризующиеся высокой плотностью дислокаций ρ . При больших ρ дислокации интенсивно взаимодействуют, что морфологически отражается в формировании разнообразных дислокационных структур (см., например, [93]). В частности, в качестве типичного самостоятельного морфотипа на стадии

развитой пластической деформации выделяют полосовые структуры.. Применительно к кристаллам с ГЦК решеткой, как уже обсуждалось выше, впервые был сделан важный вывод о том, что формирование полос неоктаэдрического сдвига осуществляется крислонами – носителями сдвига супердислокационного типа. Генерацию крислонов естественно трактовать как результат действия ОИФР. Роль рабочего сегмента в ОИФР выполняет дислокационный жгут (сплетение дислокаций), ориентированный вдоль направления типа $\langle 110 \rangle_\gamma$. Существенным элементом сплетения является барьер Ломера-Коттрелла либо пучок таких барьеров. Жгут содержит в общем случае n и m дислокаций взаимодействующих систем скольжения, то есть характеризуется суперпозиционным вектором Бюргерса \mathbf{b} (1.7).

Ясно, что выгибание жгута в пластинообразной области с плоскими границами, имеющими ориентировки $(hh\ell)_\gamma$, может сопровождаться генерацией жгута дислокационных петель, способных к скольжению в $(hh\ell)_\gamma$ плоскостях. Напомним, что в [93] фиксировались соотношения h/ℓ , близкие к $11/13$ и $5/7$, а в [94] (при $\varepsilon=9\% \div 47\%$) наблюдалась более богатая последовательность ориентировок:

$$h/\ell : 23/25, 11/13, 5/7, 1/2, 1/3, \quad (4.2)$$

которой, согласно (1.8), отвечают значения

$$n/m: 24/1, 12/1, 6/1, 3/1, 2/1. \quad (4.3)$$

Следует отметить, что в экспериментах [94] ориентировки полос изучались после достижения деформацией сжатия значений 9%, 16%, 25%, 47%, соответственно. Причем в случае $\varepsilon=47\%$ полосы с ориентировкой границ $(112)_\gamma$ фиксировались в относительно небольших долях, локализуясь в областях, еще сохранявших сетчатую дислокационную субструктуру, тогда как полосы с границами $(113)_\gamma$ доминировали во всем объеме образца. Указанные деформации не

являются пороговыми, отвечающими смене ориентировок полос. Однако можно утверждать, что, например, деформация $\varepsilon=16\%$ превышает деформацию, при которой происходит смена ориентировки $(23\ 23\ 25)_\gamma$ на $(11\ 11\ 13)_\gamma$. Установление пороговых значений ε_i , в рамках развиваемого подхода, как показано ниже, возможно на основе анализа условия генерации кристонов.

Критическое напряжение $\tau_{кр}$ обобщенного источника Франка-Рида выбирается в той же форме, что и для обычного источника:

$$\tau_{кр} \sim \frac{Gb}{L}, \quad (4.4)$$

где G – модуль сдвига; L – длина барьера Ломера–Коттрелла.

В качестве масштаба величины L в (4.4) принимается расстояние между барьерами L^\perp . Следовательно, выгибание дислокационного жгута до критического радиуса $\left(r \geq \frac{L}{2}\right)$ происходит в свободном от кристонов объеме с размером порядка L^\perp . Рост плотности дислокаций сопряженной системы скольжения должен сопровождаться ростом плотности барьеров (ρ^\perp) и снижением L^\perp .

4.3 Состав кристона и пороговые значения деформации

Пусть для фрагмента монокристалла с двумя действующими системами скольжения выполняется условие:

$$L^\perp \sim \frac{1}{\sqrt{\rho^\perp}}, \quad (4.5)$$

где ρ^\perp – плотность барьеров в перпендикулярном к $[1\ \bar{1}\ 0]_\gamma$ направлении.

Числа m и n задают доли дислокаций взаимодействующих систем скольжения ($\frac{n}{n+m}$ и $\frac{m}{n+m}$ соответственно), поэтому плотность барьеров ρ^\perp должна быть пропорциональна:

$$\rho^\perp \sim \frac{m}{n+m} = \frac{1}{1+n/m}. \quad (4.6)$$

Пусть значениям пластической деформации ε_j и ε_k соответствуют экспериментальные значения L_{ej}^\perp и L_{ek}^\perp . Тогда на основании (4.5) и (4.6) следует ожидать соотношений

$$\frac{L_{ek}^\perp}{L_{ej}^\perp} = \sqrt{\frac{\rho_j^\perp}{\rho_k^\perp}} = \sqrt{\frac{1+(n/m)_k}{1+(n/m)_j}}, \quad (4.7)$$

где $\left(\frac{n}{m}\right)_k$ – отвечает отношению долей дислокаций основной и сопряженной систем при деформации ε_k , а $\left(\frac{n}{m}\right)_j$ – при деформации ε_j .

В настоящее время для проверки соотношений (4.7) полного набора точных значений требуемых характеристик не имеется. Однако, даже оценки, выполненные в [110] при отождествлении степеней деформации 9, 16, 25, 47% с пороговыми значениями деформации, продемонстрировали удовлетворительное соответствие с экспериментом. Ясно, что, располагая достоверными данными хотя бы об одной паре значений величин L_{ej}^\perp и $\left(\frac{n}{m}\right)_j$, с помощью (4.7) по известным значениям $\left(\frac{n}{m}\right)_i$ легко найти значения L_{ei}^\perp . Далее, по известной зависимости L^\perp от ε можно установить пороговые значения ε_i , соответствующие L_{ei}^\perp . Учтем, что при больших деформациях ($\varepsilon \gtrsim 50\%$) наблюдается эффект насыщения, выражающийся в существовании минимального неизменяющегося (при

увеличении деформации) межполосного расстояния, равного 0.4 мкм в случае монокристаллов Ni_3Fe .

Тогда, принимая минимальное значение $L^\perp = L_5^\perp = 0.4 \text{ мкм}$ и полагая, что ему соответствует $(n/m)_5 = 1/2$, с помощью (4.7) легко восстанавливаем значения $(L^\perp)_i$ ($i < 5$), отвечающие $(n/m)_i$, которые приведены в таблице (Таблица 4.1).

Таблица 4.1 – Значения $(L^\perp)_i$, рассчитанные по формуле (4.7) для монокристаллов Ni_3Fe

i	$(n/m)_i$	$(h/\ell)_i$	L_i^\perp , мкм	ε_i , %
1	24/1	23/25	1.155	9
2	12/1	11/13	0.833	13,5
3	6/1	5/7	0.611	19
4	3/1	1/2	0.462	25.9
5	2/1	1/3	0.4	47

Значения ε_i , приведенные в таблице (Таблица 4.1), найдены с использованием найденной в $[111]$ экспериментальной зависимости $L^\perp(\varepsilon)$, изображенной на рисунке (Рисунок 4.2).

Следует отметить, что смена ориентировок границ полос $(557)_\gamma$ - $(112)_\gamma$ должна происходить при $\varepsilon \approx 26\%$. Поэтому не удивительно, что при $\varepsilon \approx 47\%$ доля полос с границами (112) не велика. Из данных таблицы (Таблица 4.1) видно, что только ε_1 и ε_5 соответствуют использованным в $[110]$ значениям. В то же время ε_2 , ε_3 , ε_4 , как и можно было предполагать, имеют меньшие значения, чем использовались в $[110]$. В связи с этим представляет интерес целенаправленный эксперимент по измерению значений ε_i , отвечающих смене ориентировок $(hh\ell)$, и их сравнению с данными таблицы (Таблица 4.1).

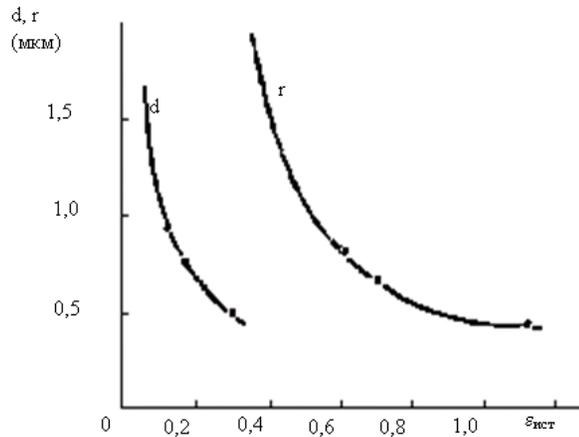


Рисунок 4.2 – Средние расстояния между клубками (d) и между микрополосами (r) в зависимости от логарифмической деформации $\varepsilon_{\text{ист}}$ для кристаллов Ni_3Fe с осью сжатия $[001]_\gamma$ (см. [111]).

4.4 Интерпретация кривой σ – ε для монокристаллов $[001]_\gamma \text{Ni}_3\text{Fe}$

Если допустить, что b уменьшается при увеличении номера i в таблице (Таблица 4.1) и отождествить в (4.4) L с L^\perp , то приведенное значение $(\tau_{\text{кр}}^\perp/G)_i$ будет убывать [110] при росте i . Однако, данное поведение $(\tau_{\text{кр}}^\perp/G)_i$ не соответствует наблюдаемому возрастанию τ при росте ε . Тем не менее, можно предположить, что кривая $\sigma(\varepsilon)$ коррелирует со значениями напряжений образования кристонов $\tau_{\text{кр}}^\perp$ (4.4), поскольку образование мезо- и макрополос деформации типично в рассматриваемом диапазоне деформаций. Кажущееся противоречие может быть устранено, если вместо равенства $L = L^\perp$ принять соотношение

$$L = \frac{L^\perp}{a} \gamma b, \quad (4.8)$$

где a – параметр решетки; γ – безразмерный параметр ($0 < \gamma < 1$), показывающий, какую долю составляет L от модуля вектора трансляции

$\mathbf{B} = \frac{L^\perp}{a} \mathbf{b}$ суперрешетки ($\mathbf{B} \parallel \mathbf{b}$), образованной в данном фрагменте рабочими сегментами обобщенного источника Франка-Рида, направленными вдоль $[1\bar{1}0]_\gamma$.

Гипотезу о суперрешетке, с параметрами, кратными решетке ГЦК в плоскости $(1\bar{1}0)_\gamma$, иллюстрирует рисунок (Рисунок 4.3), где символ краевой дислокации использован для обозначения суперрешетки.

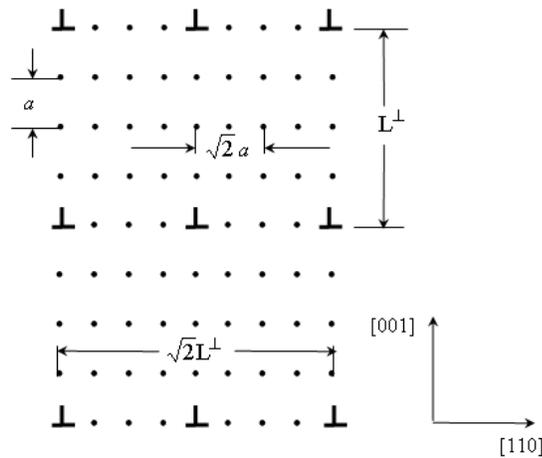


Рисунок 4.3 – Суперрешетка в сечении $(1\bar{1}0)$ ГЦК-решетки при $L^\perp = 4a$

Роль параметра суперрешетки выполняет величина L^\perp , а реальное соотношение $L^\perp/a \sim 10^3$ существенно больше, чем на рисунке (Рисунок 4.3).

Рассматривая величину γ как феноменологический параметр, его значения можно найти, приравнявая наблюдаемую (для некоторого значения ε_i) величину внешнего скалывающего напряжения τ вдоль $[\parallel 2\bar{h}]_\gamma$ направления в плоскости $(hh\ell)_\gamma$ к $\tau_{кр}$. С учетом (4.4) и (4.8), это равенство для чисто краевых (по отношению к $[1\bar{1}0]_\gamma$ направлению $\mathbf{b} \perp [1\bar{1}0]_\gamma$) кристонов принимает вид:

$$\tau = \sigma M = \frac{Ga}{2\gamma L^\perp}, \quad (4.9)$$

где σ – одноосное напряжение, а M – величина фактора Шмида для сдвига $[112\bar{h}]_\gamma (hh\ell)_\gamma$, приведенная в таблице (Таблица 4.2).

Таблица 4.2 – Фактор Шмида для различных ориентировок $(hh\ell)_\gamma$

h/ℓ	1/1	23/25	11/13	5/7	1/2	1/3	1/5
M	0.4714	0.4832	0.4920	0.4999	0.4714	0.3857	0.2619

Заметим, что при больших деформациях термин «напряжение течения» более корректен по сравнению с термином «критическое сдвиговое напряжение», поскольку генерация носителей сдвига осуществляется не в свободный от дефектов объем.

Очевидно, что при оценке, претендующей не только на качественное соответствие с экспериментальными данными, следует использовать модуль G для сдвига $[112\bar{h}]_\gamma (hh\ell)_\gamma$, то есть явно учесть упругую анизотропию.

Для направлений сдвига, лежащих в $(1\bar{1}0)_\gamma$ плоскости, величина G может быть выражена в аналитической форме с помощью решения уравнение Кристоффеля (см. напр. [112]):

$$G(\theta) = \frac{1}{2} \left\{ [B_1 + V(\theta)] - [(B_2 + V(\theta))^2 + 4(B_2 + 2B_3)V(\theta)\cos^2\theta]^{\frac{1}{2}} \right\}, \quad (4.10)$$

где θ – угол между направлениями $[001]$ и $[hh\ell]$; $B_1 = C_{11} + C_{44}$; $B_2 = C_{11} - C_{44}$; $B_3 = C_{12} + C_{44}$; $V(\theta) = \frac{1}{2} \sin^2\theta (B_3 - B_2)$.

Насколько нам известно, упругие модули для Ni_3Fe в литературе отсутствуют. Однако для оценки влияния упругой анизотропии на величину G можно воспользоваться известными данными для Ni (в

единицах 10^2 ГПа): $C_{11}=2.5$, $C_{12}=1.6$, $C_{44}=1.185$. В таблице (Таблица 4.3) приведены значения модуля сдвига по плоскостям $(hh\ell)_\gamma$, рассчитанные с помощью (4.10).

Таблица 4.3 – Модуль сдвига G_i по плоскостям $(hh\ell)_\gamma$, $\times 10^{11}$ Па

$(hh\ell)$	$(110)_\gamma$	$(111)_\gamma$	$(232325)_\gamma$	$(111113)_\gamma$	$(557)_\gamma$	$(112)_\gamma$	$(113)_\gamma$	$(001)_\gamma$
G_i	1.185	0.695	0.6696	0.6486	0.6224	0.5080	0.7790	1.185

Как видно из таблицы (Таблица 4.3), значения G для сдвигов по плоскостям $(001)_\gamma$ (как и по $(110)_\gamma$) и $(112)_\gamma$ значительно различаются. Значит, учет анизотропии при количественном описании является необходимым.

Экспериментальные значения σ_i в случаях сплавов с дальним порядком (ДП) и ближним порядком (БП) приведены в таблице (Таблица 4.4).

Таблица 4.4 – Экспериментальные значения σ и ε для сплава Ni_3Fe

$\varepsilon_i, \%$	9	13.5	19	25.9	47
$\sigma_i(\text{БП}), \text{кг/мм}^2$	10.9756	14.6341	19.5121	25.6097	46.3414
$\sigma_i(\text{ДП}), \text{кг/мм}^2$	17.0731	23.1707	32.9268	46.3414	81.7073

Данные приведены для значений ε_i из таблицы (Таблица 4.1) при $a=3.5\text{\AA}$. На основании данных, приведенных в таблицах (Таблица 4.1 и Таблица 4.2) с помощью соотношения (4.9) можно рассчитать значения параметра γ_i . Результаты приведены в таблице (Таблица 4.5).

Таблица 4.5 - Значения параметра γ при разных степенях деформации

$\varepsilon_i, \%$	9	13.5	19	25.9	47
$\gamma_i(\text{БП})$	0.195	0.193	0.187	0.162	0.195
$\gamma_i(\text{ДП})$	0.125	0.122	0.110	0.090	0.110

Как и ожидалось, значения $\gamma_i \sim (0.1 \div 0.2) < 1$, и, значит, критический размер рабочего сегмента ОИФР не превышает 20% от вектора трансляции суперрешетки В. Следовательно, ОИФР способен сгенерировать ряд петель до достижения радиусом первой из них значения В.

Заметим, что значения γ_i (ДП) наверняка занижены, так как в обоих случаях (ДП и БП) при оценке γ_i использовались одни и те же модули G_i из таблицы (Таблица 4.3), тогда как, судя по значениям σ_i в таблице (Таблица 4.4), в случае ДП G_i должны быть заметно выше. Сравнение γ_i при одном и том же типе упорядочения показывает, что при $\gamma(\text{БП}) \approx 0.19 \div 0.195$ имеется (с учетом погрешности) практическое совпадение $\tau_i = \sigma_i M_i$ со значениями $\frac{G_i a}{2\gamma L_i^\perp}$ для $i=1,2,3,5$.

При $i=4$ величина γ_4 несколько ниже остальных значений γ_i , что обусловлено снижением упругого модуля G (Таблица 4.3). Ясно, что допущение о суперрешетке может рассматриваться как нулевое приближение при оценках реальных распределений сегментов ОИФР на масштабах $> L^\perp$.

4.5 Возможность инициации формирования ансамбля кристаллов мартенсита кристонным носителем сдвига

Рассмотрим теперь случай возможного формирования ансамбля кристаллов мартенсита вблизи полосы сдвига, ориентация границ которой задается кристоном - носителем локализованного сдвига. Основной вклад в преодоление энергетического межфазного барьера вносит мезоскопическое упругое поле кристона. Упругие поля кристонов рассчитываются для железоникелевых сплавов. Рассмотрение проводится на примере полос сдвига с ориентировками границ типа $(hh\ell)_\gamma$; $(111)_\gamma$,

$(557)_\gamma$ и $(225)_\gamma$. Ядро кристона моделируется совокупностью параллельных прямоугольных призматических петель с векторами Бюргера, соответственно, коллинеарными $[11\bar{2}]_\gamma$, $[7\ 7\ \bar{10}]_\gamma$ и $[55\bar{4}]_\gamma$. Основные элементы петель имеют ориентировку $\tau_1 \parallel [1\bar{1}0]_\gamma$ и их длины равны, тогда как дополнительные дислокационные линии имеют ориентировку $\tau_2 \parallel [hh\ell]_\gamma$. Исследуются упругие поля при двух вариантах ядер кристона: типа «пластина» (ядро содержит избыточный материал) и типа «дырка». Для первого варианта характерно положительное значение относительного изменения объема δ во внешней области, примыкающей к границе полосы сдвига вблизи ядра кристона, тогда как область внутри полосы сдвига в процессе движения кристона характеризуется отрицательным δ . Для второго варианта ситуация является обратной.

На рисунке (Рисунок 4.4) показано, каким образом ориентирована система координат. L_1 , L_2 – длины основной и вспомогательной линий базовой петли кристона; τ_1 , τ_2 – их направления; $\text{tg } \varphi$ – деформация сдвига.

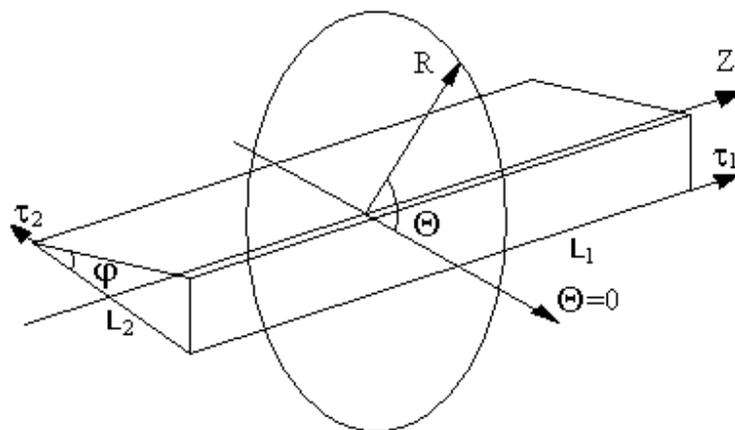


Рисунок 4.4 – Ориентация цилиндрической системы координат (Z , R , Θ). для расчета упругого поля кристона

На рисунке (Рисунок 4.5) приведены результаты расчета угловой зависимости собственных значений тензора деформации ε_1 (растяжение) и ε_2 (сжатие), изменения относительного объема δ , величины сдвига S и $\xi_1 \cdot [001]$ – проекции единичного собственного вектора ξ_1 на $[001]$ -направление при $R=700$, $C_L = 0.2508$, $C_{44}=0.1034$ $C' = 0.0271$ (ТПа). Хорошо видно, что экстремумы собственных чисел, сдвига и проекции $\xi_1 \cdot [001]$ локализируются примерно в одной и той же области углов.

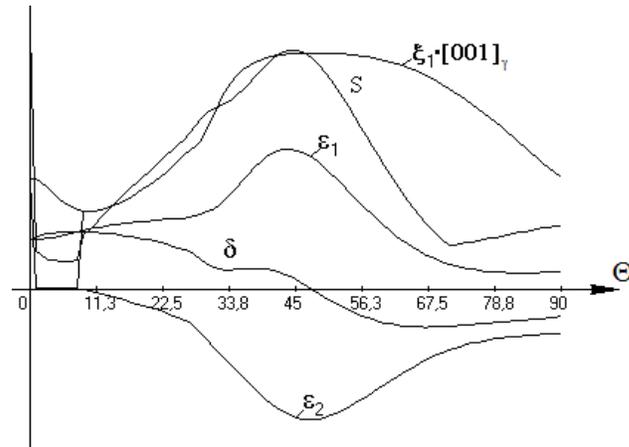


Рисунок 4.5 – Результаты расчета упругого поля кристона ($L_1=7000$, $L_2=1000$, $\tau_1 \parallel [1\bar{1}0]_\gamma$, $\tau_2 \parallel [225]_\gamma$, $\varphi=20^\circ$, $N=5$) при $Z=0$, $R=700$, $0 < \Theta < 90$. S – модуль сдвига, ε_1 , ε_2 – главные значения тензора деформации, δ – относительное изменение объема, $\xi_1 \cdot [001]_\gamma$ – проекция единичного собственного вектора ξ_1 на $[001]_\gamma$.

Область локализации экстремумов смещается при изменении R (Рисунок 4.6). Это отражает явную неоднородность упругого поля кристона.

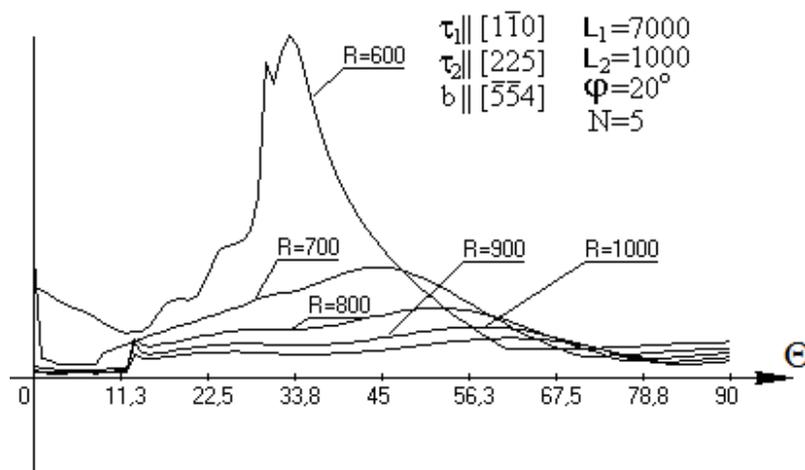


Рисунок 4.6 – Зависимость модуля сдвига упругого поля кристона от угла Θ ЦСН для различных значений R

Результаты локализации областей с экстремумами перечисленных характеристик по угловой и пространственной координатам приведены на рисунке (Рисунок 4.7). Дугообразные отрезки соответствуют значениям $R=600, 700, 800, 900, 1000$, а интересующие нас области экстремумов ограничены парами близко расположенных рисок.

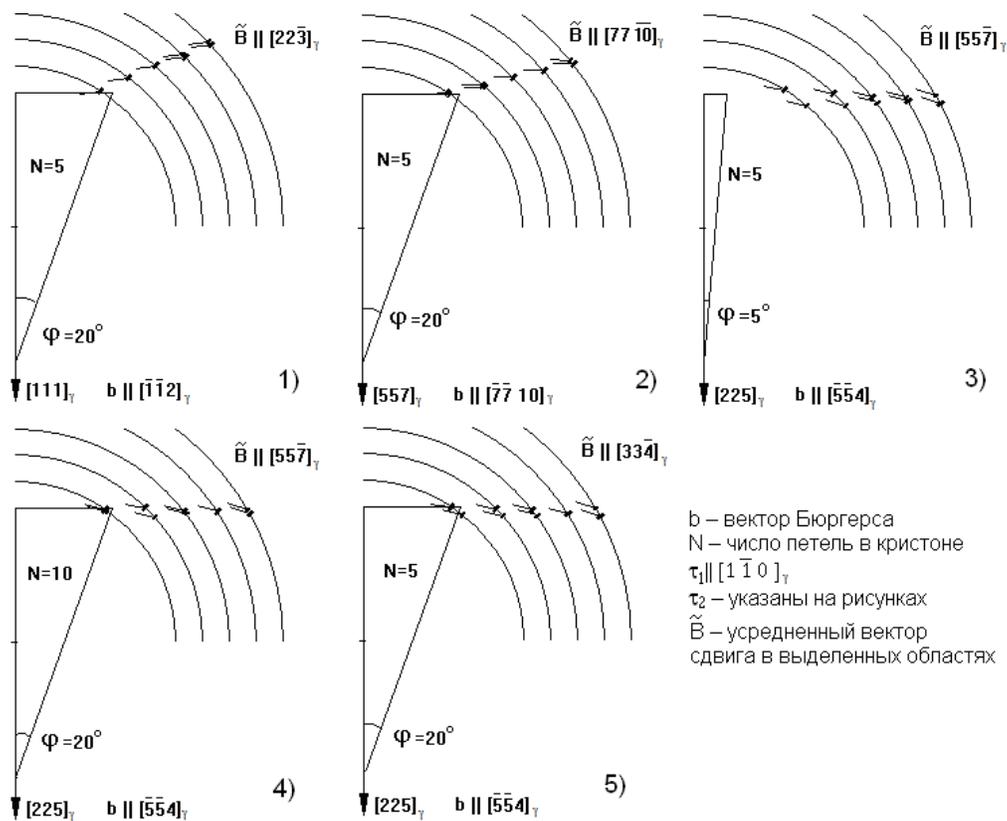


Рисунок 4.7 – Распределения областей максимального сдвига упругих полей кристонов и областей, в которых собственные векторы ξ_1 , ξ_2 коллинеарны осям $[001]_\gamma$ и $[110]_\gamma$ ячейки Бейна.

Первый из рисунков (Рисунок 4.7) для случая $\tau_2 \parallel [111]_\gamma$, соответствует призматическому скольжению по плотноупакованным плоскостям $(111)_\gamma$, с величиной сдвига, близкой к таковой при механическом двойниковании аустенита. Видно, что для полосы, соответствующей кристаллу мартенсита деформации с габитусом $(111)_\gamma$ максимуму вектора сдвига соответствует при $N=5$ (и значительной величине сдвига $\text{tg}\varphi \approx 0.36$) направление $\mathbf{B} \parallel [22\bar{3}]_\gamma$, лежащее в плоскости $(33\bar{4})_\gamma$.

Второй рисунок для $\tau_2 \parallel [557]_\gamma$ соответствует призматическому скольжению по плоскостям $(557)_\gamma$ и приводит к ориентации $\mathbf{B} \parallel [77\bar{1}0]_\gamma$, лежащей в плоскости $(557)_\gamma$. Следовательно, в данном случае поле

кристона инициирует возникновение ансамбля кристаллов с габитусами, параллельными габитусу материнского кристалла.

Следует ожидать, что подобные кристаллы будут иметь реечную форму с наибольшим размером вдоль τ_1 , т.к. инициирующее мезоскопическое поле убывает при удалении от границы полосы сдвига. В зависимости от механизма роста, эти кристаллы могут быть отнесены как к кристаллам мартенсита напряжения, так и к кристаллам мартенсита деформации. Данный механизм перспективен при интерпретации образования упорядоченных колоний мелких кристаллов мартенсита, локализованных вблизи полос сдвига.

Из трех рисунков для случая $\tau_2 \parallel [225]_\gamma$, видно, что для полосы, соответствующей кристаллу мартенсита деформации с габитусом (225) максимуму вектора сдвига соответствует при $N=10$ (и значительной величине сдвига $\text{tg}\varphi \approx 0.36$) направление $\mathbf{V} \parallel [55\bar{7}]_\gamma$, лежащее в плоскости $(7\ 7\ 10)_\gamma$. Такая плоскость составляет с $(557)_\gamma$ угол, близкий к 0.6° , то есть плоскости $(7\ 7\ 10)_\gamma$ и $(557)_\gamma$ в пределах экспериментальной погрешности неразличимы. Косвенно это согласуется с наблюдаемой картиной симбиоза кристаллов $(225)_\gamma$ и реек $(557)_\gamma$ для мартенсита охлаждения в сталях [113]. Этот результат сохраняется и при одновременном снижении до $N=5$ и $\text{tg}\varphi$ до ≈ 0.09 (при $\varphi=5^\circ$).

Уменьшение до $N=5$ (при $\text{tg}\varphi \approx 0.36$) сопровождается изменением направления максимального сдвига \mathbf{V} : $\mathbf{V} \parallel [33\bar{4}]_\gamma$, который лежит в плоскости $(223)_\gamma$, составляющей с $(557)_\gamma$ угол близкий к 2° . Следовательно, и эта плоскость близка к $(557)_\gamma$.

Таким образом, имеет место определенная устойчивость результатов для ожидаемых габитусов ансамблей кристаллов, появление которых должно инициировать поле растущего кристалла с габитусом $(225)_\gamma$. Устойчивость же воспроизведения фиксированной ориентировки реек с

габитусами $(557)_\gamma$ в ансамбле дополнительно обеспечивается отмеченной выше особенностью для сдвига вдоль $(557)_\gamma$, приводящего к точному совпадению направления максимального сдвига, порождаемого в окружающем аустените, с исходным направлением сдвига в «материнском» кристалле.

Разумеется, можно ожидать, что крупный «материнский» кристалл мартенсита деформации с габитусом $(557)_\gamma$ будет инициировать формирование кристаллов с габитусами параллельными материнскому. Напомним, что кристаллам с габитусами $(557)_\gamma$ должен соответствовать меньший уровень переохлаждения ниже точки равновесия фаз T_0 по сравнению с $(225)_\gamma$ -кристаллами.

Поэтому, обобщая, в качестве тенденции отметим, что в случае близости температуры образца T к точке T_0 равновесия фаз, упругое поле кристона в области $\delta > 0$ может стимулировать формирование мартенсита деформации с макроскопическим габитусом, коллинеарным границе полосы сдвига. При меньших степенях переохлаждения, когда T близка к температуре M_S^σ ($T > M_S^\sigma$), поле кристона может, кроме того, породить систему центров зарождения α -мартенсита, кристаллы которого имеют габитусы, неколлинеарные границам полос сдвига.

Конечно, в концентрационном интервале легирующего элемента (углерода), при котором в принципе могут сосуществовать кристаллы с габитусами $(557)_\gamma$ и $(225)_\gamma$ результирующий эффект диктуется состоянием среды, главным образом, исходными дефектами и особенностью напряженного состояния.

4.6 Заключение к главе 4

Подведем итоги.

1. Выполненный анализ кривой $\sigma(\varepsilon)$ для монокристаллов Ni_3Fe совместим (для достаточно широкого интервала деформаций $9\% < \varepsilon < 50\%$) с выводом о сопоставимости напряжений генерации стандартных дислокаций и кристонов.
2. Говоря о гипотезе суперрешетки, следует отметить, что, с одной стороны, она близка к известной точке зрения Зегера на роль барьеров в упрочнении материала, но, с другой стороны, имеет существенное отличие, поскольку предполагает, что каждый из элементов суперрешетки способен выполнять функции рабочего сегмента обобщенного источника Франка-Рида.
3. Учет упругой анизотропии обязателен при трактовке экспериментальных результатов, полученных для монокристаллов.
4. 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. Хотя результатов систематических прецизионных исследований таких вариантов не проводилось, качественно подобные картины неоднократно наблюдались. Не исключено, что близкий по сути механизм обеспечивает симбиоз между речными кристаллами с габитусами $\{557\}_\gamma$ и пластинами частично двойникованных кристаллов с габитусами $\{225\}_\gamma$, хорошо известный [113] для случая мартенсита охлаждения.

Результаты этой главы опубликованы в работах [110, 114-119].

Глава 5. Модифицированные дислокационные центры зарождения мартенсита охлаждения и нижнего бейнита систем Fe-Ni и Fe-C

В этой главе будет продолжено рассмотрение влияния упругих полей дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) мартенсита с учетом особенностей исходной среды (аустенита).

Вначале (в соответствии с обсуждением в 1.5.1) рассматривается вопрос о влиянии точечных дефектов на упругие поля ДЦЗ. Затем обсуждаются экспериментальные данные, касающиеся появления МК после значительной деформации аустенита. При этом основное внимание уделяется возможности реализации мартенсита охлаждения с ориентационными соотношениями (ОС), в которых выполняется условие точной параллельности плоскостей, входящих в ОС. И, наконец, в рамках динамической теории рассматриваются особенности формирования кристаллов бейнитного феррита, применительно к нижнему бейниту.

5.1 Влияние точечных дефектов на упругие поля дислокационных центров зарождения мартенсита

5.1.1. Вводные замечания

Рассматривая в качестве модельных системы Fe-Ni (сплавы замещения) и Fe-C (сплавы внедрения), напомним, что, наряду с рядом сходных черт изменения базовых морфологических признаков при изменении концентрации, соответственно, никеля и углерода, можно указать и ряд отличий. Так, например, в системах Fe-C при концентрациях углерода 0.6-1.4 массового % типичными ориентациями габитусов мартенсита являются $\{2\tilde{2}5\}_\gamma$, не наблюдаемые в системах Fe-Ni. Кроме того, при больших концентрациях никеля (30-34%) типичными являются габитусы $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$, тогда как для больших концентраций

углерода (1.4-1.8 массового %) характерны габитусы $\{259\}_\gamma$. Адекватную в физическом отношении картину превращения дает подход [12], базирующийся на синтезе концепций гетерогенного зарождения и волнового роста мартенсита, освещенный в общих чертах в первой главе. Информация об ориентации волновых нормалей \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 управляющих волн наследуется волновым процессом в локальной области потери устойчивости решетки и, фактически, совпадает с ориентацией собственных векторов ξ_1 и ξ_2 тензора упругих деформаций ДЦЗ мартенсита. Имея информацию об упругих модулях монокристаллов, можно рассчитать векторы ξ_1 и ξ_2 в окрестности конкретных ДЦЗ, а затем с помощью (1.2) найти ориентировку нормалей к габитусным плоскостям \mathbf{N}_w . Далее, сравнивая спектр расчетных ориентировок \mathbf{N}_w со спектром наблюдаемых \mathbf{N}_s , можно установить область локализации НВС, обеспечивающих старт быстрого роста кристаллов новой фазы. Подобная программа действий приводит [12, 101] к хорошему согласованию расчетных и экспериментальных данных не только для усредненных габитусов, но и их распределений при рассмотрении в качестве ДЦЗ дислокационных петель (скользящего и призматического типов) в форме параллелограммов и прямоугольников, основные элементы которых совпадают с линиями $\langle 1\bar{2}1 \rangle_\gamma$ и $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\gamma$. В частности, было высказано предположение о том, что упругое поле призматических петель дырочного типа может существенно модифицироваться примесью внедрения в ближней окрестности дислокационной петли. В связи с этим основная цель данного параграфа – рассчитать влияние добавочного упругого поля, создаваемого примесью внедрения, локализованной внутри петли «дырочного» типа, на процессы зарождения мартенсита. В первом приближении естественно использовать принцип суперпозиции при расчете результирующего упругого поля.

Методика расчета, расчетные параметры, система отсчета и упрощения модели подробно освещены в пп. 2.4 и 2.5 второй главы, а программная реализация – в третьей главе.

5.1.2. Результаты расчета и их анализ

Расчет тензора дисторсии и представление его суммой 3-х диад позволяет выделить области, благоприятные для зарождения мартенсита, в которых тензор $\hat{\chi}$ приближенно описывается одной из диад вида $\hat{\chi} \approx \mathbf{S} \cdot \mathbf{h}$, где \mathbf{S} – вектор сдвига вдоль слабоискаженной (или инвариантной) плоскости с единичной нормалью \mathbf{h} . Степень отличия слабоискаженной плоскости от инвариантной характеризуется параметром $\eta = |\varepsilon_3| / \sqrt{|\varepsilon_1| |\varepsilon_2|}$, где ε_i – собственные числа тензора деформации ($\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$). Изменение относительного объема δ в линейном приближении совпадает со следом тензора дисторсии $\delta = \text{Sp} \hat{\chi}$. На рисунке (Рисунок 5.1) представлены зависимости $S = |\mathbf{S}|$, η , δ от угла θ для петли с параметрами, указанными в п.5.1.1, при $Z=0$ и расстоянии от начала координат $R=200$ без примеси внедрения (S_0, η_0, δ_0) и при количестве примеси N , эквивалентном $4,2 \cdot 10^5$ – (S_1, η_1, δ_1).

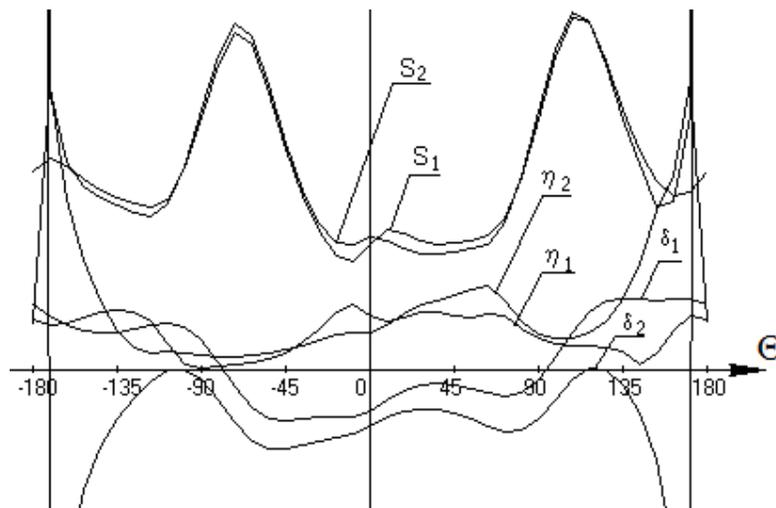


Рисунок 5.1 – Угловые зависимости параметров η , δ и S

Масштаб по оси Y выбран условный, но соответствующие друг другу параметры выведены в одном масштабе. Прежде всего, отметим, что аномалии угловых зависимостей при $\theta \rightarrow \pm 180^\circ$ не следует рассматривать, так как они соответствуют точкам наблюдения в плоскости петли в пределах ее контура. Тогда актуальной для зарождения мартенсита является область, характеризуемая максимальными значениями S и δ (при $\delta > 0$) и минимальными значениями η . Из рисунка (Рисунок 5.1) очевидно, что можно ограничиться рассмотрением диапазона углов $90 < \theta < 135^\circ$. Ясно, что примесь внедрения для данного R практически до нуля уменьшает диапазон углов, для которого выполняется условие $\delta > 0$, смещает η_{\min} в сторону меньших углов, и практически не затрагивает область локализации S_{\max} . При этом ориентировка нормалей N_w заметно изменяется: в отсутствие примеси в спектре N_w содержится направление $[3 \ 15 \ 10]_y$ и не содержится направление $[2 \ 9 \ 5]_y$, тогда как при наличии примеси ситуации обратная. Заметим, что в отличие от эволюции N_w поведение нормалей $N \parallel \xi_2 - \xi_1 \sqrt{\varepsilon_1 / |\varepsilon_2|}$ к слабоискаженным плоскостям характеризуется малым изменением ориентировок, включающих в свой спектр ориентировки, близкие к $[295]$ направлению, в обоих случаях. Сказанное иллюстрирует рисунок (Рисунок 5.2), на котором изображены стереопроекции нормалей N_w (1) и N (2) для интервала углов $90 < \theta < 135^\circ$ и расстояниях $R = 200, 400, 600, 800$.

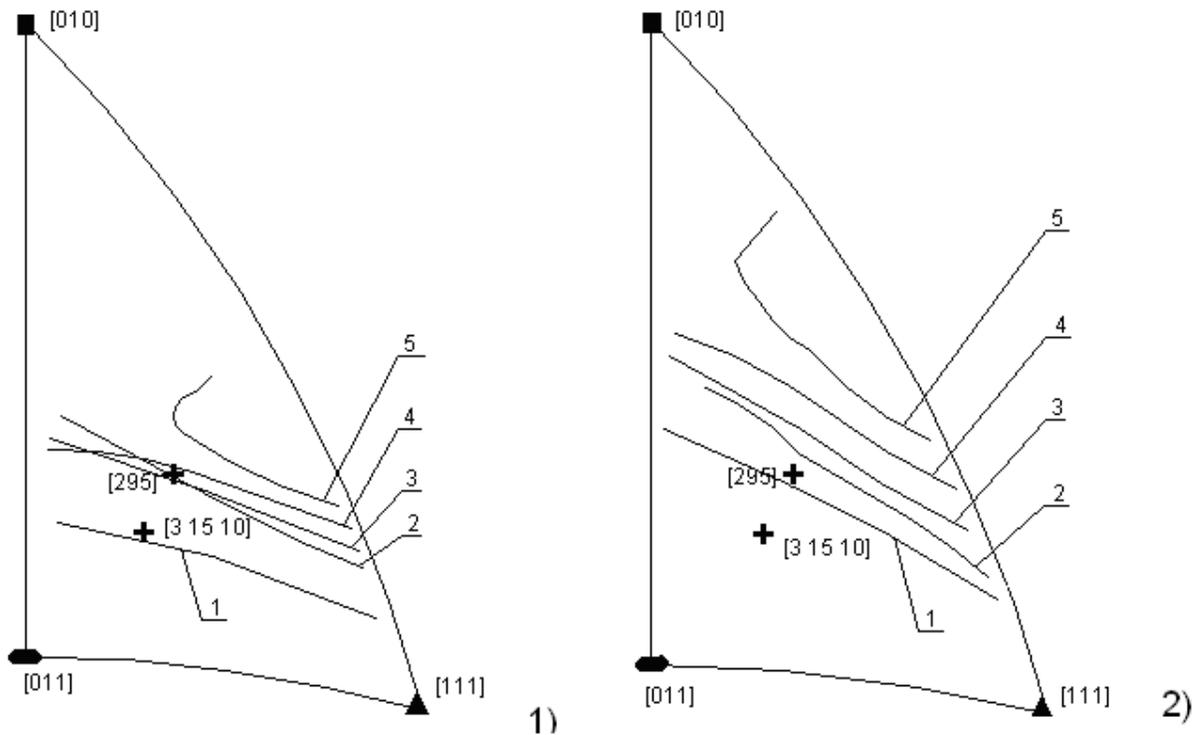


Рисунок 5.2 – Стереопроекции нормалей N_w (1) и N (2): 1 – без примеси для $R=200$; 2-5 – с примесью для $R=200, 400, 600, 800$

Видно, что изменение R от 200 до 600 сохраняет в спектре ориентировок N_w направление $[295]_\gamma$, тогда как из спектра N оно исключается. Это обстоятельство свидетельствует в пользу высказанного ранее утверждения о ведущей роли волнового процесса при формировании прообраза мартенситной пластины в области аустенита, теряющей устойчивость, и, как следствие, в формировании габитуса. Направлению $[295]_\gamma$ в спектре N_w соответствует максимум относительного изменения объема ($\delta > 0$).

Дополнительно укажем, что при увеличении R от 200 до 800 наблюдается небольшое увеличение δ , связанное с более высоким темпом убывания вклада примеси ($\sim |x|^{-3}$) по сравнению с вкладом от дислокационной петли. Таким образом, в качестве оптимального расстояния для зарождения кристаллов мартенсита с габитусами $(295)_\gamma$

вблизи рассматриваемой петли является $R \approx 600$, что в целом согласуется с высказанным ранее предположением. Проведенные расчеты позволяют судить о возможной величине избыточной концентрации примеси внедрения в области дислокации типа «дырка», так как параметр N применительно, например, к системе Fe-C, характеризует именно избыток атомов углерода по сравнению с «фоновой» концентрацией, соответствующей однородному распределению примеси по всему объему.

Разумеется, сделанное предположение о равномерном распределении примеси в плоскости петли является достаточно грубым. Естественным уточнением представляется использование распределения, коррелирующего с объемным эффектом в плоскости петли, создаваемым самой петлей.

Проведенное рассмотрение показывает, что упругое поле примеси существенно сказывается на условиях зарождения мартенситного кристалла, и учет его необходим при отборе дислокационных центров зарождения в сплавах внедрения. В рамках общего подхода [12], позволяющего с помощью анализа макроскопических морфологических признаков реконструировать наиболее существенные аспекты первой стадии мартенситного превращения, учет влияния примеси может дать дополнительную информацию о ее распределении вблизи ДЦЗ.

5.2 Связь различных габитусов с вариантами ориентационных соотношений при γ - α мартенситном превращении в динамической теории

5.2.1. Вводные замечания

Ориентационные соотношения (ОС) между кристаллическими решетками исходной и конечной фаз, являются одним из ярких макроскопических морфологических признаков при реализации

мартенситного превращения (МП), протекающего кооперативным путем (см., например, [1]). В частности, в сплавах на основе железа при ГЦК - ОЦТ (γ - α) МП традиционно выделяют соотношения Курдюмова-Закса (К-З), Нишиямы (Н) и Гренингера-Трояно (Г-Т), которые, в свою очередь, однозначно связаны с такими морфологическими признаками как габитусная плоскость и макросдвиг. Следует отметить, что соотношения К-З, как и Н, базировались на чисто кристаллографической идеализированной сдвиговой схеме, включавшей сдвиг по плотноупакованной плоскости. Поэтому в указанных ОС имеет место строгая параллельность плотноупакованной $\{111\}_\gamma$ -плоскости исходной фазы с плоскостью $\{110\}_\alpha$ α -фазы. Соотношения Г-Т установлены экспериментально и фиксируют отклонение от параллельности плоскостей приблизительно на 1° . Поскольку экспериментально отклонение от параллельности плоскостей обычно регистрируется с погрешностью около 0.5° , допускается, что указанное отклонение (как и отклонение соответственных направлений в плоскостях) обусловлено релаксационными процессами в напряженной системе сосуществующих фаз. Так как и направления, лежащие в плотноупакованной плоскости аустенита, входящие в ОС Г-Т, занимают промежуточное положение между $\langle 110 \rangle_\gamma$ и $\langle 112 \rangle_\gamma$, часто, как само собой разумеющееся, считается, что и соотношение Г-Т является промежуточным, причем «промежуточность» приобретает оттенок некоторой «несамостоятельности». В том смысле, что вообще-то в идеале должны наблюдаться соотношения К-З или Н, но вследствие релаксации возникают отклонения от идеальных ОС. Интересно, что в своей пионерской работе [120] Гренингер и Трояно показали, что разориентировка плоскостей у свежесформованного мартенсита значительно уменьшается после отжига, то есть в процессе релаксации отклонение от параллельности плоскостей не нарастает, а снижается.

5.2.2. Качественная постановка задачи

Необходимо подчеркнуть, что до сравнительно недавнего времени, обсуждение особенностей МП базировалось, в основном, на устоявшейся парадигме квазиравновесного формирования МП, игнорировавшей возможность динамического механизма формирования мартенситного кристалла в сверхзвуковом (по отношению к продольным волнам) режиме. Анализ, выполненный в рамках новой парадигмы [47, 65, 121], акцентирующей внимание на расшифровке динамической структуры переходной области в ходе сверхзвукового роста кристалла мартенсита, продемонстрировал, в частности, что соотношения Г-Т носят самостоятельный характер и совершенно естественно возникают при образовании двойникового мартенсита, причем участвующие в управлении ростом волны непосредственно инициируют процесс деформации Бейна. Более того, переход от чисто кристаллогеометрического рассмотрения [67-70], к динамической теории позволяет указать физические условия реализации соотношений К-3 и Н. А именно, вариант ОС К-3 предполагает, во-первых, возможность возбуждения пары волн в составе управляющего волнового процесса (УВП), обеспечивающих запуск процесса быстрой деформации плотноупакованных плоскостей $\{111\}_\gamma$ аустенита [56, 57]; во вторых, наличие процесса упорядоченной перетасовки испытавших деформацию плоскостей; в третьих, вполне конкретное значение соотношение модулей скоростей распространения пары управляющих волн, зависящее от упругих свойств образца, что позволило наименовать ОС как «материальные ОС» (МОС). Яркой морфологической особенностью реализации подобного механизма (его явным индикатором) является ортогональность плоскости, входящей в ОС, к плоскости габитуса. Впервые подобная особенность в рамках динамического подхода была осознана и рассмотрена на примере ОЦК-ГПУ МП в титане для мартенсита охлаждения [55], а затем и при γ - α МП для мартенсита

деформации [57]. В [47, 57] было отмечено, что близких к идеальным (по параллельности плоскостей, входящих в ОС) соотношений К-3 для мартенсита охлаждения можно ожидать, только если на стадии зарождения симметрия аустенита будет нарушена упругими полями дислокаций с нетипичными для ГЦК ориентациями линий $\Lambda \parallel \langle 111 \rangle_\gamma$. Разумеется, подобное предположение вполне очевидно в случае изотропной среды, где любая краевая дислокация способна инициировать плоскую деформацию в плоскости ортогональной Λ . Не вызывает сомнений и случай анизотропной среды, если Λ совпадает с нормалью к плоскости симметрии кристалла. Но линия $\Lambda \parallel \langle 111 \rangle_\gamma$ – ось симметрии третьего порядка, таковой нормалью не является. Поэтому речь может идти лишь о существовании отдельных направлений, ортогональных к $\Lambda \parallel \langle 111 \rangle_\gamma$, для которых тройка собственных векторов упругого поля тензора деформаций $\hat{\epsilon}$ дислокации с некоторым вектором Бюргерса \mathbf{b} соответствует деформации плоскости $\{111\}_\gamma$. Наибыстрейшая деформация плоскости достигается при деформациях сжатия и растяжения в ортогональных направлениях, лежащих в плоскости. Обозначим, как и в предыдущих работах, собственное направление растяжения символом ξ_1 , а сжатия – ξ_2 . Тогда очевидно, что при ориентации собственного вектора ξ_3 вдоль Λ будет деформироваться исходная плоскость. Для ускорения анализа и наглядности удобно выводить ориентации собственных векторов и габитусов на стереографической проекции. Таким образом, при отыскании векторов $\xi_3 \parallel \Lambda \parallel \langle 111 \rangle_\gamma$ можно будет утверждать, что реализация МОС близких к ОС К-3, в принципе, возможна и в реальных анизотропных кристаллах. Дополнительно еще раз напомним, что ожидаемые габитусы кристаллов мартенсита должны быть параллельны Λ (то есть нормаль к габитусу ортогональна к Λ).

В связи с нетипичной ориентацией $\Lambda \parallel \langle 111 \rangle_\gamma$ для исходных образцов аустенита, не испытывавшего предварительной интенсивной

пластической деформации, габитусов, ортогональных к $\Lambda \parallel \langle 111 \rangle_\gamma$, в случае мартенсита охлаждения обычно не наблюдается. Типичный набор ориентировок габитусов для сплавов разного состава тяготеет к ориентациям вблизи $\{557\}_\gamma$, $\{225\}_\gamma$, $\{259\}_\gamma$, $\{3\ 10\ 15\}_\gamma$ и получает в динамической теории вполне адекватное описание при рассмотрении в качестве дислокационных центров зарождения дислокаций с ориентациями линий $\Lambda \parallel \langle 110 \rangle_\gamma$ и $\Lambda \parallel \langle 112 \rangle_\gamma$. В то же время имеются данные о появлении и других наборов габитусов МК в образцах после значительной деформации. Так например, в работе [122] для сплавов Fe-31.5%Ni и Fe-32%Ni, наряду с габитусами вблизи $\{259\}_\gamma$ (наблюдающимися до деформации образца) появился ряд дополнительных, включая и габитусы, близкие к $\{123\}_\gamma$. Ясно, что нормали к таким габитусам могут быть ортогональны как к типичным линиям $\langle 1\bar{2}1 \rangle_\gamma$, так и к $\langle 11\bar{1} \rangle_\gamma$. В [122] констатируется, что для кристаллов с габитусами $\{123\}_\gamma$ ОС близки к ОС К-3, но, к сожалению, не уточняется, имеют ли кристаллы двойники превращения, какова ориентация плоскости габитуса по отношению к плоскости, входящей в ОС, а также не указана степень разориентации плоскостей, входящих в ОС. Тем не менее, появление новых габитусов указывает на целесообразность проведения анализа примеров упругих полей дислокаций с линиями $\langle 1\bar{2}1 \rangle_\gamma$ и $\langle 11\bar{1} \rangle_\gamma$, причем, учитывая возможность сильного (контактного) взаимодействия дислокаций на стадии, предшествующей пластической деформации, на выбор ориентации эффективного вектора Бюргерса, по существу не накладывается серьезных ограничений. Напомним, что стандартные для ГЦК-кристаллов ориентировки вектора Бюргерса $\mathbf{b} \parallel \langle 110 \rangle_\gamma$.

В данной работе мы ограничимся случаем линии $\langle 11\bar{1} \rangle_\gamma$. Расчеты упругого поля проводятся на основе методики [100], изложенной во второй главе и ее программной реализации, изложенной в третьей главе.

Вначале обсуждается наиболее простой вариант изотропной среды. Затем рассматривается анизотропный случай: в качестве упругих модулей кубического кристалла используется набор данных для сплава Fe-31.5%Ni при температуре M_s , взятый из [123].

5.2.3. Пример упругого поля краевой дислокации с линией $[1\ 1\ 1]_\gamma$ в изотропной среде

Будем полагать, что в ходе интенсивной пластической деформации были реализованы условия для возникновения дислокаций с линиями $\langle 111 \rangle_\gamma$. В частности, как отмечалось в [124], в условиях значительной деформации следует учитывать и двойникование аустенита. Поэтому, наряду с главными плоскостями сдвига $\{111\}_\gamma$, необходимо рассматривать и плоскости, ответственные за боковую огранку пластин двойниковых областей. Например, для кристонной модели сдвига на рисунке (Рисунок 5.3) такими плоскостями являются $\{1\bar{1}0\}_\gamma$.

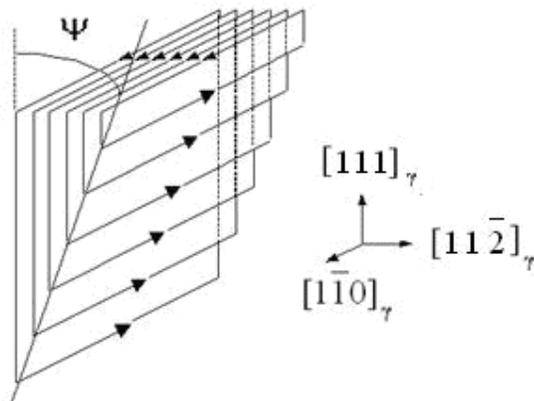


Рисунок 5.3 – Кристонная модель носителя сдвига $[1\bar{1}\bar{2}]_\gamma$ $(111)_\gamma$

Но тогда возникает представительная совокупность Λ ориентаций дислокационных жгутов $\Lambda \parallel \langle 001 \rangle_\gamma, \langle 110 \rangle_\gamma, \langle 111 \rangle_\gamma, \langle 112 \rangle_\gamma$, способных играть как роль дислокационных центров зарождения мартенсита, так и рабочих сегментов ОИФР для генерации кристонов.

В модели изотропной среды, как отмечалось во введении, для анализа варианта реализации ОС К-3 при наиболее быстрой деформации плотноупакованной плоскости, следует рассмотреть случай чисто краевой дислокации. Нами рассматривалось несколько различных краевых ориентаций, в том числе $\mathbf{b} \parallel [1\bar{1}1]_{\gamma}$, $\mathbf{b} \parallel [11\bar{2}]_{\gamma}$, $\mathbf{b} \parallel [1\bar{4}3]_{\gamma}$, $\mathbf{b} \parallel [1\bar{5}4]_{\gamma}$.

Для простоты анализа во всех случаях дислокационная петля выбиралась в форме прямоугольника, одна из сторон которого была параллельна $[111]_{\gamma}$. Система отсчета связывалась с центром линии $\Lambda \parallel [111]_{\gamma}$. Расстояние от центра выбиралось существенно меньше второй стороны петли, так что влияние остальных сторон сказывалось незначительно, и практически результат соответствовал расчету упругого поля отдельной прямолинейной дислокации.

На рисунке (Рисунок 5.4) приведен типичный график зависимости собственных значений ε_i ($i=1,2,3$) тензора деформации упругого поля краевой дислокации с линией $\Lambda \parallel [111]_{\gamma}$ и вектором Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [1\bar{4}3]_{\gamma}$ от угла θ между радиусом вектором и плоскостью петли в цилиндрической системе координат с осью $\mathbf{z} \parallel \Lambda$.

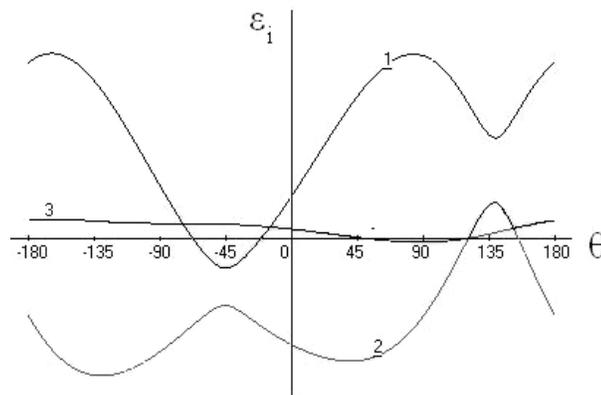


Рисунок 5.4 – Собственные числа ε_i ($i=1,2,3$) тензора $\hat{\varepsilon}$ упругого поля краевой дислокации с линией $\Lambda \parallel [111]_{\gamma}$ и вектором Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [1\bar{4}3]_{\gamma}$ в изотропной среде

Интересно, что углам θ из областей, включающих экстремумы растяжения ($\varepsilon_1 > 0$) и сжатия ($\varepsilon_2 < 0$), отвечают ориентации собственных векторов $\xi_{1,2}$, развернутых на небольшой угол от осей $[11\bar{2}]_\gamma$, и $[1\bar{1}0]_\gamma$, которые в [47, 56, 57] выбирались в качестве осей деформации и направлений волновых нормалей волн $\mathbf{n}_{1,2} = \xi_{1,2}$, входящих в УВП. Для расчета нормали \mathbf{N}_w $\bar{\mathbf{N}}_k$ плоскости габитуса в динамической теории используем формулу (1.2), которую для удобства выпишем еще раз:

$$\mathbf{N}_w \parallel \left(\frac{\mathbf{n}_2}{C_2} - \frac{\mathbf{n}_1}{C_1} \right) \parallel (\mathbf{n}_2 - \varkappa \cdot \mathbf{n}_1), \quad (5.1)$$

где $\mathbf{n}_1 = \frac{C_1}{C_1}$, $\mathbf{n}_2 = \frac{C_2}{C_2}$, $\varkappa = \frac{C_2}{C_1}$.

В (5.1) $C_{1,2}$ – скорости пары продольных (чаще квазипродольных) управляющих волн, вычисляемые в общем случае с помощью уравнения Кристоффеля [125]. Очевидно, что для изотропной среды параметр $\varkappa = 1$.

В качестве критериев отбора выбираются: близость нормали \mathbf{N}_w какому-либо из вариантов семейства ориентировок $\langle 123 \rangle_\gamma$; положительность удельного изменения объема (в упругой области – это практически след тензора деформаций); близость собственного вектора ξ_1 к направлению, коллинеарному оси $[1\bar{1}0]_\gamma$ (соответственно, собственный вектор ξ_2 будет близок к направлению, коллинеарному оси $[11\bar{2}]_\gamma$) и сопоставимость величин обеих деформаций по величине (чтобы обеспечить наиболее быстрое преобразование плотноупакованной плоскости).

Проиллюстрируем сказанное. Выберем, для определенности, направление еще одной стороны дислокационной петли, коллинеарным направлением $[1\bar{1}0]_\gamma$. Зададим размеры сторон петли $L_1 = 7000a$ и $L_2 = 10000a$, где a – параметр решетки. Тогда на расстоянии $1200a$ от центра стороны линии $[111]$ перечисленным критериям отбора удовлетворяет

упругое поле при $\theta=49^\circ$. Теперь, подставляя в (5.1) для угла $\theta=49^\circ$ из области максимума деформации растяжения $\xi_1=[-0.676513 \ 0.734170 \ -0.057659]_\gamma$, $\xi_2=[0.457162 \ 0.357296 \ -0.814458]_\gamma$, находим $N_w \parallel [0.801723 \ -0.267011 \ -0.534723]_\gamma$, что практически совпадает с $[3\bar{1}\bar{2}]_\gamma$. Заметим, что оси ξ_1 и ξ_2 развернуты на угол $\approx 4^\circ$ относительно осей $[1\bar{1}0]_\gamma$ и $[11\bar{2}]_\gamma$ соответственно (совпадению с направлениями осей отвечает $\theta=45^\circ$ и нулевое изменение удельного объема).

Аналогичное описание легко выполняется и для других ориентаций векторов Бюргера краевой ориентации.

5.2.4. Упругое поле дислокации с линией $[1\ 1\ 1]_\gamma$ в ГЦК решетке

Анализ упругого поля в анизотропной среде проведем, используя набор упругих модулей (в ТПа) для сплава Fe-31%Ni принимая, согласно [123], $C_L = 0.218$, $C' = 0.027$, $C_{44} = 0.112$.

5.2.4.1. Краевая дислокация с вектором Бюргера $b \parallel [1\bar{4}3]_\gamma$

Сохраним для начала те же, что и выше, конфигурацию дислокационной петли, выбор расчетной точки и вектор Бюргера. Однако теперь при поиске возможности описания ОС К-3 в анизотропной среде на первый план выступает установление значений углов θ , при которых ориентация собственного вектора $\xi_3 \parallel \Lambda \parallel [111]_\gamma$. На рисунке (Рисунок 5.5) показана стереографическая проекция ориентаций векторов ξ_3 во всем диапазоне изменения углов θ от -180° до 180° . Ориентация проекции стандартная (ось $[001]_\gamma$ ортогональна плоскости рисунка).

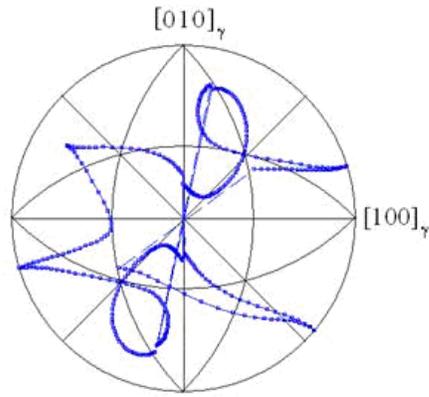


Рисунок 5.5 – Ориентации векторов ξ_3 тензора деформации упругого поля краевой дислокации с линией $\Lambda \parallel [111]_\gamma$ и вектором Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [1\bar{4}3]_\gamma$ в анизотропной среде

По «траектории» вектора ξ_3 видно, что близость с полюсом $[111]_\gamma$ имеет место не менее, чем для четырех углов θ_j , поскольку явно наблюдается две петли «траектории», практически включающие полюс $[111]_\gamma$ (нижняя петля в действительности включает полюс $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_\gamma$, а не $[\bar{1}\bar{1}1]_\gamma$).

Как показывает расчет, значения θ_j близки к -180° , -120° , 0° , 60° , 180° . Однако при выбранном векторе Бюргерса для указанных θ_j , рассчитанные с помощью (5.1), нормали близки либо к $[1\bar{1}0]_\gamma$ (для $\theta_j = -180^\circ$, 0° , 180°), либо к $[2\bar{1}\bar{1}]_\gamma$ (для $\theta_j = -120^\circ$, 60°), то есть далеки от нормалей, тяготеющих к семейству $\langle 123 \rangle_\gamma$. Естественно и ориентации векторов $\xi_{1,2}$ далеки от осей $[11\bar{2}]_\gamma$, и $[1\bar{1}0]_\gamma$. Из рисунка (Рисунок 5.6) видно, что указанным θ_j не отвечают максимумы значений $\varepsilon_i(\theta)$, $i=1,2,3$.

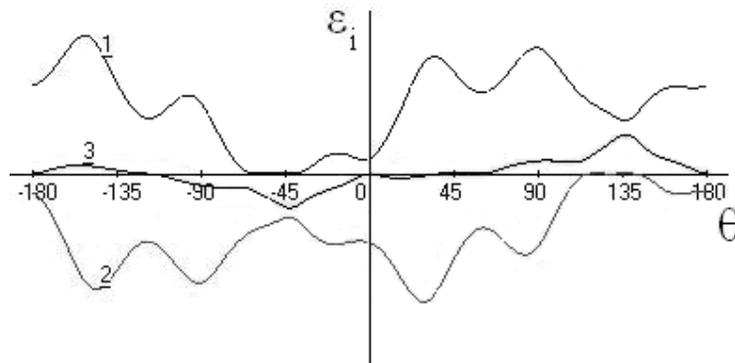


Рисунок 5.6 – Собственные числа $\varepsilon_i(\theta)$ ($i=1,2,3$) тензора $\hat{\varepsilon}$ упругого поля краевой дислокации с линией $\Lambda \parallel [111]_\gamma$ и вектором Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [1\bar{4}3]_\gamma$ в анизотропной среде

Следует, однако, учитывать, что для указанных значений θ_j обращается в нуль деформация ε_3 , тогда как максимальным по величине растяжениям и сжатиям соответствуют заметные значения ε_3 . Поскольку указанное обстоятельство существенно при формировании габитусных плоскостей как слабоискаженных (в пределе – инвариантных) плоскостей, требование экстремальности значений $\varepsilon_{1,2}$ становится условным критерием отбора. В то же время ясно, что имеющийся в угловом интервале от 60° до 180° (при положительном изменении относительного объема) переход от габитуса $(2\bar{1}\bar{1})_\gamma$ к габитусу $(1\bar{1}0)_\gamma$ включает в качестве промежуточной и ориентацию $(3\bar{2}\bar{1})_\gamma$. Очевидно, что, переходя от чисто краевых к смешанным дислокациям, можно ожидать для некоторых векторов Бюргерса наличия спектра углов θ_j , для которых одновременно будут выполняться условия близости ориентаций ξ_3 с полюсом $[111]_\gamma$, $\xi_{1,2}$ с осями $[11\bar{2}]_\gamma$, и $[1\bar{1}0]_\gamma$, а нормалей \mathbf{N}_w – с соответствующими ориентировками из совокупности $\langle 123 \rangle_\gamma$.

Это легко проверить, выполняя аналогичные расчеты при систематически изменяемом вкладе винтовой компоненты в ориентации векторов Бюргерса. Например, добавляя к вектору $[1\bar{4}3]_\gamma$ векторы кратные

$\pm[111]_\gamma$, получим в качестве пробных направлений $\mathbf{b} \parallel [2\bar{3}4]_\gamma$, $[3\bar{2}5]_\gamma$, $[4\bar{1}6]_\gamma$, $[507]_\gamma$ и $[0\bar{5}2]_\gamma$, $[\bar{1}\bar{6}1]_\gamma$, $[\bar{2}\bar{7}0]_\gamma$. В частности, две последние ориентации относительно близки к оси $[0\bar{1}0]_\gamma$.

5.2.4.2. Смешанная дислокация с вектором Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [0\bar{1}0]_\gamma$

Для иллюстрации на рисунке (Рисунок 5.7) приведены угловые зависимости собственных чисел ε_i для $\mathbf{b} \parallel [0\bar{1}0]_\gamma$ на расстоянии $1200a$ от центра линии $[111]_\gamma$ с длиной порядка 10^5a (ширина дислокационной петли также выбиралась порядка 10^5a).

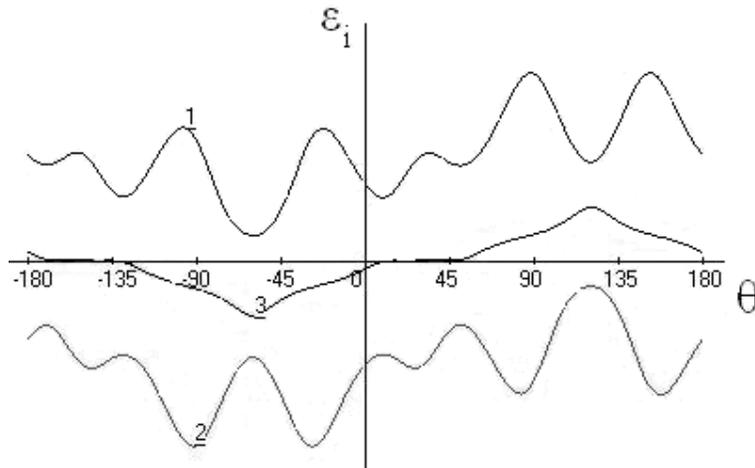


Рисунок 5.7 – Собственные числа $\varepsilon_i(\theta)$ ($i=1,2,3$) тензора $\hat{\varepsilon}$ упругого поля смешанной дислокации с линией $\Lambda \parallel [111]_\gamma$ и вектором Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [0\bar{1}0]_\gamma$ в анизотропной среде

На рисунке (Рисунок 5.8) приведена стереопроекция угловой зависимости вектора ξ_3 . Сравнение рисунков (Рисунок 5.8 и Рисунок 5.5) показывает, что на рисунке (Рисунок 5.8) также имеются петли «траекторий» вектора ξ_3 , содержащие направления, близкие к $[111]_\gamma$. Этим направлениям соответствуют углы θ_j , близкие к -165° и 45° . Из рисунка (Рисунок 5.7) видно, что этим углам, как и на рисунке (Рисунок 5.4), соответствуют практически нулевые значения деформаций ε_3 , тогда

как область с максимальными значениями ε_1 и ε_2 не обладает плоской деформацией.

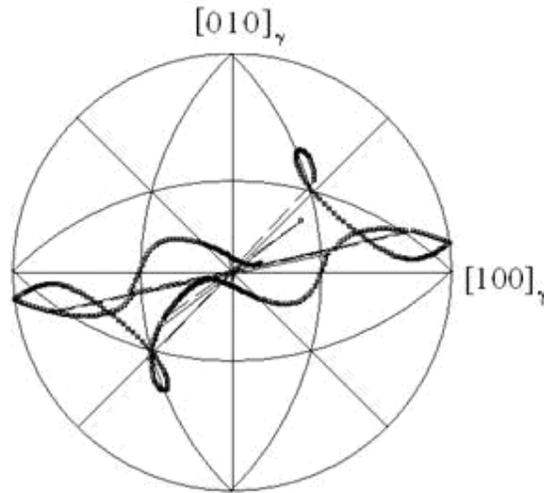


Рисунок 5.8 – Ориентации векторов ξ_3 тензора деформации упругого поля смешанной дислокации с линией $\Lambda \parallel [111]_\gamma$ и вектором Бюргера $\mathbf{b} \parallel [0\bar{1}0]_\gamma$ в анизотропной среде

Приведем расчетные данные для единичных собственных векторов и нормалей к габитусным плоскостям. При $\theta_1 = -165^\circ$ имеем:

$$\begin{aligned}\xi_1 &= [0.002056 \quad 0.713694 \quad -0.700455]_\gamma, \\ \xi_2 &= [0.811189 \quad -0.410804 \quad -0.416188]_\gamma, \\ \xi_3 &= [0.584781 \quad 0.567345 \quad 0.579785]_\gamma, \\ \mathbf{N}_w &\parallel [0.571787 \quad -0.795273 \quad 0.201495]_\gamma\end{aligned}\tag{5.2}$$

Легко убедиться, что ξ_3 составляет с $[111]_\gamma$ угол $\approx 0.73^\circ$, а нормаль близка в приближении сравнительно небольших целочисленных индексов к ориентировке $[8\bar{1}13]_\gamma$ и составляет с $[2\bar{3}1]_\gamma$ угол $\approx 4.34^\circ$. Соответственно с ожидаемой, согласно [47, 56], ориентацией $[13\bar{1}85]_\gamma$ нормаль \mathbf{N}_w составляет угол $\approx 1.07^\circ$, и это естественно, так как ориентации векторов ξ_1 и ξ_2 почти совпадают с выбиравшимися в [47, 56] направлениями волновых нормалей управляющих волн вдоль осей $[01\bar{1}]_\gamma$ и $[\bar{2}11]_\gamma$.

Аналогично при $\theta_2 = 45^\circ$ имеем:

$$\begin{aligned}\xi_1 &= [-0.703693 \quad 0.710496 \quad -0.003494]_\gamma, \\ \xi_2 &= [0.408042 \quad 0.400099 \quad -0.820623]_\gamma, \\ \xi_3 &= [-0.581651 \quad 0.578892 \quad 0.571459]_\gamma, \\ \mathbf{N}_w &\parallel [0.786151 \quad -0.219618 \quad -0.577698]_\gamma\end{aligned}\tag{5.3}$$

Легко убедиться, что ξ_3 составляет с $[111]_\gamma$ угол $\approx 0.43^\circ$, а нормаль близка к ориентировке $[11\bar{3}\bar{8}]_\gamma$ и составляет с $[3\bar{1}\bar{2}]_\gamma$ угол $\approx 3.79^\circ$. Соответственно с ожидаемой, согласно [47, 56], ориентацией $[18\bar{5}\bar{13}]_\gamma$ нормаль \mathbf{N}_w составляет угол $\approx 0.46^\circ$, поскольку ориентации векторов ξ_1 и ξ_2 еще ближе к направлениям осей $[\bar{1}10]_\gamma$ и $[11\bar{2}]_\gamma$, чем в предыдущем случае.

Разумеется, при дальнейшем увеличении вклада винтовой компоненты в ориентацию вектора Бюргера условие близости направления ξ_3 к направлению $[111]_\gamma$ перестает выполняться, так что в реальных (анизотропных) кристаллах указанное условие выполняется для некоторого спектра ориентировок \mathbf{b} , не включающего предельные случаи чисто краевых и винтовых ориентаций.

5.2.5. Заключительные замечания

Как показано в [57], при совпадении ориентаций ξ_1 и ξ_2 с ориентациями $[\bar{1}10]_\gamma$ и $[11\bar{2}]_\gamma$ имеют место МОС для направлений, входящих в ОС К-3, причем разориентировка составляет около 0.5° . Таким образом, и в случае анизотропного кристалла возможно выполнение МОС близких к ОС К-3, связанных с механизмом наиболее быстрой трансформации плотноупакованных плоскостей исходной ГЦК фазы, обусловленным УВП. Подчеркнем, что, в отличие от случая, когда перестраиваемая в волновом режиме плоскость является

плоскостью симметрии, на точную параллельность плоскостей, входящих в ОС, в случае перестройки плоскостей $\{111\}_\gamma$ в ходе прямого γ - α МП не следует рассчитывать. Следовательно, разориентировки (в пределах градуса) плоскостей, входящих в ОС, должны быть типичными. Интересно, что при α - γ МП в случае механизма наиболее быстрой перестройки плоскостей $\{110\}_\alpha$, являющихся плоскостями симметрии, точная параллельность плоскостей, входящих в МОС, может быть не исключением, а правилом. Кроме того, еще раз напомним, что для механизма МП, связанного с наиболее быстрой перестройкой плоскостей некоторого семейства исходной фазы, перестраиваемая плоскость, входящая в ОС, должна быть практически ортогональной к габитусу возникающего мартенситного кристалла. Если же механизм МП связан, главным образом, со стимуляцией и развитием деформации Бейна, как это имеет место при формировании двойникового тонкопластинчатого мартенсита [47], то в ОС входит плоскость, составляющая с габитусом наименьший угол. Именно по этому критерию, в первую очередь, можно осуществить отбор между волновыми механизмами формирования кристаллов мартенсита с близкими типами габитусов. В частности, как отмечалось во введении, формирование кристаллов с габитусами, близкими к $\{123\}_\gamma$, может инициироваться упругими полями дислокаций с линиями $\langle 1\bar{2}1 \rangle_\gamma$, и в этом случае механизм МП не будет связан с наиболее быстрой трансформацией плотноупакованных плоскостей аустенита.

При интерпретации вариантов дислокационных центров зарождения мартенсита охлаждения, возникших после предварительной интенсивной пластической деформации, представляет интерес также расчет упругих полей, создаваемых ансамблями дислокационных петель, подобных, например, конфигурации, приведенной на рисунке (Рисунок 5.3). В связи с этим представленные здесь результаты следует рассматривать в

качестве первого предварительного этапа расчета, сводящего реальный источник упругого поля фактически к полю отдельной дислокации.

Проведенные к настоящему времени исследования свидетельствуют в пользу реализации трех вариантов [47] быстрого (в волновом режиме) формирования мартенситных кристаллов, находящих адекватное отражение в различиях макроскопических морфологических признаков.

Результаты анализа [58] показывают, что ОС Нишиямы могут реализоваться при γ - α мартенситном превращении для кристаллов с габитусами вида $\{hh\ell\}_\gamma$ в случае наибоьстрейшей перестройки $\{110\}_\gamma$ плоскостей, когда роль ДЦЗ выполняют сегменты $\langle 110 \rangle_\gamma$, причем в роли исходных (латентных) МОС выступают ОС, в которые входит плоскость, испытавшая наибоьстрейшую перестройку.

5.3 Два сценария формирования бимодального состава субреек в макропластине бейнитного феррита в динамической теории

5.3.1. Вводные замечания

Бейнит в сталях – продукт превращения переохлажденного аустенита при температурах, когда практически подавлена самодиффузия железа, но еще весьма значима диффузия углерода. Бейнит образуется в форме кластеров ферритных кристаллов пластинчатой или реечной формы с прослойками цементита и остаточного аустенита. Кристаллы бейнитного феррита, могут, в свою очередь, состоять из более мелких субкристаллов. Ниже, в основном, будут рассматриваться стали со сравнительно низкими концентрациями углерода (до 0.6 массового %), в которых в результате бейнитного превращения образуется смесь относительно мелких реек, включающих мелкие частицы карбидов (нижний или низкотемпературный бейнит). Напомним, для сравнения, что верхний или высокотемпературный бейнит состоит из относительно

крупных реек феррита, чередующихся с прослойками карбида железа. Реечная составляющая нижнего бейнита имеет черты подобия с рейками пакетного мартенсита, образующегося при закалке аустенита до более низких температур, при которых практически подавлена и диффузия углерода (более подробное освещение вопроса о бейнитном и мартенситном превращении (МП) можно найти, например, в [1, 4, 126, 127]).

С позиций теории твердых растворов, мартенсит – это пересыщенный углеродом феррит с той же концентрацией углерода, что и в аустените, причем степень пересыщения заведомо превышает таковую для бейнитного феррита (пересыщения в феррите может и не быть). Говоря о морфологических признаках реечных компонент бейнита и мартенсита, следует отметить, что в обоих случаях, имеет место стандартный набор однозначно связанных между собой морфологических признаков, что указывает на кооперативность бейнитного превращения.

Будем полагать, что формирование реечных компонент бейнита происходит в областях аустенита, предварительно обедненных углеродом [126]. Тогда химический состав стали указанных областей соответствует более высокой температуре начала мартенситного превращения $M_s(c_b)$ по сравнению с температурой $M_s(c_a)$ исходного аустенита с равномерным распределением углерода по объему образца: $c_b < c_m = c_a$, где c_b , c_m , c_a – концентрации углерода в рейках бейнита, мартенсита и исходном аустените, соответственно. При быстром бездиффузионном росте субреек нижнего бейнита вполне возможно включение мелких фракций карбида внутри ферритных пластин. Как и в случае формирования пакетного мартенсита [128], при визуальной фиксации скорость роста макропластин бейнитного феррита представляется сравнительно медленной. Скорее всего, однако, рост отдельных реек идет со сверхзвуковой скоростью в соответствии с двухволновой схемой управления ростом МК [50, 65, 66,

121], а при длительных (по сравнению со временем быстрого скачкообразного роста) паузах подготовливаются новые места для образования карбидов [129].

Следует отметить, однако, и существование различий между пакетным (реечным) мартенситом и бейнитным ферритом, рейки которого могут формировать макропластины. В пределах одного пакета, согласно [128], все ГП близки к $\{557\}_\gamma$, тогда как в макропластине бейнитного феррита (при исходном низкоуглеродистом аустените) имеются, согласно [127], субрейки с двумя различными ГП. Одна из ориентаций ГП $\{558\}_\gamma$ близка к мартенситной. Вторая же ГП, согласно [130], близка к $\{0.663\ 0.649\ 0.373\}_\gamma$, что приближенно соответствует $\{774\}_\gamma$.

Основную роль, как показано в [131], на начальной стадии формирования кристаллов пакетного мартенсита играют сегменты Λ дислокационных петель вдоль наиболее плотноупакованных направлений $\langle 110 \rangle_\gamma$, причем отбираются направления $\xi_{1,2}$, близкие к ортогональным осям четвертого и второго порядка, отвечающие области с экстремальными значениями деформаций, в которых в наибольшей степени снижены пороги для флуктуации, ведущей к возникновению возбужденного состояния. Как показывают тщательные измерения [132], ОС для реечного мартенсита тяготеют к соотношениям Нишиямы, что находит естественное объяснение в рамках динамического подхода [58]. Габитусные плоскости реек близки к $\{\tilde{5}57\}_\gamma$, где условно символом «тильда» отмечен больший из двух близких индексов Миллера. Точное совпадение пары индексов Миллера при волновом описании габитусной плоскости достигается при краевой ориентации вектора Бюргерса по отношению к линии дислокации $\langle 110 \rangle_\gamma$. Однако для смешанной (60° - дислокации) естественно получаются отличающиеся, но близкие значения пары индексов габитусных плоскостей. Это приводит, как показано в [12, 121], к снятию вырождения ориентировок, что соответствует наиболее

типичной наблюдаемой картине [128], при которой каждому пакету соответствует до шести ориентировок морфологических признаков (в частности, каждой ориентировке нормали к габитусной плоскости отвечает конкретный треугольник на стереопроекции).

При речной форме кристалла мартенсита стадия быстрого роста задает ширину кристалла, толщина которого меньше (но того же порядка) половин длин волн в составе УВП, ответственных за описание габитусных плоскостей. Рейки пакетного мартенсита формируются в сравнительно высокотемпературном диапазоне (по отношению к условиям образования пластинчатого мартенсита). Поэтому, из-за сильного затухания фононов, выполнение режима генерации управляющих волн неравновесными электронами (в межфазной области на стадии роста) не достигается. В результате, в случае речных кристаллов надпороговый режим роста реализуется за счет начальных амплитуд колебаний и срывается, как только амплитуды волн падают ниже пороговых значений. Поэтому вполне типична картина, когда ширина рейки всего в несколько раз превышает ее толщину.

Основная цель раздела 5.3 – прояснить возможные физические механизмы реализации бимодального строения макропластин бейнитного феррита в русле динамической теории.

5.3.2. Дополнительные характеристики морфологии бейнитного речного феррита и качественная постановка задачи

Как показано в [130], для субреек с габитусом $(0.373\ 0.663\ 0.649)_\gamma$ характерны ОС, близкие к соотношению Нишиямы: $(111)_\gamma$ почти параллельна $(011)_\alpha$ и $[\bar{1}01]_\gamma$ составляет 4° с $[\bar{1}\bar{1}1]_\alpha$. Измерена и величина 0.22 макросдвига в направлении $\langle 110 \rangle_\gamma$, на семь градусов отклоняющегося от $\langle 111 \rangle_\alpha$. Необходимо подчеркнуть, что эта величина существенно превышает типичную для реек величину макросдвига. Кроме

того, в [130] отмечается появление большого числа двойников аустенита, сопровождающих формирование бейнитного феррита.

Для объяснения наблюдаемых морфологических признаков полезно рассмотреть, как минимум, два сценария, полагая, что рост макропластины носит эстафетный характер, при котором предшествующий кристаллик инициирует условия для старта роста нового. Естественно полагать, что ведущую роль играют пластинки с габитусами типа $\{558\}_\gamma$, связанные со стандартными ДЦЗ, имеющими сегменты петель $\Lambda \parallel \langle 110 \rangle_\gamma$. Поэтому для удобства закрепим за ними условно название рейка, а за второй компонентой бимодальной композиции – название субрейка.

Учитывая, что в ходе превращения удельный объем возрастает, сценарий I можно сопоставить с изменением упругого поля ДЦЗ за счет наложения одноосного поля сжатия вдоль одного из направлений, совпадающих с направлением нормали $\langle 558 \rangle_\gamma$ к габитусной плоскости.

Наличие двойников исходной фазы дает основание для проверки предположения о возможной близости (или даже тождественности) ориентаций обоих габитусов субреек, но по отношению к кристаллографическим базисам, относящимся к двум двойниковым ориентациям аустенита (сценарий II).

В принципе, роль новых ДЦЗ могут выполнять границы двойников, представляемые, например, в кристонной модели носителя двойнивающего сдвига суперпозициями призматических петель (Рисунок 5.3 в п.5.2). В этом разделе их упругие поля, не обсуждаются (см. следующий п.5.4).

Уместно напомнить [40] (см. также п.4.5), что при макросдвиге, сопровождающем появление рейки, можно ожидать рождения ДЦЗ,

инициирующего формирования рейки с тем же габитусом, что и исходная рейка. Так что для эстафетного продольного роста макропластины бейнитного феррита бимодальная композиция из реек и субреек не является обязательной. В связи с этим вполне возможно, что бимодальность композиции обуславливает процесс утолщения макропластины.

5.3.3. О выборе ориентации векторов \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 при описании габитусов (hhl)

Для качественной иллюстрации достаточно рассмотреть случай изотропной среды, когда отношение скоростей в (5.1) $\varkappa = 1$, две пары ориентаций \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 . Полагаем вначале, что $\mathbf{n}_1 = [110]_\gamma / \sqrt{2}$ и $\mathbf{n}_2 = [001]_\gamma$, т.е. волновые нормали ориентированы строго вдоль осей симметрии второго и четвертого порядка. Тогда $\mathbf{N}_w \parallel [11 \pm \sqrt{2}]_\gamma$, то есть нормали \mathbf{N}_w близки к ориентациям $[5 \ 5 \ \pm 7]_\gamma$, типичным для габитусов реечного (пакетного) мартенсита низкоуглеродистых сталей, причем обе нормали соответствуют одинаковому (по модулю) отношению индексов Миллера $h/\ell < 1$. Однако ситуация меняется при отклонении \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 от указанных осей симметрии. Например, при $\mathbf{n}_1 = [111]_\gamma / \sqrt{3}$ и $\mathbf{n}_2 = [11\bar{2}]_\gamma / \sqrt{6}$ получаем, во-первых, ориентацию $\mathbf{N}_{w1} \parallel [\sqrt{2} + 1 \ \sqrt{2} + 1 \ \sqrt{2} - 2]_\gamma$, близкую к $[44\bar{1}]_\gamma$, с отношением индексов $h/\ell \approx 4 > 1$ и, во-вторых, $\mathbf{N}_{w2} \parallel [\sqrt{2} - 1 \ \sqrt{2} - 1 \ \sqrt{2} + - 2]_\gamma$, близкую к $[2 \ 2 \ 17]_\gamma$ с отношением $h/\ell \approx 0.12 < 1$. Значит, при повороте осей \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 снимается «вырождение» для значений отношения h/ℓ .

В том же приближении изотропной среды легко описать любые ориентации (hhl) , выбирая $\mathbf{n}_{1,2}$ в виде $\mathbf{n}_1 \parallel [11\eta]_\gamma$ и $\mathbf{n}_2 \parallel [\eta\eta\bar{2}]_\gamma$ при $0 < \eta < 1$. Тогда

$$(h/l)_1 = \frac{\sqrt{2} - \eta}{\eta\sqrt{2} + 2}, \quad (h/l)_2 = \frac{\sqrt{2} + \eta}{\eta\sqrt{2} - 2} \quad (5.4)$$

В таблице (Таблица 5.1) приведены значения параметра η и углов φ поворота \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 от осей симметрии второго и четвертого порядка для ряда упоминаемых в литературе габитусов для случая $(h/l)_1 < 1$.

Таблица 5.1 – Примеры значений η и φ для описания габитусов при $(h/l)_1 < 1$

Габитусы	Параметр η	Угол φ
(557)	≈ 0	≈ 0
(223)	≈ 0.0416	$\approx 1.686^\circ$
(558)	≈ 0.087	$\approx 3.53^\circ$
(335)	≈ 0.116	$\approx 4.68^\circ$
(447)	≈ 0.150	$\approx 6.05^\circ$

Из данных таблицы (Таблица 5.1) видно, что для описания габитусов реек при $(h/l)_1 < 1$ требуются небольшие отклонения от осей $[110]_\gamma$ и $[001]_\gamma$, т.е. все эти габитусы, как и габитус $(557)_\gamma$ мартенсита, могут формироваться при распространении УВП, стимулирующего сжатие вдоль оси $[001]$ и растяжение вдоль $[110]_\gamma$.

Напротив, для описания габитусов субреек при $(h/l)_2 > 1$ необходимы заметно большие углы поворота. Пренебрегая различием пары индексов, учтем, что в приближении малых целочисленных индексов габитус $(0.373 \ 0.663 \ 0.649)_\gamma$ занимает промежуточное положение между $(477)_\gamma$ и $(599)_\gamma$. Для габитуса $(77\bar{4})_\gamma$ из (5.4) имеем $\eta \approx 0.6$ и $\varphi \approx 23^\circ$, а для $(99\bar{5})_\gamma$ – $\eta \approx 0.615$ и $\varphi \approx 23.5^\circ$. Заметим, что при $\eta \approx 0.6$ из (5.4) следует $(h/l)_1 \approx 0.29$, т. е. габитус близкий $(227)_\gamma$, ортогональный к $(77\bar{4})_\gamma$, как и должно быть, поскольку сумма ортогональных единичных векторов и их разность ортогональны друг другу. Вообще для выполнения условия $h/l = (h/l)_2 \approx 7/4$ нужно, чтобы параметр

$$\eta = \frac{2 - \sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} \approx 0.24 \quad (5.5)$$

Из проведенного анализа видно, что фазе сжатия с выделением главной бейновской оси отвечает ориентация наименьшего индекса ℓ габитуса при $h/\ell > 1$.

Разумеется, эти результаты корректируются при учете отличия параметра \varkappa от 1:

$$(h/l)_1 = \frac{\varkappa \cdot \sqrt{2} - \eta}{\eta \cdot \varkappa \cdot \sqrt{2} + 2}, \quad (h/l)_2 = \frac{\varkappa \cdot \sqrt{2} + \eta}{\eta \cdot \varkappa \cdot \sqrt{2} - 2} \quad (5.6)$$

Величина \varkappa при известных \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 и упругих модулях находится с использованием уравнения Кристоффеля [125].

Рассмотрим теперь возможные объяснения больших углов поворота \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 от осей симметрии.

5.3.4. Сценарий I

Сценарий I представляет собой качественную модель формирования симбиоза реек и слоистой структуры из субреек, чередующихся с остаточным аустенитом. Полагаем, что вдоль нормали к поверхности рейки ориентирована ось сжатия для прилегающего аустенита. Такое напряжение, налагаясь на упругие поля модифицированных ДЦЗ, должно менять ориентации собственных векторов результирующего упругого поля и способствовать возникновению таких субреек (фактически кристаллов мартенсита напряжения), для которых максимально оптимизируются условия возникновения НВС. С учетом того, что при записи габитуса субрейки направлению сжатия соответствует позиция наименьшего индекса (тогда как для габитуса рейки – позиция наибольшего), можно ожидать, что при габитусе рейки $(558)_\gamma$ будут возникать субрейки мартенсита напряжения с наименьшим индексом на третьей позиции, например, вида $(774)_\gamma$ или $(\overline{774})_\gamma$. Подобная ориентация не противоречит наблюдаемой морфологии с явно остроугольными

сочленениями субреек и реек (см. Рисунок 5.9, взятый как фрагмент рисунка в [127]).

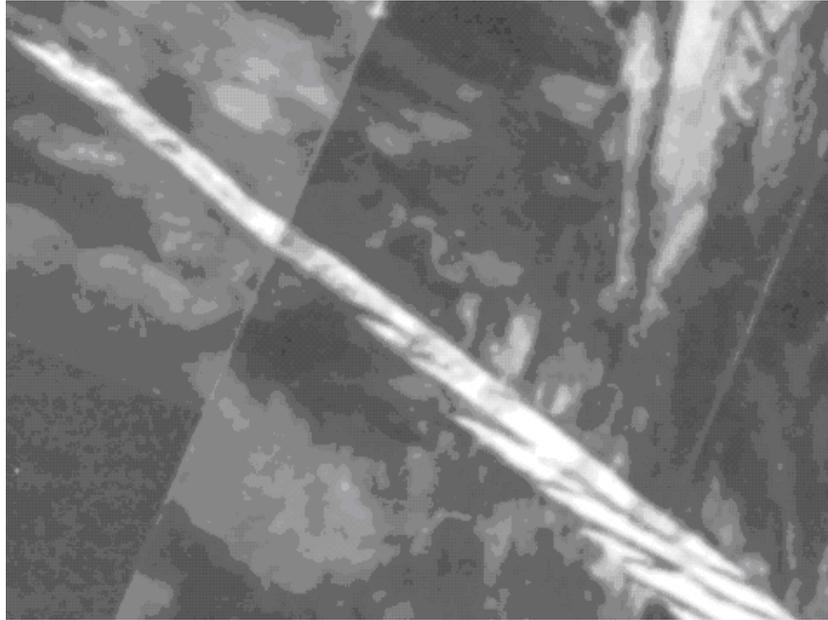


Рисунок 5.9 – Бимодальный состав субреек пластины бейнитного феррита – фрагмент рисунка 2.3 из [127]

Пояснения удобно начать с рассмотрения простого случая наложения двух одноосных деформаций сжатия с одним и тем же значением ε . Очевидно, что тензор деформации $\hat{\varepsilon}$ записывается в виде суммы двух диад

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon(\zeta \cdot \zeta + \zeta_2 \cdot \zeta_2), \quad |\zeta| = 1, \quad |\zeta_2| = 1 \quad (5.7)$$

где ζ, ζ_2 – единичные векторы вдоль осей деформации, в общем случае не ортогональные друг к другу. Легко убедиться, что собственные числа $\varepsilon_{1,2}$ и векторы $\xi_{1,2}$ тензора (5.7) даются выражениями:

$$\varepsilon_{1,2} = \varepsilon[1 \pm (\zeta, \zeta_2)], \quad \xi_{1,2} = [\zeta \pm \zeta_2] / \sqrt{2}, \quad (5.8)$$

где (ζ, ζ_2) – скалярное произведение. Тогда, например, при $\zeta_2 = [001]$ и $\zeta = [558] / \sqrt{114}$ из (5.8) находим

$$\xi_1 \parallel [5\ 5\ 8 + \sqrt{114}] \approx [5\ 5\ 18.68] \approx [5\ 5\ 19] \quad (5.9)$$

Направление, заданное (5.9), составляет с осью [001] угол $\varphi \approx 20.74^\circ$, который близок к найденному ранее углу поворота $\varphi \approx 23^\circ$. Эта простейшая оценка показывает, что, при сопоставимых по величине деформациях сжатия поля ДЦЗ и рейки вдоль нормали $[558]_\gamma$ к габитусу, в некоторой локальной области имеются условия для возникновения начального возбужденного состояния (НВС) второго типа НВС2, необходимого для роста субрейки.

Рассмотрим теперь более реалистичный (применительно к формированию субреечного кристалла бейнитного феррита) случай, соответствующий наложению одноосного сжатия, по-прежнему задаваемого диадой $\varepsilon(\zeta \cdot \zeta)$, где ось ζ лежит в плоскости ортогональных собственных единичных векторов ξ_1 и ξ_2 упругого поля дислокации, так что результирующий тензор имеет вид

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon(\zeta \cdot \zeta) + \varepsilon_1(\xi_1 \cdot \xi_1) + \varepsilon_2(\xi_2 \cdot \xi_2), \quad \varepsilon_1 > 0, \quad \varepsilon_2 < 0, \quad \varepsilon < 0, \quad (5.10)$$

Ясно, что собственные векторы $(\xi_{1,2})'$ тензора (5.10) являются линейными комбинациями векторов ξ_1 и ξ_2 . Полагая $(\xi)' \parallel g\xi_1 + \xi_2$ и подставляя $(\xi)'$ в (5.10), находим квадратное уравнение для параметра g :

$$g^2 + \{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 + \varepsilon[(\zeta, \zeta)^2 - (\xi, \xi_1)^2]) / \varepsilon(\xi, \xi_2)(\xi, \xi_1)\}g - 1 = 0 \quad (5.11)$$

Выбираем для иллюстрации вариант $\varepsilon_1 = 0.65 |\varepsilon_2|$, что примерно соответствует соотношению главных бейновских деформаций. Тогда при $\xi_1 = [110]/\sqrt{2}$, $\xi_2 = [001]$, $\zeta = [558]/\sqrt{114}$ и $\varepsilon = 2 \cdot \varepsilon_2$ с помощью (5.11) легко получаем $g_1 \approx 0.4278$. В результате, собственные векторы $(\xi_{1,2})'$ тензора (5.10) оказываются повернутыми по отношению к ξ_1 и ξ_2 на угол $\varphi \approx 23.16^\circ$, что соответствует (в приближении изотропной среды) требуемым ориентациям векторов волновых нормалей в области

возникновения НВС для описания возникновения кристаллов субреек с наблюдаемыми габитусами близкими $(774)_\gamma$.

Проведенная простая оценка позволяет предложить следующие этапы формирования реечного бейнита, согласующиеся, в принципе, с морфологической картиной на рисунке (Рисунок 5.9). Рост рейки с габитусом $(558)_\gamma$ связан со стартом из НВС первого типа (НВС1) в поле прямолинейной дислокации с линией $[1\bar{1}0]_\gamma$, приводящем к первому акту скачкообразного формирования рейки. Затем в упругом поле другой дислокации (но с аналогичной ориентацией линии), при наложении поля сжатия вдоль $[558]_\gamma$, обусловленного рейкой, возникает НВС2, обеспечивающее старт роста субрейки. Если одновременно со стартом субрейки происходит и старт второго скачкообразного подрастания рейки, то при согласованном распространении волн НВС2 воспроизводится в области бегущего фронта УВП, приводя к формированию слоистой структуры (СС) из субреек, чередующихся с остаточным аустенитом. Подробно близкий, по сути, механизм формирования СС обсуждался в [47].

Как отмечено в [47], при существенном отклонении осей деформации от направлений осей симметрии (в рамках сценария I) переход к конечным деформациям (до реализации бейновских значений вдоль осей деформации) должен приводить к значениям деформаций, превышающим бейновские, но тогда и величина сдвига $\text{tg}\varphi$ [47] недвойникованных кристаллов, в соответствии с соотношением

$$\text{tg}\varphi = \sqrt{\varepsilon_1} |\varepsilon_2| \quad (5.12)$$

может заметно превышать значения, типичные для деформации Бейна.

5.3.5. Сценарий II

Допустим, что габитус субрейки соответствует габитусу рейки, но в кристаллографическом базисе, связанном с двойникованным аустенитом. Тогда, используя матрицу перехода [133]

$$T = \begin{bmatrix} \bar{2} & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & \bar{2} \end{bmatrix}, \quad (5.13)$$

легко убедиться, что $(5\bar{8}5)_\gamma$ перейдет в $(\bar{7}4\bar{7})_\gamma$ и наоборот $(\bar{7}4\bar{7})_\gamma$ перейдет в $(5\bar{8}5)_\gamma$. Это означает, что при локальном аустенитном базисе, связанном с двойниковой ориентацией, речь идет о габитусе того же типа, хотя идентификация габитуса в исходном базисе дает резко отличающийся габитус.

В рамках сценария II можно проинтерпретировать повышенное, по сравнению с макросдвигом в рейке, значение $\text{tg}\varphi$, но иным образом, чем в случае сценария I. Действительно, в продвойникованной области может возникнуть субрейка того же типа, что и рейка. Однако, если собственный сдвиг при МП направлен на компенсацию исходного двойникового, что вполне естественно с точки зрения тенденции к сохранению формы, то величины сдвигов можно согласовать с экспериментом. Действительно, двойнивающий сдвиг в аустените – это $(\text{tg}\varphi)_{\text{tw}} = \frac{\sqrt{2}}{4} \approx 0.35355$. Величина собственного сдвига в кристаллах без двойников превращения при достаточно типичных для среднеуглеродистой стали значениях $|\varepsilon_2| \approx 0.17$ и $\varepsilon_1 \approx 0.12$ (учтена тетрагональность 1.045 мартенсита), согласно (5.12), дает $\text{tg}\varphi \approx 0.1428$. Беря разность, получим значение ≈ 0.21 , близкое к 0.22 в [130]. Следует учесть, что на самом деле собственный сдвиг, в основном, происходит по плоскости габитуса, то есть по $(557)_\gamma$ или $(558)_\gamma$, а не по $(111)_\gamma$, и поэтому направлен не строго против двойникового. Значит, степень

компенсации меньше, а результирующее значение сдвига больше, чем 0.21.

Подводя промежуточные итоги, отметим, во-первых, что при описании ГП субреек реализация любого из двух сценариев может приводить к наблюдаемой ориентации габитусов.

Действительно, близость к ОС Нишиямы диктуется механизмом наибыстрейшей деформации [58] плоскости $\{110\}_\gamma$ в условиях, когда главные деформации растяжения-сжатия лежат в данной плоскости. Это гарантируется при описании кристаллов с габитусами $(hhl)_\gamma$ при волновых нормалях квазипродольных волн, лежащих в $\{110\}_\gamma$ -плоскости, поскольку и векторы поляризации лежат в той же плоскости, являющейся плоскостью симметрии. Обсуждение данных о макросдвиге также сохраняет возможность реализации обоих сценариев.

С целью получения дополнительных аргументов в следующем разделе рассматриваются упругие поля базисных петель и кристонных носителей сдвига по плоскостям (hhl) с более подробным анализом, чем в п.4.5.

5.4 Упругие поля кристонов при формировании речной структуры бейнитного феррита

5.4.1. Вводные замечания

Дополняя вводную часть 5.3.1, отметим, что в настоящее время существуют две противопоставляемые гипотезы о роли диффузии в бейнитном превращении (см., например, [127, 134]). В одной предполагается решающее влияние диффузии углерода как на формирование речных кристаллов, так и на непрерывный рост макропластины. В другой гипотезе предполагается, что отдельные

кристаллы бейнитного феррита в составе макропластины возникают по мартенситному механизму, а диффузия углерода важна в паузах между ростом реек, создавая новые места (обедненные углеродом) для старта роста реечных кристаллов.

Данная работа выполнена в русле второй гипотезы. Это означает, что в рамках новой парадигмы рост кристалла считается следствием возникновения НВС в упругом поле дефекта, снижающем межфазный барьер. Именно на анализе упругих полей дислокационных центров зарождения (ДЦЗ) делается акцент в настоящей работе, включая данный раздел 5.4.

5.4.2. Упругое поле базисной петли кривонной модели сдвига $(558)_\gamma$ $[88\bar{1}0]_\gamma$

Формирование каждой рейки сопровождается макросдвигом, с основной компонентой, лежащей в плоскости габитуса. Это означает, что рейка создает в качестве ДЦЗ дефект, который в кривонной модели простого сдвига, как отмечалось в главах (Глава 1, Глава 4) (см. также [135, 136]), удобно моделировать совокупностью параллельных призматических петель, представленной на рисунке (Рисунок 5.10), аналогичном рисункам (Рисунок 5.3 и Рисунок 4.1) для сдвига с величиной $\text{tg}\psi$ по плоскости $(558)_\gamma$ в направлении $[88\bar{1}0]_\gamma$.

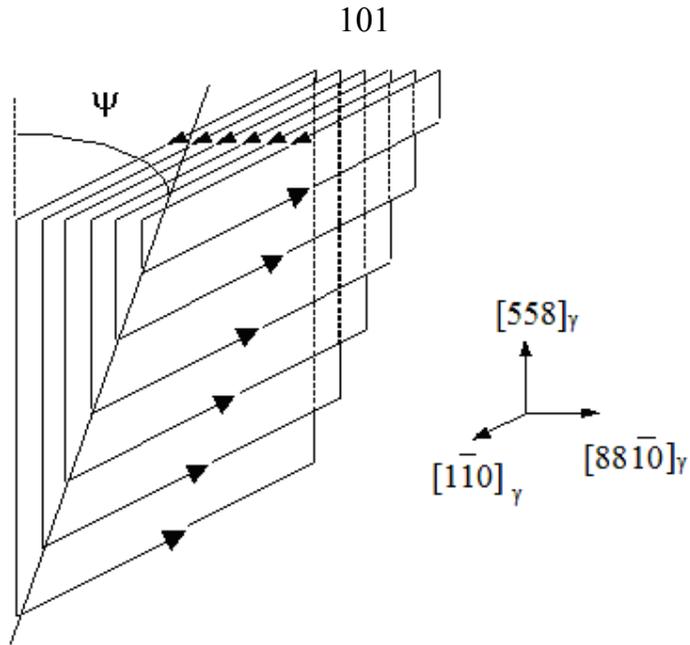


Рисунок 5.10 – Пример дислокационной модели кристона – носителя простого сдвига $[88\bar{1}0]_{\gamma}$ ($558)_{\gamma}$

Ориентация основного сегмента петли Λ_1 выбирается вдоль $\langle 1\bar{1}0 \rangle_{\gamma}$, а ориентация Λ_2 второго сегмента любой из петель кристонного носителя сдвига выбирается ортогональной к Λ_1 . Здесь будут приведены результаты для случая $\Lambda_2 \parallel [558]_{\gamma}$, соответствующего рисунку (Рисунок 5.10). Цель данного раздела показать, что ДЦЗ, соответствующие отдельной петле указанного вида или кристонной модели сдвига, могут приводить к речному составу макропластины бейнита, включающему кристаллы с габитусами вида $(hhl)_{\gamma}$ при $h < \ell$ и $h > \ell$.

Выберем в качестве базисной (самой широкой) петли кристонной модели сдвига $(558)_{\gamma} [88\bar{1}0]_{\gamma}$ дислокационную петлю с размерами (в единицах параметра решетки a) $L_1 = 10^4$ вдоль $\Lambda_1 \parallel [1\bar{1}0]_{\gamma}$ и $L_2 = 10^3$ вдоль $\Lambda_2 \parallel [558]_{\gamma}$ при векторе Бюргерса $\mathbf{b} \parallel [88\bar{1}0]_{\gamma}$. Пространственная фиксация цилиндрической системы отсчета относительно прямоугольной дислокационной петли с ориентациями сторон, задаваемых единичными векторами τ_1 и τ_2 , приведена на рисунке (Рисунок 5.11), отличающемся от

рисунка (Рисунок 4.4) расположением начала отсчета и ориентацией кристона.

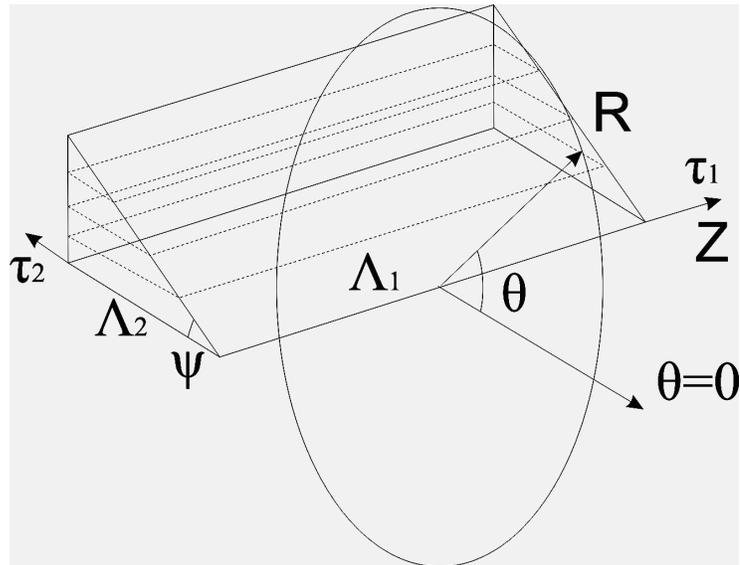


Рисунок 5.11 – Цилиндрическая система координат, используемая при расчетах упругих полей дислокационных петель

Из рисунка (Рисунок 5.11) видно, что начало отсчета выбирается в центре сегмента Λ_1 , угол θ отсчитывается от плоскости петли. Положительным значениям θ соответствует поворот, при наблюдении с конца вектора τ_1 , происходящий против часовой стрелки. Удаленность (в единицах a) точки наблюдения R выбирается такой, чтобы, наращивая число петель, в соответствии с рисунком (Рисунок 5.11), можно было исследовать суперпозиционное упругое поле.

На рисунке (Рисунок 5.12) представлено упругое поле петли с указанными выше параметрами для $R=1500$ при выборе, согласно данным [123], в качестве модельного набора упругих модулей $C_L=0.2508$, $C'=0.0271$, $C_{44}=0.1034$ (в ТПа) для сплава Fe-31.5%Ni при температуре $T=673$ К. Цифры соответствуют значениям угловой переменной (в градусах) для экстремумов собственных чисел $\varepsilon_{1,2}$ и изменения относительного объема δ .

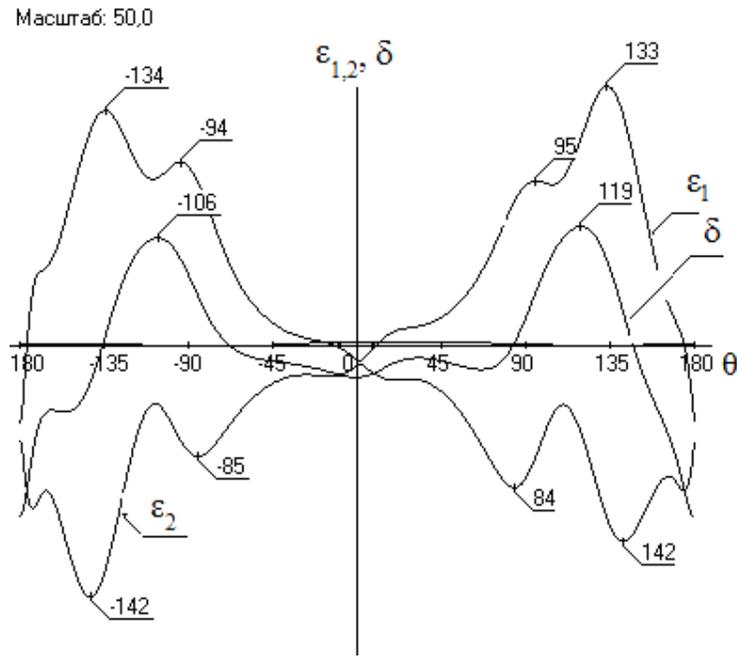


Рисунок 5.12 – Угловые зависимости собственных чисел $\varepsilon_{1,2}$ тензора деформаций и изменения относительного объема δ упругого поля базисной петли для кристонной модели сдвига $(558)_\gamma [88\bar{1}0]_\gamma$ при $R = 1500$; упругие модули $C_L = 0.2508$, $C' = 0.0271$, $C_{44} = 0.1034$ (в ТПа)

Значения чисел ε_3 малы по сравнению с ε_1 , $|\varepsilon_2|$, и на графике соответствующая кривая $\varepsilon_3(\theta)$ не обозначается. Поскольку при анализе важны лишь угловые локализации экстремумов $\varepsilon_{1,2}$ (и соответствующие ориентации собственных векторов), абсолютные значения $\varepsilon_{1,2}$ не приводятся, а масштабный множитель характеризует коэффициент увеличения данных численного расчета до удобного для восприятия размера.

В таблице (Таблица 5.2) приведены ориентации собственных векторов $\xi_{1,2}$ и рассчитанные нормали $(\mathbf{N}_w)_2$ для основных экстремумов. Для удобства читателей в последней колонке $(\mathbf{N}_w)_2$ дается и в приближении сравнительно небольших целочисленных индексов.

Заметим, что для компактности записи результатов в таблицу (Таблица 5.2) приведены лишь габитусы $(N_w)_2$. Из (5.1) очевидно, что для $(N_w)_1$ при тех же ξ_1 и ξ_2 получаем векторы, отличающиеся от $(N_w)_2$ изменением знака индекса ℓ (либо, что эквивалентно, изменением знака пары равных индексов h).

Таблица 5.2– Ориентации векторов $\xi_{1,2}$ и нормалей N_w габитусных плоскостей, сопоставляемых экстремумам зависимостей $\varepsilon_{1,2}(\theta)$

	Угол θ	ξ_1	ξ_2	$(N_w)_2$	$(N_w)_2$
1	-142°	-0,705831	0,0424647	0,484836	2
		-0,705831	0,0424647	0,484836	2
		-0,060054	-0,998195	-0,727921	-3
2	-134°	0,704998	-0,054572	0,496509	7
		0,704998	-0,054572	0,496509	7
		-0,0771778	-0,997018	0,712010	10
3	-106°	0,416945	-0,571101	-0,696833	-4
		0,416945	-0,571101	-0,696833	-4
		-0,807659	-0,589649	0,169842	1
4	119°	0,287501	-0,646021	-0,649548	-13
		0,287501	-0,646021	-0,649548	-13
		-0,913612	-0,406588	0,395190	8
5	133°	0,0732166	-0,703306	-0,511079	-11
		0,0732166	-0,703306	-0,511079	-11
		-0,994625	-0,103544	0,691084	15
6	142°	-0,0343972	0,706270	0,478442	9
		-0,0343972	0,706270	0,478442	9
		-0,998816	-0,0486451	0,736333	14

Итак, при выделении самых интенсивных экстремумов при $\theta = \pm 142^\circ$ и $\theta = 133^\circ, -134^\circ$ речь идет о попарно близких габитусах $(22\bar{3})_\gamma$, $(11\ 11\ \bar{15})_\gamma$ (разориентация на угол $\approx 2.7^\circ$) и $(7\ 7\ 10)_\gamma$, $(9\ 9\ 14)_\gamma$ (разориентация на угол $\approx 2.4^\circ$) типа $(hh\ell)$ при $h < |\ell|$. Следует иметь в виду, что при близости габитусов в каждой паре ориентации главных осей сжатия и растяжения практически меняются местами. Например, габитусу $(7\ 7\ 10)_\gamma$ сопоставляются растяжение вблизи $[110]_\gamma$ и сжатие вблизи $[001]_\gamma$, тогда как габитусу $(9\ 9\ 14)_\gamma$ сопоставляются растяжение вблизи $[001]_\gamma$ и сжатие вблизи $[110]_\gamma$. Напомним, наиболее быстрой трансформации бейновской ячейки (для недвойникованных кристаллов) [58] способствуют сжатие вдоль $[001]_\gamma$ и растяжение вдоль $[110]_\gamma$. Это означает, что после возникновения НВС необходимые фазы деформаций во втором случае достигаются, спустя половину периода колебаний. Поэтому, при прочих равных условиях, возможна реализация обоих вариантов, если допустимо запаздывание на половину периода.

Далее, если потребовать, чтобы для возникновения НВС выполнялось условие $\delta \geq 0$ (так как мартенситное превращение идет с увеличением удельного объема), то габитусы $(22\bar{3})_\gamma$ и $(223)_\gamma$ можно не учитывать.

При использовании запрета на запаздывание колебаний для получения благоприятных фаз деформаций, в случае $h < \ell$, отбирается единственный габитус $(7\ 7\ 10)_\gamma$. Этот габитус составляет с исходным $(558)_\gamma$ угол $\approx 3.2^\circ$, поэтому можно считать, особенно с учетом экспериментальных погрешностей, что выполняется условие для воспроизведения условий запуска следующего реального кристалла того же типа.

Интересно, что максимумам параметра δ при $\theta = -106^\circ$ и $\theta = 119^\circ$ отвечают $(hh\ell)_\gamma$ при $|h| > \ell$, причем габитус $(\bar{13}\ \bar{13}\ 8)_\gamma$ близок к $(\bar{7}\bar{7}4)_\gamma$,

составляя с ним угол $\approx 1.5^\circ$. Впрочем, этот максимум δ достигается за счет низкого вклада деформации сжатия, поэтому утверждать, что именно экстремум δ играет решающую роль в старте роста кристаллов с габитусами типа $(\bar{7}\bar{7}4)_\gamma$ представляется преждевременным.

Уточнение отбора ДЦЗ связано с переходом от расчета упругих полей базисных петель к расчетам полей от упорядоченных совокупностей петель. При этом можно ожидать кумулятивного эффекта.

5.4.3. Упругое поле кристона, моделирующего процесс сдвига $(558)_\gamma$ $[88\bar{1}0]_\gamma$

На рисунке (Рисунок 5.13) приведены данные расчета для модели кристонного носителя сдвига из 10 петель по системе $(558)_\gamma [88\bar{1}0]_\gamma$ с величиной $\text{tg}\psi=0.15^\circ$, на расстоянии $R=1500$. Выбор начала отсчета тот же, что и раньше (Рисунок 5.11). Наряду с кумулятивным эффектом (на рисунках (Рисунок 5.12, Рисунок 5.13) различные масштабы) следует отметить близость угловой локализации экстремумов, отмеченных ранее для базисной петли, как и ориентаций габитусных плоскостей, сопоставляемых экстремумам. Это наглядно демонстрирует перечисление углов (Рисунок 5.13) интенсивных экстремумов, максимумов δ и сопоставляемых им габитусов (в приближении целых индексов). При учете условия $\delta \geq 0$ и требования благоприятной фазировки деформаций (без запаздывания по времени) условию $h < \ell$ удовлетворяет единственный габитус $(11\ 11\ 15)_\gamma$ для $\theta = -137^\circ$. Этот габитус составляет с исходным $(558)_\gamma$ угол $\approx 4.5^\circ$. Соответственно максимумам δ сопоставляются: $\theta = -118^\circ \rightarrow (110)_\gamma$, $\theta = 126^\circ \rightarrow (\bar{3}\bar{3}2)_\gamma$.

реалистичны условия эстафетного инициирования процесса самоорганизации ансамбля реек с габитусами из набора $(hh\ell)_\gamma$ при $h < \ell$, включающего указанные габитусы.

При использовании методики отбора потенциальных ДЦЗ по экстремумам упругого поля ДЦЗ случаю $h > \ell$ отвечает экстремум относительного изменения объема. Ожидаемые отношения индексов h/ℓ для кристонных моделей носителей сдвига в приведенных расчетных данных могут значительно изменяться: $13/8$, $3/2$, $1/0$. Подчеркнем, однако, что, как показывает расчет, переход от кристонных ДЦЗ, способных инициировать сдвиг по плоскостям $(hh\ell)_\gamma$ при $h < \ell$, к ДЦЗ, способным инициировать сдвиг по плоскостям $(hh\ell)_\gamma$ при $h > \ell$, сохраняются условия для возникновения кристаллов основной реечной компоненты бейнитной макропластины.

Анализ, проведенный в п.5.3, показал, что возникновение субреек с габитусами $(hh\ell)_\gamma$ при $h > \ell$ может идти, как минимум, еще двумя путями. Во-первых, имеются основания для трактовки габитусов $\{477\}_\gamma$ как аналогов $\{855\}_\gamma$, но в кристаллографическом базисе двойникового аустенита. Во-вторых, появление габитусов $\{477\}_\gamma$ можно связать с модификацией упругого поля ДЦЗ за счет упругого поля сжатия, создаваемого в аустените субрейками с габитусами $\{855\}_\gamma$. Эти трактовки легко согласовать и с величинами наблюдаемого макросдвига.

Заметим, однако, что если следовать известной для пакетного мартенсита закономерности об ансамблях кристаллов в пакете, составляющих малые углы с одной и той же плотноупакованной плоскостью, то предпочтение следует отдать сценарию формирования бейнитного феррита дополнительной компоненты в кристаллографическом базисе двойникового аустенита.

5.5 Заключение к главе 5

Выполненный в главе анализ упругих полей дислокационных петель и их суперпозиций (моделирующих кристонные носители) показал следующее.

1. Наблюдаемое смещение центров распределения ориентировок габитусных плоскостей кристаллов мартенсита систем Fe-C к полюсам $\langle 259 \rangle$ в отличие от $\langle 3\ 10\ 15 \rangle$ для систем Fe-Ni получает естественную интерпретацию, как следствие модификации упругих полей дислокационных петель типа «дырка» за счет внедрения в них атомов углерода.

2. 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 как результат формирования новых центров. При этом весьма перспективна интерпретация возникновения ряда новых центров как следствия контактного взаимодействия (пересечения) пластинчатых областей двойникового аустенита.

3. Впервые установлено, что в рамках динамического подхода для γ - α 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. Эта возможность продемонстрирована для анизотропного аустенита с реалистичными значениями упругих модулей.

4. Проведенный здесь и в [129, 137] анализ дает аргументы в пользу бездиффузионного механизма формирования реек и субреек в составе макропластины нижнего бейнитного феррита.

5. 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.

6. Однако, для однозначных выводов без прямых наблюдений роста бейнитного феррита с высоким временным и пространственным разрешением аргументов пока недостаточно.

7. Наблюдаемая бимодальная композиция реек и субреек в составе макропластины бейнитного феррита согласуется в целом с динамической теорией формирования мартенситных кристаллов. Однако уточнение причин появления дополнительных субреек с габитусами $(hh\ell)_\gamma$ при $h > \ell$ требует продолжения прецизионных исследований морфологии макропластин бейнитного феррита. Результаты в этом направлении вместе с данными измерений эффективных скоростей роста макропластин и временных интервалов между последовательными актами образования реек, важны для установления физических механизмов формирования бейнитного феррита и могут рассматриваться в качестве ближайших перспективных исследований.

Результаты этой главы опубликованы в работах [138-147].

Глава 6. Кристаллодинамика образования ε -мартенсита с габитусами $\{334\}_\alpha$, $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ в титане

Рассмотренная в главе 1 модель двухволнового управления ростом МК напрямую нацелена на описание процесса инициации плоской пороговой деформации со слабоискаженными плоскостями. Поэтому не случайно полное описание макроскопических морфологических признаков при ОЦК–ГПУ мартенситных превращениях (для идеализированной ситуации) было достигнуто [54-57] в случае варианта деформация $\{110\}_\alpha$ атомных плоскостей исходной ОЦК-фазы (также, как и при превращении γ – α , для ОЦК-фазы будем использовать индекс α). Кристаллографические характеристики в базисе ГПУ решетки будут маркироваться индексом h .

6.1 Условие трансформации плоскости $\{110\}_\alpha$ в базисную плоскость $\{0001\}_h$ ГПУ – структуры

Согласно простейшей модели жестких сфер (см., например, [54], [56], [148]), переход к плотнейшей упаковке является следствием деформации растяжения $\varepsilon_1 = \frac{3}{2\sqrt{2}} - 1 \approx 0.06066$ в $[110]_\alpha$ и сжатия $\varepsilon_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} - 1 \approx -0.13397$ в $[001]_\alpha$ – направлениях. Очевидно, что в случае неизменного радиуса сфер $|\varepsilon_2| > 2\varepsilon_1$. При этом параметры c_h и a_h элементарной ячейки ГПУ структуры связаны с параметром a_α ОЦК решетки соотношениями

$$c_h = a_\alpha \sqrt{2}, \quad a_h = a_\alpha \sqrt{3}/2. \quad (6.1)$$

Тогда для идеальной шаровой упаковки имеем отношение:

$$\frac{c_h}{a_h} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \approx 1.633. \quad (6.2)$$

При снятии ограничения модели жестких сфер, но с сохранением симметрии расположения атомов в плоскостях, условие трансформации плоскости $(110)_\alpha$ принимает вид:

$$(1 - |\varepsilon_2|)\sqrt{3} = (1 + \varepsilon_1)\sqrt{2}, \quad (6.3)$$

Ясно, что (6.3) можно удовлетворить и чистым сжатием ($\varepsilon_1=0$, $|\varepsilon_2|=1-(2/3)^{1/2} \approx 0.1835$), и чистым растяжением ($\varepsilon_2=0$, $\varepsilon_1=(3/2)^{1/2}-1 \approx 0.2247$).

Поэтому параметр $\eta = \frac{|\varepsilon_2|}{\varepsilon_1}$ формально удовлетворяет неравенствам $0 \leq \eta \leq \infty$.

При спонтанном МП при достижении температуры M_s с точки зрения динамической теории естественным является выделение значения η_n , задаваемого соотношением (1.6) [54-57]. При $\mathbf{n}_1 || [110]_c$ и $\mathbf{n}_2 || [001]_c$, из (1.6) имеем:

$$\eta_n \approx \left(\frac{v_1}{v_2} \right)^2 = \frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2C_{11}}, \quad (6.4)$$

где C_{11} , C_{12} , C_{44} – модули упругости кубической модификации кристалла. В соответствии с [149], монокристалл титана при $T=1238$ К имеет модули упругости (в ГПа): $C_{11}=134$, $C_{12}=110$, $C_{44}=36$ и параметр решетки $a_\alpha=3,31 \times 10^{-10}$ м. Подставляя значения модулей в (6.4), получаем $\eta_n \approx 1.1791$, существенное отличающееся от $\eta \approx 2.21$ в модели твердых сфер. При высокой скорости МП потерявшая устойчивость решетка может сохранить близкие к η_n значения параметра η вплоть до конечных деформаций (ε_i порядка 0.1). Это дополнительное условие и обеспечило успех дальнейшего описания морфологических признаков в [54-57]. В частности, для монокристалла ОЦК титана нормаль \mathbf{N}_w к ГП, близка к $[22\bar{3}]_\alpha$ (составляет с $[22\bar{3}]_\alpha$ угол $\approx 0.7^\circ$).

Хотя ориентации $\langle 223 \rangle_\alpha$ и наблюдаются, но чаще в литературе отмечаются ориентации \mathbf{N}_w , близкие к $\langle 334 \rangle_\alpha$. Следует отметить, что в [54-57] акцентировалось внимание на принципиальных вопросах, а

исследование экстремумов упругих полей дислокационных центров зарождения (ДЦЗ), важное для отбора направлений волновых нормалей \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 управляющих волн, не проводилось. Поэтому цель данной главы подобный отбор провести и показать, каким ДЦЗ могут быть сопоставлены кристаллы с наиболее часто наблюдаемыми габитусами.

6.2 Анализ упругого поля ДЦЗ с линией $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$ при краевой ориентации вектора Бюргерса и описание габитусов $\{334\}_\alpha$

Примем, как и в [54-57], что роль ДЦЗ играют прямолинейные сегменты дислокационных линий. В кристаллах с ОЦК решеткой присутствуют три системы плоскостей, имеющих примерно равную плотность заполнения. Две из них, а именно $\{110\}_\alpha$ и $\{112\}_\alpha$, содержат $\langle 110 \rangle_\alpha$ в качестве линий пересечения. В результате пересечения этих плоскостей скольжения дислокационных петель при их контактном взаимодействии, естественным образом возникают ДЦЗ с линиями $\langle 110 \rangle_\alpha$. Такие ДЦЗ имеют суперпозиционный вектор Бюргерса и, как следствие, создают более интенсивные поля упругости. По-видимому, это обстоятельство в совокупности с требованием наибо́льшего роста кристалла и определяют отбор ДЦЗ с линиями $\Lambda \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$, в то время как дислокационные линии, характерные для ОЦК решетки, коллинеарны направлениям $\langle 111 \rangle_\alpha$ с более плотной упаковкой.

Рассмотрим краевую ориентацию вектора Бюргерса \mathbf{b} , при которой следует ожидать инициацию формирования кристаллов с ГП вида $\{hh\ell\}_\alpha$. Предпочтение, естественно, следует отдавать такому \mathbf{b} , при котором экстремумы сжатия и растяжения упругого поля соответствуют ориентациям собственных векторов $\xi_{1,2}$ тензора деформаций $\hat{\varepsilon}$, имеющих направления близкие к $[110]_\alpha$ и $[001]_\alpha$. Напомним, что синтез концепций гетерогенного зарождения и волнового роста кристалла мартенсита, предполагает, наряду с (5.1), и выполнение условий:

$$\mathbf{n}_1 = \xi_1, \quad \mathbf{n}_2 = \xi_2. \quad (6.5)$$

В первую очередь, были проанализированы упругие поля для нескольких стандартных ориентировок \mathbf{b} . Так, при $\Lambda \parallel [1\bar{1}0]_\alpha$ рассматривались $\mathbf{b} \parallel [110]_\alpha, [111]_\alpha, [112]_\alpha, [001]_\alpha$. Крайним случаем из указанных четырех соответствует простейший вариант взаимодействия двух дислокационных петель с пересекающимися плоскостями скольжения. Действительно, две петли, лежащие, например, в плоскостях $(112)_\alpha$ и $(11\bar{2})_\alpha$ с типичными для ОЦК - решетки ориентациями векторов Бюргера (вдоль $[11\bar{1}]_\alpha$ и $[111]_\alpha$ соответственно) пересекаются вдоль $\Lambda \parallel [1\bar{1}0]_\alpha$, а возникший ДЦЗ характеризуется либо суммой ($\mathbf{b}_1 \parallel [110]_\alpha$), либо разностью ($\mathbf{b}_2 \parallel [001]_\alpha$) указанных векторов Бюргера. Уместно подчеркнуть, что, согласно критерию Франка (см. п.4.1), случай $\mathbf{b}_2 \parallel [001]_\alpha$ соответствует снижению упругой энергии взаимодействующих дислокаций. Поэтому именно данный случай наиболее вероятен, особенно в условиях, когда материал испытывает превращение при достаточно высоких температурах и, соответственно, дислокации в исходной α - фазе обладают достаточной подвижностью для реализации реакций, понижающих энергию.

Тем не менее, полезно сопоставить угловые зависимости собственных чисел ε_i ($i = 1, 2, 3$) тензора деформаций $\hat{\varepsilon}$ и для $\mathbf{b}_1 \parallel [110]_\alpha$, и для $\mathbf{b}_2 \parallel [001]_\alpha$. Обсуждение удобно иллюстрировать данными расчета упругого поля прямоугольной петли с ориентациями сторон $\Lambda_1 \parallel [1\bar{1}0]_\alpha$ и $\Lambda_2 \parallel [110]_\alpha$ и соответствующими длинами (в параметрах решетки a) $L_1=7 \cdot 10^3$ и $L_2=10^4$ на расстоянии $R=10^3$ от центра стороны Λ_1 . Угол θ отсчитывается от плоскости петли $(001)_\alpha$. Ясно, что случаю \mathbf{b}_2 соответствует призматическая петля, а случаю \mathbf{b}_1 – петля способная к скольжению.

Сравнение показывает, что в обоих случаях габитусам $(3\bar{3}4)_\alpha$ и $(334)_\alpha$ можно сопоставить определенные области угловой локализации упругих полей. Однако при $\mathbf{b} \parallel \mathbf{b}_2$ эта область включает точку экстремума деформации сжатия. Кроме того, и это существенно, при $\mathbf{b} \parallel \mathbf{b}_2$ одновременно выполняются условия отрицательного изменения удельного объема (что естественно при перестройке в ходе охлаждения в более плотноупакованную решетку) и близости оси растяжения к $[110]_\alpha$, а оси сжатия – к $[001]_\alpha$. При $\mathbf{b} \parallel \mathbf{b}_1$ указанные условия отбора одновременно не выполняются. Поэтому на рисунке (Рисунок 6.1) приводятся данные только для случая $\mathbf{b} \parallel \mathbf{b}_2$.

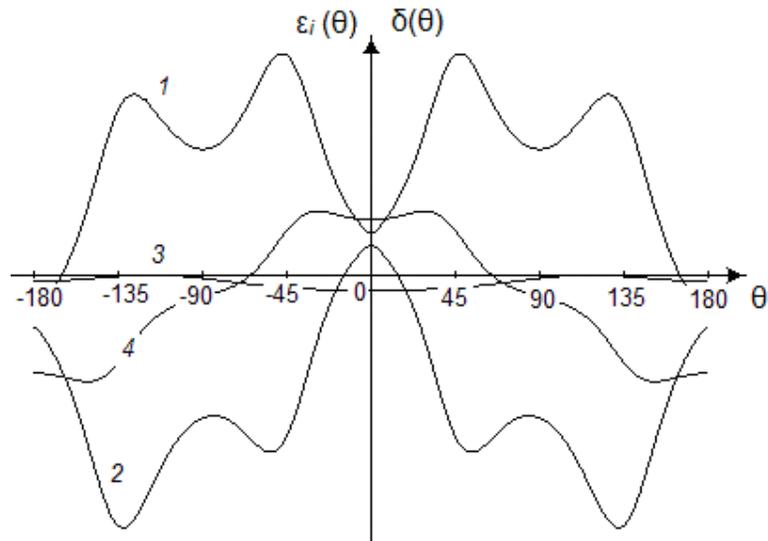


Рисунок 6.1 – Зависимости $\varepsilon_i(\theta)$ – кривые 1, 2, 3 и $\delta(\theta)$ – кривая 4

При $\mathbf{b} \parallel \mathbf{b}_2$ совпадение \mathbf{N}_w с $[3\bar{3}4]_\alpha$ (с точностью до сотых градуса) имеет место при $\theta_1^* \approx -139^\circ$ и $\theta_1^{**} \approx 133,5^\circ$. В свою очередь, совпадение \mathbf{N}_w с $[334]_\alpha$ происходит при $\theta_2^* \approx -133,5^\circ$ и $\theta_2^{**} = 139^\circ$. Значения θ_2^* и θ_1^{**} отвечают максимумам величины сжатия $|\varepsilon_2|_{\max}$ (Рисунок 6.1, кривая 2), а значения θ_1^* и θ_2^{**} отклонены в сторону «плато» минимумов относительного изменения объема δ (Рисунок 6.1, кривая 4) с

ближайшими к θ_1^* и θ_2^{**} точками $\theta_\delta \approx \pm 147^\circ$. Наличие пар углов (например, θ_1^* и θ_2^*), для которых имеет место совпадение \mathbf{N}_w либо с $[33\bar{4}]_\alpha$, либо с $[334]_\alpha$ вполне естественно, если учесть, что в (5.1) следует учитывать и возможность изменения направления любой из нормалей $\mathbf{n}_{1,2}$ на противоположное. Выпишем ориентации векторов $\xi_{1,2}$ при θ_1^* и θ_2^* :

$$\xi_1(\theta_1^*) = [-0.706578 \quad -0.706578 \quad -0.0038671], \quad (6.6)$$

$$\xi_2(\theta_1^*) = [0.00273446 \quad 0.00273446 \quad -0.9992520],$$

$$\xi_1(\theta_2^*) = [0.706578 \quad 0.706578 \quad -0.0038671], \quad (6.7)$$

$$\xi_2(\theta_2^*) = [-0.00273446 \quad -0.00273446 \quad -0.9992520],$$

Очевидно, что (6.6) и (6.7) могут быть получены из пар осей симметрии $[1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2} \quad 0]$, $[00\bar{1}]$ и $[1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2} \quad 0]$, $[00\bar{1}]$ малыми поворотами вокруг оси $[1\bar{1}0]$ на одинаковые малые углы, но в противоположных направлениях. Отсюда ясно, что различие (6.6) и (6.7), в основном, связано с изменением на противоположное направления вектора $\xi_1(\theta_2^*)$. Ясно, также, что между θ_1^* и θ_2^* располагается угол $\theta^* \approx (\theta_1^* + \theta_2^*)/2$, которому соответствует точное совпадение осей растяжения и сжатия с осями симметрии $[110]_\alpha$ и $[001]_\alpha$.

Напомним, что принадлежность волновых векторов плоскости симметрии $(1\bar{1}0)_\alpha$, обеспечивает ее наиболее быструю перестройку и вхождение в ОС с ориентацией ортогональной к габитусу.

6.3 Анализ упругого поля ДЦЗ с линией $\langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$ при смешанной ориентации вектора Бюргерса и описание габитусов $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$

Следует ожидать, что смешанные дислокации при такой же ориентации Λ дают габитусы $\{\tilde{h}hl\}_\alpha$ с близкими, но не совпадающими парами индексов (условно считается, что индекс $\tilde{h} > h$). Это означает: смешанные дислокации тоже имеют области поля упругости с главными

направлениями деформаций вблизи осей симметрии $\langle 110 \rangle_\alpha$ и $\langle 100 \rangle_\alpha$ кубической решетки.

Снова, как и в п.6.2, полагаем, что формирование ДЦЗ идет с понижением энергии (в согласии с критерием Франка). Тогда краевой ориентации (по отношению к $\Lambda \parallel [1\bar{1}0]_\alpha$) суммарного вектора Бюргерса $\mathbf{V} = a[001]_\alpha$ (a – параметр решетки) соответствует простейший вариант взаимодействия двух дислокаций с плоскостями скольжения $(112)_\alpha$ и $(11\bar{2})_\alpha$ с векторами Бюргерса $(a/2)[11\bar{1}]_\alpha$ и $(a/2)[111]_\alpha$ соответственно. Ясно, что при увеличении числа пар n ($n = 1, 2, 3 \dots$) подобных дислокаций \mathbf{V} кратно возрастает. Взаимодействие с дополнительной неспаренной дислокацией из тех же семейств сохраняет краевой характер векторов Бюргерса, добавляя к векторам $\mathbf{V} = a[00n]_\alpha$ семейство $\mathbf{V}_1 = (a/2)[112n-1]_\alpha$. Если же в качестве неспаренной добавляется дислокация $(a/2)[1\bar{1}\bar{1}]_\alpha$ ($110)_\alpha$, то суммарные векторы Бюргерса $\mathbf{V}_2 = (a/2)[1\bar{1}2n-1]_\alpha$ включают винтовую компоненту. Заметим, что к смешанным ориентациям $\mathbf{V}_3 = a[100]_\alpha$, $a[010]_\alpha$ (по отношению к $\Lambda \parallel [1\bar{1}0]_\alpha$) приводит и взаимодействие пар дислокаций $(a/2)[1\bar{1}1]_\alpha$ ($110)_\alpha$ и $(a/2)[11\bar{1}]_\alpha$ ($112)_\alpha$ либо $(a/2)[\bar{1}11]_\alpha$ ($110)_\alpha$ и $(a/2)[11\bar{1}]_\alpha$ ($112)_\alpha$.

Анализ упругого поля проводился при использовании тех же модулей упругости, что и в п.6.22. Для иллюстрации использовался вариант прямоугольной петли с ориентациями сторон $\Lambda_1 \parallel [1\bar{1}0]_\alpha$ и $\Lambda_2 \parallel [110]_\alpha$ и соответствующими длинами (в параметрах решетки a) $L_1 = 7 \cdot 10^3$ и $L_2 = 10^4$ на расстоянии $R = 10^3$ от центра стороны Λ_1 . Угол θ отсчитывается от плоскости петли $(001)_\alpha$. Соотношения (5.1), при учете (6.5), позволяют найти нормаль \mathbf{N}_w к ГП. Очевидно, что для выбранной расчетной конфигурации основной вклад в упругое поле дает только один сегмент петли.

При смешанных ориентациях \mathbf{B}_2 интенсивным экстремумам на зависимостях $\varepsilon_i(\theta)$ (Рисунок 6.2), отвечают габитусы близкие к $(9\ 8\ 12)_\alpha$ при $\theta \approx -134^\circ$ и к $(8\ 9\ \bar{1}2)_\alpha$ при $\theta \approx 134^\circ$. Интересно, что экстремумам растяжения при $\theta \approx -48^\circ$ и $\theta \approx 48^\circ$ отвечают, соответственно, габитусы близкие к $(12\ 10\ \bar{1}5)_\alpha$ и к $(10\ 12\ 15)_\alpha$, однако фазы деформаций в этом случае благоприятны для формирования двойников превращения.

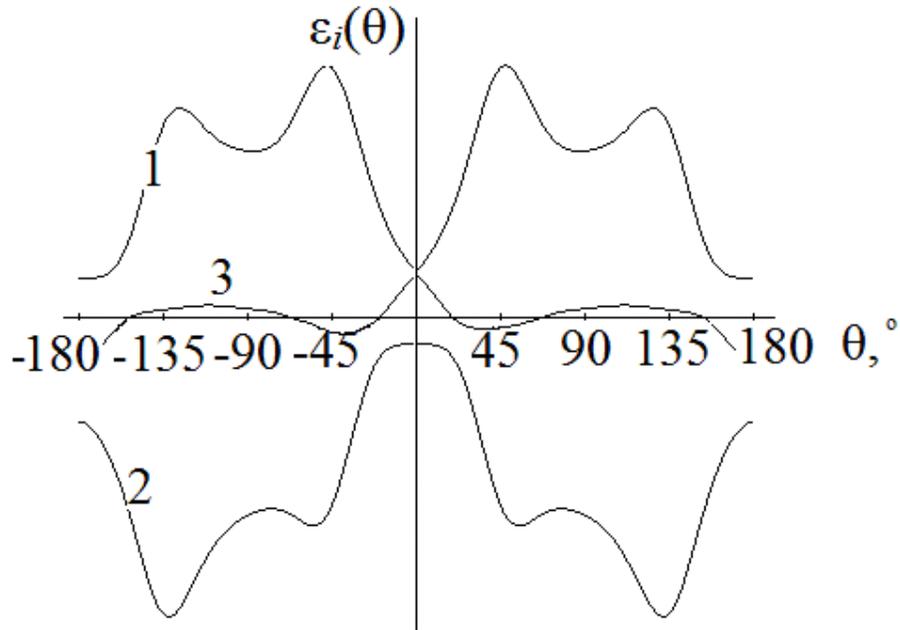


Рисунок 6.2 – Зависимости $\varepsilon_i(\theta)$, $i=1, 2, 3$; $\mathbf{B}_2 \parallel [1\ \bar{1}3]_\alpha$

Отметим также, что при ориентациях \mathbf{B}_3 имеется более богатый набор экстремумов на зависимостях $\varepsilon_i(\theta)$, приведенный на рисунке (Рисунок 6.3), совместимый с отбором и габитусов, близких к $\{443\}_\alpha$. Однако окончательное соответствие между ДЦЗ и наблюдаемыми кристаллами должно устанавливаться при сравнении полного набора морфологических признаков.

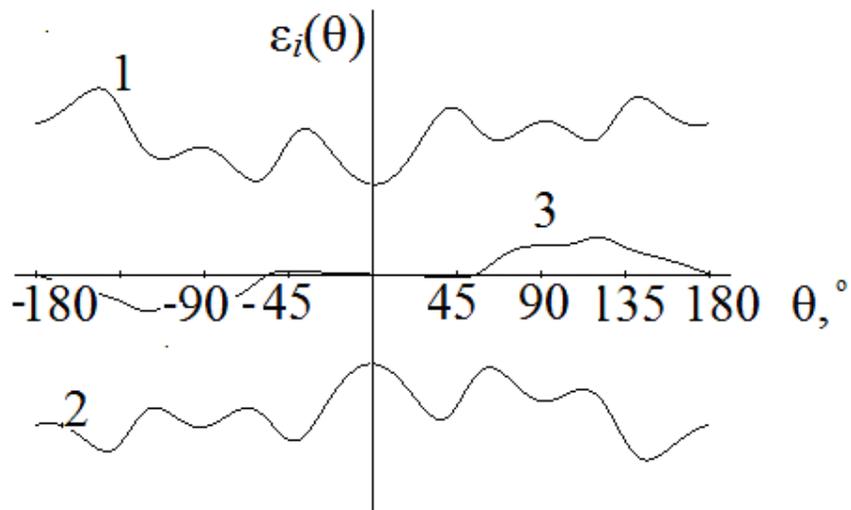


Рисунок 6.3 – Зависимости $\varepsilon_i(\theta)$, $i=1, 2, 3$; $\mathbf{B}_2 \parallel [100]_\alpha$

6.4 Заключение к главе 6

Подведем итоги.

1. В рамках динамической теории формирование кристаллов ε -мартенсита с габитусами $\{3\ 3\ 4\}_\alpha$ и $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ трактуется как следствие быстрой перестройки плоскости $\{1\ \bar{1}\ 0\}_\alpha$.
2. Кристаллам с указанными габитусами сопоставляются ДЦЗ, содержащие в качестве основных сегментов, линии $\Lambda \parallel \langle 1\ \bar{1}\ 0 \rangle_\alpha$.
3. 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, упругие поля которого способствуют возникновению необходимого для роста в волновом режиме кристалла.
4. 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. Отбор направлений волновых нормалей управляющих перестройкой волн обусловлен экстремумом деформации сжатия упругого поля ДЦЗ (соответствующие максимумы деформаций растяжения находятся в близком угловом диапазоне).

5. Формирование кристаллов с иногда наблюдающимися [150] в титане ориентировками габитусов $\{443\}_\alpha$ требует отдельного рассмотрения и обсуждения, поскольку помимо отмеченной выше возможности следует с позиций динамической теории МП рассмотреть и вариант их образования из двойниковых ориентаций решетки исходной фазы. Эта возможность отмечалась в [151]. На наш взгляд, в данном случае ситуация близка с обсуждавшейся в главе (Глава 5) проблемой формирования дополнительной реечной компоненты в составе макропластины бейнитного феррита.

Результаты этой главы опубликованы в работах [152-154].

Заключение

Исследования, выполненные в работе, относятся к области действия новой парадигмы для фазовых превращений I рода в твердых телах и, в первую очередь, для реконструктивных мартенситных превращений [65, 66]. Центральную роль при этом играет концепция начального возбужденного (колебательного) состояния, принципиально дополняющая традиционную концепцию квазиравновесного зародыша новой фазы. Последняя концепция остается актуальной для сравнительно медленно протекающих превращений.

Возбужденные состояния возникают в упругих полях дефектов (как правило, дислокационной природы) и порождают управляющий волновой процесс, формирующий в пороговом режиме области кристаллов новой фазы. Поэтому в качестве самостоятельного этапа описания мартенситной реакции естественно выделяется расчет упругих полей дефектов, поскольку управляющий волновой процесс наследует информацию об ориентации собственных векторов их полей деформации.

После решения ряда принципиальных проблем, поставленных экспериментом перед теорией, динамическая теория реконструктивных мартенситных превращений получила прочную основу для количественного описания наблюдаемых особенностей превращений в разных системах.

Именно в таком ракурсе рассматривали постановку задачи исследования автор и руководитель работы. Поэтому **в методическом отношении** требовалось разработать удобный интерфейс, позволяющий по данным об упругих модулях системы и конфигурации дислокационного центра зарождения, рассчитывать упругие поля ДЦЗ и выполнять их анализ.

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 – носителям деформации сдвига в полосах сдвига, ориентации границ которых, в общем случае, не совпадают с ориентациями плоскостей с наиболее плотными для исходных фаз упаковками атомов.

Перечислим важнейшие результаты, отраженные в заключительных частях 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. Хотя результатов систематических прецизионных исследований таких вариантов не проводилось, качественно подобные картины неоднократно наблюдались. Не исключено, что близкий, по сути, механизм обеспечивает симбиоз между речными кристаллами с габитусами $\{557\}$ и пластинами частично двойникованных кристаллов с габитусами $\{225\}$, хорошо известный $[113]$ для случая мартенсита охлаждения.

2. Наблюдаемое смещение центров распределения ориентировок габитусных плоскостей кристаллов мартенсита систем Fe-C к полюсам $\langle 259 \rangle$ в отличие от $\langle 3\ 10\ 15 \rangle$ для систем Fe-Ni получает естественную интерпретацию, как следствие модификации 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. При этом весьма перспективна интерпретация возникновения ряда новых центров как следствия контактного взаимодействия (пересечения) пластинчатых областей двойникового аустенита.

4. Впервые установлено, что в рамках динамического подхода для γ - α мартенситного превращения возможен механизм кооперативной перестройки, связанный с наибо́льшей трансформацией не только плоскостей $\{110\}$ аустенита, ведущей к материальным ориентационным соотношениям, близким к соотношениям Нишиямы, но и плоскостей $\{111\}$ аустенита. Эта возможность продемонстрирована для анизотропного аустенита с реалистичными значениями упругих модулей.

5. Анализ, проведенный в данной работе и в [129, 137], показывает, что образование реек и субреек в макропластине бейнитного феррита может быть согласовано с бездиффузионным механизмом их роста.

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, что подтверждается совпадением габитусов после перехода от кристаллографического базиса двойникового аустенита к базису исходного аустенита.

7. В рамках динамической теории формирование кристаллов ε -мартенсита с габитусами $\{3\ 3\ 4\}_\alpha$ и $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ трактуется как следствие быстрой

перестройки плоскости $\{1\bar{1}0\}_\alpha$. Кристаллам с указанными габитусами сопоставляются ДЦЗ, содержащие в качестве основных сегментов, линии $\Lambda \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_\alpha$.

8. 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. 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. Отбор направлений волновых нормалей, управляющих перестройкой волн, обусловлен экстремумом деформации сжатия упругого поля ДЦЗ (соответствующие максимумы деформаций растяжения находятся в близком угловом диапазоне).

Касаясь перспектив ближайших исследований, отметим следующее.

1. Наблюдаемая бимодальная композиция реек и субреек в составе макропластины бейнитного феррита согласуется в целом с динамической теорией формирования мартенситных кристаллов. Следует отметить, что требуется продолжение тщательного анализа строения макропластин бейнита для уточнения причин появления дополнительных субреек с габитусами $(hh\ell)_\gamma$ при $h > \ell$.

2. Целесообразно провести определение эффективной скорости образования макропластины бейнита и временных интервалов между последовательными актами возникновения реек для дополнения результатов исследований морфологии, что принципиально важно для

установления физических механизмов формирования бейнитного феррита в свете двух конкурирующих гипотез.

3. Формирование в титане кристаллов с ориентировками габитусов $\{443\}_\alpha$ требует отдельного исследования, а именно: с позиций динамической теории мартенситных превращений целесообразно рассмотреть возможность образования таких кристаллов в областях аустенита с двойниковой по отношению к исходной ориентации решетки.

Автор хотел бы выразить искреннюю благодарность всем коллегам по работе и особенно Вере Геннадиевне Чащиной и Михаилу Петровичу Кащенко за конструктивное и эффективное сотрудничество на всех этапах выполнения работы, а также за безграничное терпение.

Список сокращений

БП	Ближний порядок
ГП	Габитусная плоскость
ГПУ	Гексагональная плотноупакованная (решетка)
ГЦК	Гранецентрированная кубическая (решетка)
ДП	Дальний порядок
ДЦЗ	Дислокационный центр зарождения
МД	Мартенсит деформации
МК	Мартенситный кристалл
МН	Мартенсит напряжения
МО	Мартенсит охлаждения
МОС	Материальные ориентационные соотношения
МП	Мартенситное превращение
НВС	Начальное возбужденное состояние
ОИФР	Обобщенный источник Франка – Рида
ООП	Объектно-ориентированное программирование
ОС	Ориентационные соотношения
ОЦК	Объемно центрированная кубическая (решетка)
ОЦТ	Объемно центрированная тетрагональная (решетка)
СС	Слоистая структура
СУБД	Система управления базой данных
УВП	Управляющий волновой процесс
ЦЗ	Центр зарождения
ЦСН	Цилиндрическая система наблюдения

Список литературы

1. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – 240с.
2. Изюмов, Ю.А. Фазовые переходы и симметрия кристаллов / Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников. – М.: Наука, 1984. – 248с.
3. Курдюмов, Г.В. Явления закалки и отпуска стали / Г.В. Курдюмов. – М.: Металлургиздат, 1960. – 64с.
4. Бернштейн, М.Л. Термомеханическая обработка стали / М.Л. Бернштейн, В.А. Займовский, М.Л.Капуткина. – М.: Металлургия, 1983. – 480с.
5. Кристиан, Д. Теория превращения в металлах и сплавах. Т.1 / Д. Кристиан. – М.: Мир, 1978. – 808с.
6. Уманский, Я.С. Физика металлов / Я.С. Уманский, Ю.А.Скаков. – М.: Атомиздат, 1960. – 352с.
7. Лысак, А.И. Физические основы термической обработки стали / А.И. Лысак, Б.И. Николин. – Киев: Техника, 1975. – 304с.
8. Кривоглаз, М.А. Закалка стали в магнитном поле / М.А. Кривоглаз, В.Д. Садовский, Л.В. Смирнов и др. – М.: Наука, 1977. – 120с.
9. Кауфман, Л. Термодинамика и кинетика мартенситных превращений / Л. Кауфман, М. Коэн. // Успехи физики металлов. – М.: Металлургиздат, 1961. – Т.IV. – С. 192–298.
10. Ройтбурд, А.Л. Современное состояние теории мартенситных превращений / А.Л. Ройтбурд // Несовершенства

- кристаллического строения и мартенситные превращения. – М.: Наука, 1972. – С. 7–32.
11. Ройтбурд, А.Л. Мартенситные превращения / А.Л. Ройтбурд, Э.П. Эстрин // Итоги науки и техники. Metallovedenie i termicheskaya obrabotka. – М.: ВИНТИ, 1968. – С. 55; 1970. – С. 5–102.
 12. Кащенко, М. П. Волновая модель роста мартенсита при γ - α превращении в сплавах на основе железа / М. П. Кащенко. – Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. – 224с.
 13. Bunshah, R.E. Rate of propagation of martensite / R.E. Bunshah, R.F. Mehl // Trans. AIME. – 1953. – V.197. – P. 1251–1258.
 14. Mukerjee, K. On the dynamics of martensitic transformation / K. Mukerjee // Trans. AIME. – 1968. – V.242. – P. 1494–1501.
 15. Robin, M. Etude par amplification electronique rapid de la propagation de la martensite dans un aliage ferrum-nicel / M. Robin, P.F. Gobin // Scripta Metall. – 1977. –V.11. – P. 669–674.
 16. Robin, M. Electrical emission associated with the martensitic burst of Fe-Ni alloy / M. Robin, G. Lormand, P.F. Gobin // J.Phys. (Fr). – 1982. – V.43, №12 Suppl. – P. 485–490.
 17. Локшин, Ф.Л. Скорость мартенситного превращения / Ф.Л. Локшин // Научные доклады высшей школы. – М.: Metallurgiya, 1958. – №2. – С. 205–208.
 18. Локшин, Ф.Л. Динамическая теория мартенситного превращения / Ф.Л. Локшин // Тр. Новочеркас. полит. Института. – 1957. – Т.71/85. – 150с.

19. Takashima, K. The propagation velocity of the martensitic transformation in 304 stainless steel / K. Takashima, Y. Higo, S. Nunomura // *Phil. Mag. A.* – 1984. – V.49, №2. – P. 231–241.
20. Кашенко, М.П. Колебательные аналоги деформации Бейна и морфология мартенсита в твердых растворах систем $\gamma(\text{Fe-Ni})$ / М.П. Кашенко, Р.И. Минц // *ФТТ.* – 1977. – Т.19, вып.2. – С. 329–334.
21. Верещагин, В.П. Модельные габитусные плоскости в обобщенной волновой модели роста мартенсита / В.П. Верещагин, М.П. Кашенко, Н.В. Аристова // *Прогнозирование механического поведения материалов: труды XXV Всесоюзного семинара «Актуальные проблемы прочности».* – Новгород, 1991. – С. 6–9.
22. Кашенко, М.П. Центры зарождения и волновые схемы роста мартенсита в сплавах железа / М.П. Кашенко, В.П. Верещагин // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 1989. – Т.32, №8. – С. 16–20.
23. Кашенко, М.П. Учет упругого поля прямолинейной дислокации в рамках волнового описания роста мартенсита / М.П. Кашенко, В.П. Верещагин // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 1989. – Т.32, №8. С. 20–23
24. Верещагин, В.П. Учет особенностей упругого поля дислокационного центра зарождения в волновой модели роста кристалла α -мартенсита в сплавах железа / В.П. Верещагин, С.М. Кашенко, М.П. Кашенко // *Новые методы в физике и механике деформируемого твердого тела.* – Томск: Изд-во Томского ун-та, 1990. – Ч.1. – С. 136–143.

25. Верещагин, В.П. Дислокационные центры зарождения α -мартенсита и ориентационные соотношения при γ - α превращении в сплавах железа / В.П. Верещагин, М.П. Кащенко // ФТТ. – 1991. – Т.33, вып.5. – С. 1605–1607.
26. Верещагин, В.П. Дислокационные центры зарождения тонкопластинчатого α -мартенсита в сплавах железа / В.П. Верещагин, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1991. – Т.34, №9. – С. 79–83.
27. Верещагин, В.П. Волновая природа зарождения и роста α -мартенсита в сплавах железа / В.П. Верещагин, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко // Сильно возбужденные состояния в кристаллах: сборник трудов Томского МФПМ. – Томск: Изд-во Томского науч. центра СО АН СССР, 1991. – С. 75–89.
28. Верещагин, В.П. Обобщение волновой модели роста кристалла α -мартенсита в сплавах железа / В.П. Верещагин, М.П. Кащенко // Прогнозирование механического поведения материалов. – Новгород, 1991. – С. 1–5.
29. Коновалов, С.В. Центры зарождения и преимущественные ориентировки мартенситных кристаллов при специальной геометрии охлаждения монокристаллов аустенита / С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская, М.П. Кащенко // ЖТФ. – 1996. – Т.66, вып.11. – С. 177–181.
30. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения при обратном α - γ мартенситном превращении в сплавах железа / М.П. Кащенко, В.П. Верещагин, Н.В. Аристова // ФММ. – 1993. – Т.75, №2. – С. 38–43.

31. Алексина, И.В. Вероятные дислокационные центры зарождения мартенсита в системах Cu-Zn, Ti-Ni, Ti-Ni-Cu: дис. ... канд. физ.-мат. наук / И.В. Алексина. – Екатеринбург, 1997. – 146с.
32. Аристова, Н.В. Роль фактора анизотропии в отборе центра зарождения мартенсита B19 в сплаве Ti-Ni-Cu / Аристова Н.В., Алексина И.В., Кащенко М.П. // ФММ. – 1994. – Т.77, №1. – С. 146–150.
33. Алексина И.В. Дислокационные центры зарождения и пирамидальная морфология мартенсита в Ti-Ni-Cu / И.В. Алексина, С.М. Кащенко, М.П. Кащенко // Функционально – механические свойства материалов и их компьютерное конструирование / под редакцией В.А. Лихачева // Материалы XXIX Межреспубликанского семинара «Актуальные проблемы прочности» 15-18 июня 1993г. – Псков, 1993. – С. 545–548.
34. Alexina, I.V. The dislocation nucleation centres at B2-B19 martensitic transformation in Ti-Ni-Cu alloy / I.V. Alexina, N.V. Aristova, V.V. Letuchev, M.P. Kashchenko // Shape memory International academic publishers. – Beijing, China, 1994. – P. 65–69.
35. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения при B2-B19 мартенситном превращении в никелиде титана / М.П. Кащенко, И.В. Алексина, В.В. Летучев, А.В. Нефедов // ФММ. – 1995. – Т.80, №6. – С. 10–15.
36. Letuchev, V.V. Conception of New Phase Dislocation-Based Nucleation at Reconstructive Martensitic Transformations / V.V. Letuchev, V.P. Vereshchagin, I.V. Alexina, M.P. Kashchenko // Journal de Physique IV, Colloque C8. – 1995. – Vol.5.

37. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения α -мартенсита и парные сочленения кристаллов тонкопластинчатого мартенсита / М.П. Кащенко, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1994. – Т.37, №6. – С. 64–67.
38. Кащенко, М.П. Дислокационные центры зарождения α -мартенсита и парные сочленения кристаллов мартенсита с габитусами $\{hkl\}$ / М.П. Кащенко, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1994. – Т.37, №4. – С. 67–70.
39. Верещагин, В.П. Идентификация дефектов, необходимых для реализации многокристалльных группировок пакетного мартенсита / В.П. Верещагин, М.П. Кащенко, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // ФММ. – 1994. – Т.77, №4. – С. 173–174.
40. Кащенко, М.П. Модель формирования пакетного мартенсита / М.П. Кащенко, В.В. Летучев, С.В. Коновалов, Т.Н. Яблонская // ФММ. – 1997. – Т.83, №3. – С. 43–52.
41. Кащенко, М.П. Динамическая модель формирования двойниковой структуры мартенсита / М.П. Кащенко, С.В. Иванов, В.Г. Чашина // Эволюция дефектных структур в конденсированных средах: тезисы докладов. – Барнаул: АГТУ, 1998. – С. 26–27.
42. Кащенко, М.П. Динамический механизм двойникового мартенситного кристалла / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина // XXXV семинар «Актуальные проблемы прочности». Механизмы деформации и разрушения перспективных материалов: сборник трудов. – Псков: ППИ СПбГТУ, 1999. – С. 14–19.

43. Kashchenko, M.P. The description of twinning in the wave model of martensite growth / M.P. Kashchenko, S.V. Ivanov, A.V. Nefedov, V.V. Letuchev, V.G. Chashchina // ICSSPT (PTM'99) Japan Final Program and Abstracts. JIMIC – 3. – Kyoto, 1999. – P. 206.
44. Кащенко, М.П. Влияние неоднородности фронта управляющего волнового процесса на распределение двойников превращения в кристаллах мартенсита с габитусами типа (259) – (3 10 15) / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // XXXVI международный семинар «Актуальные проблемы прочности». Физика процессов деформации и разрушения и прогнозирование механического поведения материалов: сборник трудов. – Витебск: ВГТУ, 2000. – Ч. I. – С. 81–86.
45. Чащина, В.Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига: дис. ... канд. физ.-мат. наук / В.Г. Чащина. – Екатеринбург, 2000. – 139с.
46. Кащенко, М.П. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов при мартенситных превращениях / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина, С.В. Вихарев, С.В. Иванов // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. 10-12 апреля 2007г.: сборник материалов. – СПб, 2007. – Ч. II. – С. 278–280.
47. Кащенко, М.П. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при γ - α превращении в сплавах железа / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина. – Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун – т., 2009. – 98с.
48. Кащенко, М.П. Кристаллодинамическая модель отбора ориентации границ двойниковой структуры при формировании мартенситного кристалла / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина, С.В.

- Вихарев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т.52, №8, С. 94–95.
49. Кащенко, М.П. Соотношение компонентов слоистой структуры, формируемой управляющим волновым процессом в метастабильно устойчивом аустените / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина, С.В. Вихарев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т.52, №9, С. 96–97.
50. Кащенко, М.П. Основные принципы динамической теории реконструктивных мартенситных превращений / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2006. – Т.3, №4. – С. 67–70.
51. Kashchenko, M.P. The material orientation relationship for the bcc-hcp transformation [Электронный ресурс] / M.P. Kashchenko, V.G. Chashchina // Режим доступа к журналу: <http://arxiv.org/abs/0707.1938v1>. – 13 Jul 2007.
52. Кащенко, М.П. Управляющий волновой процесс и материальные ориентационные соотношения при реконструктивных мартенситных превращениях / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина // XLVI Международная конференции «Актуальные проблемы прочности», 15-17 октября 2007г., Витебск, Беларусь. Ч.2: материалы конференции. – Витебск: ВГТУ, 2007. – С. 99–104.
53. Чашина, В.Г. Зависимость относительного изменения объема при ОЦК-ГПУ мартенситном превращении от упругих свойств исходной фазы / В.Г. Чашина // XIX Уральская школа металловедов – термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов», посвященная 100-летию со дня рождения академика В.Д. Садовского, Екатеринбург, 4-8

февраля 2008г.: сборник материалов. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2008. – С. 152.

54. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. I. Управляющий волновой процесс / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ. – 2008. – Т.105, №6. – С. 571–577.
55. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. II. Морфология мартенсита / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ. – 2008. – Т.106, №1. – С. 16–25.
56. Кащенко, М.П. Механизм ГЦК–ОЦК мартенситного превращения с наибоыстрейшей перестройкой плотноупакованных плоскостей. I. Соотношение параметров решеток и габитусные плоскости / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т.51, № 7. – С. 3–7.
57. Кащенко, М.П. Механизм ГЦК–ОЦК мартенситного превращения с наибоыстрейшей перестройкой плотноупакованных плоскостей. II. Ориентационные соотношения / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т.51, № 11. – С. 42–47.
58. Чащина, В.Г. Мартенситное превращение при наибоыстрейшей перестройке $\{110\}_\gamma$ плоскостей / В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – Т.52, № 7. – С. 95–98.
59. Кащенко, М.П. Критический размер зерна при зарождении кристалла мартенсита в упругом поле дислокации / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // XIX Уральская школа металловедов – термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов», посвященная 100-летию со дня рождения

- академика В.Д. Садовского, Екатеринбург, 4-8 февраля 2008г.: сборник материалов. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2008. – С. 42.
60. Кашенко, М.П. Зависимость температуры начала мартенситного превращения от размера зерна / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина // XLVII Международная конференции «Актуальные проблемы прочности», 1-5 июля 2008г.: материалы конференции. – Н. Новгород, 2008. – Ч.1. – С. 237–239.
61. Кашенко, М.П. Зависимость температуры начала γ - α мартенситного превращения от размера зерна / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, № 1. – С. 37–45.
62. Кашенко, М.П. Проблема критического размера зерна при $\gamma \rightarrow \alpha$ мартенситном превращении. Термодинамический анализ с учетом пространственных масштабов, характерных для стадии зарождения мартенсита / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т.13, №1. – С. 29–35.
63. Кашенко, М.П. Расчет доли мартенсита при атермической макрокинетике / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина, С.В. Коновалов // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2010. – №9. – С. 44–48.
64. Кашенко, М.П. Динамическая модель γ - α мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина. – М.: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. – 133с.

65. Кашенко, М.П. Динамическая модель сверхзвукового роста мартенситных кристаллов / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина // УФН. – 2011. – Т.181, №4. – С. 345–364.
66. Кашенко, М.П. Формирование мартенситных кристаллов в предельном случае сверхзвуковой скорости роста / М.П. Кашенко, В.Г. Чащина // Письма о материалах. – 2011. – Т.1. – С. 7–15.
67. Wechsler, M.S. On the theory of the formation of martensite / M.S. Wechsler, D.S. Lieberman, T.A. Read // Journal of Metals. – 1953, november. – P. 1503–1515.
68. Bowles, J.S. The crystallography of martensite transformations I / J.S. Bowles, J.K. Mackenzie // Acta Metallurgica. – 1954. – V.2, №1. – P. 129–137.
69. Bowles, J.S. The crystallography of martensite transformations II / J.S. Bowles, J.K. Mackenzie // Acta Metallurgica. – 1954. – V.2, №1. – P. 138–147.
70. Bowles, J.S. The crystallography of martensite transformations III. Face-centered cubic to body-centered tetragonal transformations / J.S. Bowles, J.K. Mackenzie // Acta Metallurgica. – 1954. – V.2, № 3. – P. 224–234.
71. Криземент, О. К термодинамике аустенитно-мартенситного превращения / О. Криземент, З. Гудремон, Ф. Вефер // Фазовые превращения в стали: сборник статей. – М.: Металлургиздат, 1961. – С. 72–89.
72. Могутнов, Б.М., Термодинамика железоуглеродистых сплавов / Б.М. Могутнов, И.А.Томилин, Л.А.Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – С. 263–271.

73. Ройтбурд, А.Л. Теория формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии / А.Л. Ройтбурд // УФН. – 1974. – Т.113, №1. – С. 69–104.
74. Петров, Ю.Н. Дефекты и бездиффузионное превращение в стали / Ю.Н. Петров. – Киев: Наукова думка, 1978. – 262с.
75. Паташинский, А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов / А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. – М.: Наука, 1982. – 382с.
76. Falk, F. Ginzburg-Landau theory of static domain walls in shape-memory alloys / F. Falk // Z. Phys. B. Condensed Matter. – 1984. – V.54. – P. 177.
77. Falk, F. Landau theory and solitary waves in shape – memory alloys / F. Falk // Z. Phys. B. Condensed Matter. – 1984. – V.54. – P. 159–167.
78. Barsch G.R. Dynamical of twin boundaries in martensites / G.R. Barsch, B. Horovitz, J.A. Krumhansl // Phys. Rev. Letters. – 1987. – V.59, № 11. – P. 1251–1254.
79. Bales, G.S. Interfacial dynamics at a first-order phase transition involving strain: dynamical twin formation / G.S. Bales, R.J. Gooding // Phys. Rev. Letters. – 1991. – V.67, №24. – P. 3412–3415.
80. Saxena, A. A model of shape memory materials with hierarchical twinning: statics and dynamics / A. Saxena, S.R. Shenoy, A.R. Bishop, T. Lookman // J.Phys. (Fr). – 1995. –V.5, №12 – P. 125–130.
81. Rasmussen, K.O. Three-dimensional elastic compatibility: twinning in martensites [Электронный ресурс] / К.О. Rasmussen, Т. Lookman, А. Saxena, А.Р. Bishop, R.C. Albers. – Режим доступа к

- журналу: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0001410v1>. – 28 Jan 2000. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.87.055704.
82. Reid, A.C.E. Hydrodynamic description of elastic solids with open boundary conditions undergoing a phase transition / A.C.E. Reid, R.J. Gooding // Phys. Rev. B. – 1994. – V.50, №6. – P. 3558–3602.
83. Rao, M. Droplet fluctuations in the morphology and kinetics of martensites / M. Rao, S. Sengupta // Phys. Rev. Letters. – 1997. – V.78, №11. – P. 2168–2171.
84. Theil, F. A study of a hamiltonian model for martensitic phase transformations including microkinetic energy [Электронный ресурс] / F. Theil, V.I. Levitas // Режим доступа к журналу: <http://arxiv.org/abs/patt-sol/9811006v1>. – 19 Nov 1998.
85. Fischer, F.D. Mechanics and phase transformation / F.D. Fischer // Proceedings of EUROMAT 2000. – Amsterdam: Elsevier science Ltd. – VI: Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage. – 2000. – P. 41–52.
86. Wang, L.X. Thermo-Mechanical Wave Propagation In Shape Memory Alloy Rod With Phase Transformations [Электронный ресурс] / L.X. Wang, R.V.N. Melnik // Режим доступа к журналу: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0702689v1>. – 28 Feb 2007.
87. Barsch, G.R. Nonlinear and nonlocal continuum model of transformation precursors in martensites / G.R. Barsch, J.A. Krumhansl // Metall. Trans. A. – 1988. – V.19A. – P. 761–775.
88. Isyumov, Y.A. Fenomenological theory of martensitic and reconstructive phase transitions / Y.A. Isyumov, V.M. Laptev, V.N. Syromyatnicov // Phase transitions. – 1994. – V.49. – P. 1–55.

89. Van Tendeloo, G. Modulated microstructures in β Cu – Zn – Al and the premartensitic phenomenon / G. Van Tendeloo, M. Chandrasekaran, F.C. Lovey // Proceedings ICOMAT. – The Japan Institute of metals. – 1986. – P. 868–873.
90. Gröger, R. Defect-induced incompatibility of elastic strains: dislocations within the Landau theory of martensitic phase transformations [электронный ресурс] / R. Gröger, T. Lookman, A. Saxena // Режим доступа к журналу: <http://arxiv.org/abs/0806.4564v2>. – 17 Jul 2008. – DOI: 10.1103/PhysRevB.78.184101.
91. Meyer, R. Molecular dynamics Study of Iron-Nickel Alloys / R. Meyer, P. Entel. – Edited by A. Planes, J. Ortín and L. Mañosa // IV European Symposium on martensitic transformations. – Barcelona, 1994. – P. 123–128.
92. Meyer, R. – Lattice Dynamics of Martensitic Transformations Examined by Atomistic Simulations [электронный ресурс] / R. Meyer, P. Entel // Режим доступа к журналу: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/9706248v1>. – 24 Jun 1997.
93. Harren, S.V. Shear band formation in plane strain compression / S.V. Harren, H.E. Deve, R.S. Asaro // Acta Metallurgica. – 1988. – V.36, № 9. – P. 2435–2480.
94. Кашенко, М.П. Ориентировка границ плоских полос сдвига в монокристаллах Ni_3Fe / М.П. Кашенко, Л.А. Теплякова, Д.В. Лычагин, А.В. Пауль // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1997. – Т.40, №8. – С. 62–67.

95. Конева, Н.А. Полосовая субструктура в ГЦК-однофазных сплавах / Н.А. Конева, Д.В. Лычагин, Л.А. Теплякова, Л.И. Тришкина, Э.В. Козлов // Дисклинации и ротационная деформация твердых тел: сборник научных трудов. – Л.: ФТИ, 1988. – С. 103–113.
96. Кащенко, М.П. Механизм формирования полос сдвига с $(hh\ell)$ ориентировкой границ в монокристаллах с ГЦК решеткой / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1997. – Т.40, №5. – С. 40–49.
97. Кащенко, М.П. Формирование плоских полос сдвига с границами $\{123\}$ в ГЦК монокристаллах / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова, О.А. Соколова, С.В. Коновалов // ФММ. – 1998. – Т.86, №1. – С. 43–47.
98. Куницына, Т.С. Эволюция дислокационной структуры, упрочнение и разрушение сплавов / Т.С. Куницына, А.В. Пауль, Л.А. Теплякова, Н.А. Конева. – Томск: ТГУ, 1992. – С. 13–24.
99. Владимиров, В.И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов. – Л.: Наука, 1986. – 224с.
100. Теодосиу, К. Упругие модели дефектов в кристаллах / К. Теодосиу. – М.: Мир, 1985. – 352с.
101. 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.
102. Архангельский, А.Я. Программирование в C++Builder 5 / А.Я. Архангельский. – М.: БИНОМ, 2000. – 1152с.

103. Страуструп, Б. Язык программирования C++: перевод с англ. / Б. Страуструп. – 3-е изд. – СПб.; М.: Невский диалект – БИНОМ, 1999. – 991с.
104. Кащенко, М.П. Наблюдаемые ориентировки границ полос сдвига и устойчивость кристонов / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова, К.Н. Джемилев, В.Г. Чашина // XXXV семинар «Актуальные проблемы прочности»: сборник трудов. – Псков, 1999. – С. 20–23.
105. Кащенко, М.П. Источники устойчивых носителей сдвига в полосах сдвига с границами $\{hh\ell\}$ при $h>\ell$ в ГЦК – кристаллах / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина // V Межгосударственный семинар «Структурные основы модификации материалов»: тезисы докладов. – Обнинск, 1999. – С. 83.
106. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600с.
107. Новиков, С.П. Солитоны / С.П. Новиков, С.В. Манаков. – М.: Мир, 1983. – 408с.
108. Korbel, A. Microscopic versus macroscopic aspect of shear band deformation / A. Korbel, P. Martin // Acta Metallurgica. – 1986. – V.34, №10. – P. 1905–1909.
109. Кащенко, М.П. Модель образования полос макросдвига и мартенсита деформации с границами $(hh\ell)$ / М.П. Кащенко, В.В. Летучев, Л.А. Теплякова, Т.Н. Яблонская // ФММ. – 1996. – Т.82, №4. – С. 10–21.
110. 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.
111. Теплякова, Л.А. Эволюция дислокационной структуры и стадии деформационного упрочнения монокристаллов сплава Ni_3Fe / Л.А. Теплякова, Н.А. Конева, Д.В. Лычагин, Л.И. Тришкина, Э.В. Козлов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1988. – Т.31, №2. – С. 18–24.
112. Кащенко, М.П. Описание габитусных плоскостей $(hh\ell)$ в волновых моделях роста мартенсита для сплавов на основе меди, золота и железа / М.П. Кащенко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 1982. – Т.25, №3. – С. 41–43.
113. Изотов, В.И. Структура закаленной конструкционной стали. Состояние перегрева / В.И. Изотов // ФММ. – 1975. – Т.39, №4. – С. 801–814.
114. 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: ППИ СПбГТУ, 1999. – С. 20–23.
115. Кащенко, М.П. Критическое напряжение генерации кристонов в кристаллах с суперрешеткой при учете анизотропии модуля сдвига / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Научные труды III Международного семинара «Современные проблемы прочности» им. В.А. Лихачева. – Новгород: НовГУ, 1999. – Т.1. – С. 141–144.

116. Кащенко, М.П. Условия генерации кристонов и интерпретация кривой σ - ϵ для монокристаллов Ni_3Fe / М.П. Кащенко, Л.А. Теплякова, К.Н. Джемилев, В.Г. Чашина // ФММ. – 1999. – Т.88, №3. – С. 17–21.
117. Джемилев, К.Н. Инициация γ - α мартенситного превращения мезоскопическим упругим полем кристона / К.Н. Джемилев, М.П. Кащенко // Всероссийская конференция «Дефекты структуры и прочность кристаллов»: тезисы докладов. – Черноголовка: СОНГ, 2002. – С. 113.
118. Джемилев, К.Н. Инициация формирования ансамблей кристаллов мартенсита кристонным носителем сдвига / К.Н. Джемилев, М.П. Кащенко // XVI Уральская школа металловедов – термистов «Проблемы физического металловедения перспективных материалов», Уфа: тезисы докладов. – Екатеринбург: Наука-Сервис, 2002. – С. 7.
119. 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.
120. Greninger, A.V. The mechanism of martensite formation / A.V. Greninger, A.R. Troiano // Metals Transactions. – 1949. V.185, September. – P. 590–598.
121. Кащенко, М.П. Волновая модель роста мартенсита при γ - α превращении в сплавах на основе железа / М.П. Кащенко. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: НИЦ «Регулярная и хаотическая

- динамика»; Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. – 280с.
122. Televich, R.V. Crystallogeometry of the iron-nikel martensite formation in the deformed γ -phase / R.V. Televich, E.V. Pereloma, S.Z. Gornjak // Всесоюзная конференция по мартенситным превращениям в твердом теле: сборник докладов. – Киев: Ин-т металлофизики АН Украины, 1992. – С. 90–93.
123. Haush, G. Single crystalline elastic constants of ferromagnetic centered cubic Fe-Ni invar alloys / G. Haush, H. Warlimont // Acta Metallurgica. – 1973. – V.21, №4. – P. 400–414.
124. 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.
125. Федоров, Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах / Ф.И. Федоров. – М.: Наука, 1965. – 388 с.
126. Блантер, М.Е. Фазовые превращения при термической обработке стали / М.Е. Блантер. – М.: Metallurgizdat, 1962. – 270с.
127. Bhadeshia, H.K.D.H. Bainite in steels / H.K.D.H. Bhadeshia. – 2nd ed. – London: University Press. Cambridge, 2001. – 454p.
128. Счастливец, В.М. Стальные монокристаллы / В.М. Счастливец, Д.А. Родионов. – Екатеринбург: УрО РАН, 1996. – 275с.
129. Кащенко, М.П. Формирование бейнитного феррита с позиций динамической теории роста мартенситных кристаллов / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина // XX Петербургские чтения по проблемам

- прочности, 10-12 апреля 2012г.: сборник материалов. – СПб., 2012. – Ч.2. – С. 77–79.
130. Sandvik, B.P.J. The bainite reaction in Fe-Si-C Alloys: The primary stage / B.P.J. Sandvik // Metall. Trans. A. – 1982. – V.13. – P. 777–787.
131. Кащенко, М.П. Зарождение кристаллов α – мартенсита с габитусами (hh \bar{l}) в упругих полях дислокационных петель / М.П. Кащенко, А.В. Нефедов, В.П. Верещагин, В.В. Летучев // ФММ. – 1998. – Т.85, №4. – С. 25–39.
132. Sandvic, B.P.I. / B.P.I. Sandvic, C.M. Wayman // J. Phys. (France) Suppl. – 1982. – V.43, №12. – P. 557–562.
133. Inamura, T. Crystallography of nanometre-sized α' -martensite formed at intersections of mechanical γ -twins in an austenitic stainless steel / T. Inamura, K. Takashima, Y. Higo // Philosophical magazine. – 2003. – V.83, №8. – P. 935–954.
134. Мирзаев, Д.А. Новая концепция бейнитного превращения как развитие идей В.Д. Садовского / Д.А. Мирзаев, В.М. Счастливец, И.Л. Яковлева, К.Ю. Окишев // Развитие идей академика В.Д. Садовского: сборник трудов. – Екатеринбург, 2008. – С. 99–122.
135. Kashchenko, M.P. Cryston model of α strain induced martensite / M.P. Kashchenko, A.G. Semenovih, V.G. Chashchina // J. Phys. IV France. – 2003. – V.112. – P. 147–150.
136. Кащенко, М.П. Кристонная модель формирования полос сдвига в кубических кристаллах с кристаллографической ориентировкой границ общего типа / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина, А.Г.

- Семеновых // Физическая мезомеханика. – 2003. – Т.6, №1. – С. 95–122.
137. Кащенко, М.П. Оценка эффективной скорости роста пластины бейнитного феррита в динамической теории / М.П. Кащенко, В.Г. Чащина // ФММ. – 2013. – Т.114, №3. С. 290–296.
138. 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.
139. 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.
140. 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.
141. Кащенко, М.П. Связь различных габитусов и вариантов ориентационных соотношений при γ - α мартенситном превращении в динамической теории / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Международный научно-технический

- семинар Бернштейновские чтения по термомеханической обработке металлических материалов, 26-28 октября 2011г.: тезисы докладов. – М.: Московский институт стали и сплавов, 2011. – С. 39.
142. Кащенко, М.П. Вероятные дислокационные центры зарождения кристаллов α -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.
143. Кащенко, М.П. Вероятные дислокационные центры зарождения кристаллов α – 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.
144. Кащенко, М.П. Связь различных габитусов с вариантами ориентационных соотношений при γ - α 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.
145. 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.

146. 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.
147. 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.
148. Гюнтер, В.Э. Эффекты памяти формы и их применение в медицине / В.Э. Гюнтер, В.И. Итин, Л.А. Монасевич [и др]. – Новосибирск: Наука, 1992. – 742с.
149. Simmons, G. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties / G.Simmons, H.Wang. – Cambridge. MA: MIT Press, 1971.
150. Билби, Б.А. Мартенситные превращения / Б.А. Билби, И.В. Христиан // *УФН*. – 1960. – Т.70, №3. – С. 515–564.
151. Mendelson, S. // *Titanium Science and Technology*. – New-York London: Plenum Press, 1973. – V.3. – P. 1585–1596.
152. 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.

153. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика образования ϵ -мартенсита с габитусами $\{334\}_\alpha$ в титане / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, №9. – С. 67–70.
154. Кащенко, М.П. Кристаллодинамика образования ϵ – мартенсита с габитусами $\{8\ 9\ 12\}_\alpha$ в титане / М.П. Кащенко, К.Н. Джемилев, В.Г. Чащина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, №10. – С. 115–117.