

УДК 536.71 : 539.37

ПОЛЕ СПОНТАННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ ПРИ МАРТЕНСИТНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

Ю. А. Изюмов, В. М. Лаптев, В. Н. Сыромятников

Исследуются мартенситные фазовые переходы из кубической решетки методами теории Ландау с использованием компонент тензора деформаций в качестве параметра порядка. Показано, что в задаче о неоднородном распределении поля деформаций необходимо при минимизации энергии учитывать уравнения совместности и полный набор компонент тензора деформации, а не только те из них, которые образуют параметр порядка. Для двух видов неустойчивости исходной кубической решетки (по отношению к тетрагональной или сдвиговой деформации) качественно исследованы неоднородные решения нелинейных уравнений минимизации. В случае тетрагональной неустойчивости они описывают плоские локализованные объекты в предмартенситной области, ориентированные перпендикулярно диагонали грани куба. Внутри мартенситной фазы рассчитаны положения и форма доменных границ для кристаллов с тетрагональной и сдвиговой неустойчивостями.

Структурные фазовые переходы, в которых спонтанная деформация играет определяющую роль, проявляют характерные аномалии физических свойств, что и является поводом для выделения таких переходов в отдельный класс мартенситных фазовых переходов [1]. К мартенситным переходам могут относиться как реконструктивные переходы, например переходы из ОЦК в ГЦК решетку в железе и его сплавах, так и непрерывные переходы, например переход из кубической в тетрагональную фазу в соединениях со структурой А-15.

В обоих случаях характерным является существование широкой (по температуре) предпереходной области, когда в исходной высокотемпературной фазе, называемой аустенитом, появляются следы неустойчивости. В отличие от обычных структурных фазовых переходов второго рода, идущих через механизм мягкой моды, неустойчивость аустенитной фазы проявляется в возникновении квазистатических структурных неоднородностей макромасштаба, наблюдаемых непосредственно или через характерные аномалии диффузного рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов и электронов, появляющегося на совершенных монокристаллах [2, 3].

Поскольку ведущим параметром порядка при мартенситном переходе является деформация, предпереходную область следует рассматривать как аустенит с локализованными областями деформаций, в которых решетка локально изменена в направлении, приближающем ее к мартенситной фазе. Предпереходную область, следовательно, можно описывать с помощью неоднородных решений нелинейных уравнений для параметра порядка, каковым являются компоненты тензора деформации.

В последние годы появился ряд работ [4-6], в которых мартенситные переходы описываются в духе теории фазовых переходов Ландау, использующих разложение свободной энергии по степеням компонент тензора деформации. Солитонным решениям уравнений минимизации энергии сопоставляются локализованные неоднородности аустенитной фазы (интерпретируемые как зародыши мартенсита [4]) или доменные границы в мартенситной фазе [4-6]. Во всех случаях выбирается в качестве параметра порядка только один вид деформации, например для куби-

ческого кристалла — это либо тетрагональная, либо сдвиговая деформация.

При неоднородном распределении деформации следует, однако, иметь в виду, что между производными от компонент тензора деформации имеются определенные связи, описываемые уравнениями совместности [7], которые нужно учитывать при минимизации функционала энергии, зависящей от деформаций. Эти связи приводят к необходимости учитывать все компоненты тензора деформации, а не только те из них, которые образуют ведущий параметр порядка. В данной работе на примере исходной кубической решетки мы покажем, как нужно учитывать уравнения совместности и какие эффекты производят компоненты тензора деформации, не входящие в ведущий параметр порядка, каковым может быть либо тетрагональная, либо сдвиговая деформация.

1. Функционал энергии для фазового перехода из ОЦК решетки

Рассмотрим фазовые переходы из ОЦК решетки, характеризующиеся спонтанными деформациями. В качестве параметров порядка выберем симметризованные комбинации компонент тензора деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}$, преобразующиеся по неприводимым представлениям τ_1, τ_5, τ_7 точечной группы кристалла O_h [8]

$$\left. \begin{aligned} \tau_1 : e_1 &= \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}, \\ \tau_5 : e_2 &= \sqrt{3}(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}), \quad e_3 = 2\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}, \\ \tau_7 : e_4 &= \varepsilon_{xy}, \quad e_5 = \varepsilon_{yz}, \quad e_6 = \varepsilon_{xz}, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

описывающих соответственно объемную, тетрагональную и сдвиговую деформацию куба.

Однородная часть разложения термодинамического потенциала имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi_1 = \frac{1}{V} \int dr \{ & r_1 e_1^2 + r_2 (e_2^2 + e_3^2) + r_3 (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) + v_1 e_3 (e_2^2 - 3e_3^2) + v_2 e_4 e_5 e_6 + \\ & + v_3 [e_3 (2e_4^2 - e_5^2 - e_6^2) + \sqrt{3} (e_5^2 - e_6^2)] + u_1 (e_2^2 + e_3^2)^2 + u_2 (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2)^2 + \\ & + u_3 (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) + u_4 (e_2^2 + e_3^2) (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) \}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь учтен только квадратичный член по объемной деформации e_1 , поскольку e_1 является инвариантом, легко дополнить выражение (2) членами, представляющими произведение e_1 на другие инварианты. Неоднородная часть потенциала Φ_3 содержит шесть низших по производным инвариантов

$$\begin{aligned} \Phi_2 = \frac{1}{V} \int dr \{ & \lambda_1 e_1 \lambda_1 e_1 + \lambda_2 (e_2 \lambda_1 e_2 + e_3 \lambda_1 e_3) + \lambda_3 e_1 (\lambda_2 e_2 + \lambda_3 e_3) + \lambda_4 (e_3 \lambda_3 e_3 - e_2 \lambda_3 e_2 - \\ & - 2e_3 \lambda_3 e_2) + \lambda_5 (e_4 \lambda_1 e_4 + e_5 \lambda_1 e_5 + e_6 \lambda_1 e_6) + \lambda_6 (e_4 \lambda_5 e_6 + e_5 \lambda_6 e_4 + e_6 \lambda_4 e_6) \}. \end{aligned} \quad (3)$$

Дифференциальные операторы

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \\ \lambda_2 &= \sqrt{3} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \quad \lambda_3 = \left(2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \\ \lambda_4 &= \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}, \quad \lambda_5 = \frac{\partial^2}{\partial y \partial z}, \quad \lambda_6 = \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

преобразуются по тем же представлениям, что и величины e_1, \dots, e_6 .

Равновесное распределение поля деформаций отвечает минимуму функционала $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2$, причем для неоднородного решения необходимо учитывать связи между производными от компонент тензора деформации. Эти связи даются уравнениями совместности [7]

$$\sum_{\gamma} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_{\gamma}^2} \varepsilon_{\alpha\beta} - \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\gamma}} \varepsilon_{\gamma\beta} - \frac{\partial^2}{\partial x_{\beta} \partial x_{\gamma}} \varepsilon_{\alpha\gamma} + \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \varepsilon_{\gamma\gamma} \right) = 0, \quad (5)$$

причем в терминах базиса неприводимых представлений они могут быть представлены следующей шестеркой уравнений

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{3} \Delta_1 e_1 - \frac{1}{12} (\Delta_2 e_2 + \Delta_3 e_3) &= \Delta_4 e_4 + \Delta_5 e_5 + \Delta_6 e_6, \\ \Delta_1 e_2 + \Delta_2 e_1 + \Delta_2 e_3 + \Delta_3 e_2 &= 6\sqrt{3} (\Delta_6 e_6 - \Delta_5 e_5), \\ \Delta_1 e_3 + \Delta_3 e_1 + \Delta_2 e_2 - \Delta_3 e_3 &= 6 (\Delta_5 e_5 + \Delta_6 e_6 - 2\Delta_4 e_4), \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta_4 (e_1 + e_3) + (\Delta_1 + \Delta_3) e_4 &= 3 (\Delta_5 e_5 + \Delta_6 e_6), \\ \Delta_5 (2e_1 - e_3 + \sqrt{3} e_2) + (2\Delta_1 - \Delta_3 + \sqrt{3} \Delta_2) e_5 &= 6 (\Delta_4 e_6 + \Delta_6 e_4), \\ \Delta_6 (2e_1 - e_3 - \sqrt{3} e_2) + (2\Delta_1 - \Delta_3 - \sqrt{3} \Delta_2) e_6 &= 6 (\Delta_4 e_5 + \Delta_5 e_4). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Только при выполнении уравнений совместности можно подобрать такое поле смещений, которому отвечает данное поле деформаций. Каждое из трех уравнений (7) преобразованиями симметрии куба может быть сведено друг к другу; то же самое относится к двум последним уравнениям (6). Независимыми уравнениями системы (6) и (7) следует считать три уравнения [7].

Поскольку допустимы только те экстремумы функционала Φ , которые удовлетворяют уравнениям (6) и (7), для получения уравнений, дающих равновесное распределение деформационных полей, необходимо минимизировать функционал

$$\Phi_{\lambda} = \Phi + \frac{1}{V} \int dr \sum_{i=1}^6 \lambda_i(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где $\varphi_i(\mathbf{r})$ соответствует записи каждого из шести уравнений (6) и (7) в виде $\varphi_i(\mathbf{r})=0$, а $\lambda_i(\mathbf{r})$ — соответствующий множитель Лагранжа.

Исследуем ситуации, когда один из трех модулей r_1, r_2, r_3 размягчается, а два других остаются жесткими. Физический смысл имеют для кристалла два случая: $r_2 \rightarrow 0$ (неустойчивость относительно тетрагональной деформации) и $r_3 \rightarrow 0$ (неустойчивость относительно сдвиговой деформации). В каждом случае другие деформации будут хотя и малыми, но конечными, и их связь с мягкой компонентой будет учитываться не только видом функционала Φ , но и уравнениями совместности.

2. Неустойчивость к тетрагональным деформациям

Пусть при $T \rightarrow T_c, r_2 \rightarrow 0$; тогда деформации e_2, e_3 велики, а e_1 и e_4, e_5, e_6 малы в меру малости r_2/r_1 и r_2/r_3 . Вначале рассмотрим предельный случай $r_1, r_3 \rightarrow \infty$, когда

$$e_1 \equiv 0, \quad e_4 = e_5 = e_6 \equiv 0. \quad (9)$$

Уравнения совместности в этом случае сводятся к следующему

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2} e_3 + \sqrt{3} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e_2 = 0, \quad \sqrt{3} \frac{\partial^2}{\partial z^2} e_2 + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) e_3 = 0, \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) e_3 = 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} (\sqrt{3} e_2 - e_3) = 0, \quad \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} (\sqrt{3} e_2 + e_3) = 0, \quad \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} e_3 = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Эта система допускает частные решения, связанные друг с другом преобразованиями кубической симметрии

$$\left. \begin{aligned} 1) e_2 = e_2(x+y), \quad e_3 = \text{const}, \quad 2) e_2 = e_2(x-y), \quad e_3 = \text{const}, \\ 3) e_2 = e_2(z+x), \quad \sqrt{3} e_2 + e_3 = \text{const}, \quad 4) e_2 = e_2(z-x), \quad \sqrt{3} e_2 + e_3 = \text{const}, \\ 5) e_2 = e_2(z+y), \quad \sqrt{3} e_2 - e_3 = \text{const}, \quad 6) e_2 = e_2(z-y), \quad \sqrt{3} e_2 - e_3 = \text{const}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

В силу линейности уравнений (10) полное решение будет суперпозицией этих частных решений.

Посмотрим теперь, к чему приводит учет больших, но конечных модулей r_1 и r_3 . Поскольку деформации e_1 и e_4, e_5, e_6 малы, в выражении Φ_1 оставим лишь квадратичные члены по ним, а в уравнениях совместности учтем факт, что их решение будет близко к решениям (11). Возьмем для определенности первое из решений (11)

$$e_3 = \text{const}, \quad e_2 = e_2(\xi_+) \quad (12)$$

(мы ввели удобные координаты $\xi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm y)$). Близкое решение будет характеризоваться малыми величинами $e_1, e_4, e_5, e_6, \partial e_3/\partial \xi_+, \partial e_2/\partial \xi_-, \partial e_2/\partial z$ порядка $1/\sqrt{r_1}$ и $1/\sqrt{r_3}$. Пренебрегая членами более высокого порядка малости, запишем функционал (8), отвечающий состоянию, близкому к (12) в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda} = \frac{1}{V} \int d\xi_+ d\xi_- dz \left\{ r_2 (e_3^2 + e_3^2) + v_1 e_3 (e_3^2 - 3e_3^2) + u_1 (e_2^2 + e_3^2)^2 + (a_2 + a_4) e_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_+^2} e_2 + \right. \\ \left. + r_1 e_1^2 + r_3 (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) + \eta_1 \frac{\partial}{\partial \xi_+} (e_1 + e_3) + \eta_2 \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{\partial e_2}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial \xi_+} (e_6 - e_5) \right] + \right. \\ \left. + \eta_3 \left[\frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\partial}{\partial r_-} e_2 + \frac{\partial}{\partial \xi_+} (2e_4 + e_3) \right] \right\}. \quad (13) \end{aligned}$$

Здесь η_1, η_2 и η_3 — некоторые комбинации производных по ξ_+ от исходных множителей Лагранжа λ_i , которые могут сейчас рассматриваться как новые множители Лагранжа.

Минимизация Φ_{λ} по малым деформациям дает выражения для них

$$e_1 = \frac{1}{2\xi_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial \xi_+}, \quad e_4 = \frac{1}{r_3} \frac{\partial \eta_3}{\partial \xi_+}, \quad e_5 = -e_6 = \frac{1}{2r_3} \frac{\partial \eta_2}{\partial \xi_+}, \quad (14)$$

а минимизация по e_2 — уравнения вида

$$f(e_2) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{\partial \eta_2}{\partial z} + \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\partial \eta_3}{\partial \xi_-}, \quad (15)$$

$$f(e_2) \equiv (r_2 - 3v_1 e_3 + 2u_1 e_3^2) e_2 + 2u_1 e_3^2 + (a_2 + a_4) \frac{\partial^2 e_2}{\partial \xi_+^2},$$

причем в ведущем порядке e_3 можно считать здесь константой. В том же порядке минимизация по e_3 приводит к уравнению

$$\frac{\partial}{\partial \xi_+} \eta_1 + \frac{\partial}{\partial \xi_+} \eta_3 = 0. \quad (16)$$

Имеем теперь три уравнения совместности, полагая в (13) коэффициенты при η_1, η_2 и η_3 равными нулю. Комбинируя их с соотношениями (14) и (16), получим выражения для производных от главной деформации по дополнительным координатам

$$\frac{\partial}{\partial z} e_2 = -\frac{\sqrt{6}}{r_3} \frac{\partial^2}{\partial \xi_+^2} \eta_2, \quad \frac{\partial}{\partial \xi_-} e_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}r} \frac{\partial^2}{\partial \xi_+^2} \eta_3, \quad (17)$$

где $1/r = 3/r_3 + 3/4r_1$.

В уравнении (15) для e_2 можно избавиться от η_2 и η_3 , если продифференцировать дважды по ξ_+ и воспользоваться соотношениями (17). В результате получаем замкнутое уравнение для e_2

$$l_z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} e_2 + l_-^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_-^2} e_2 + \frac{\partial^2}{\partial \xi_+^2} f(e_2) = 0, \quad (18)$$

где $l_z = \sqrt{r_3/12}$, $l_- = \sqrt{r}$ — характерные размеры неоднородностей в направлениях, перпендикулярных ξ_+ . Поскольку характерный размер

в направлении ξ_+ определяется параметром $l_+ = \sqrt{|r_2|}$, имеем в рассматриваемой ситуации $l_2, l_- \gg l_+$, так что локализованные объекты, которые может описывать уравнение (18), будут иметь плоскую форму типа «таблетки», ориентированной вдоль диагонали грани куба. Одновременно с локализацией неоднородного состояния по деформации e_2 в направлениях z и ξ_- возникают все другие деформации, которые могут быть найдены после решения уравнения (18) интегрированием уравнений (17) для величин $\partial\eta_2/\partial\xi_+$ и $\partial\eta_3/\partial\xi_+$ по формулам (14). Фактическое решение уравнения (18), отвечающее данной ситуации, является объектом будущего исследования.

Вернемся теперь к решениям вида (11), которые соответствуют ситуации (9). Рассмотрим первое из этих решений, записав его в форме (12). Для получения явного вида решения запишем термодинамический потенциал

$$\Phi = \frac{1}{V} \int d\xi_+ d\xi_- dz \left\{ r_2 (e_2^2 + e_3^2) + v_1 e_3 (e_2^2 - 3e_3^2) + u_1 (e_2^2 + e_3^2)^2 + (a_2 + a_4) e_2 \frac{d^2}{d\xi_+^2} e_2 \right\}, \quad a_2 + a_4 < 0, \quad (19)$$

в котором $e_3 = \text{const}$, а e_2 зависит только от ξ_+ . (Выбор такого вида решения уже учитывает уравнения совместности). Условия минимизации его $\delta\Phi/\delta e_2 = 0$ и $\partial\Phi/\partial e_3 = 0$ приводят к двум уравнениям

$$r_2 e_2 - 3v_1 e_2 e_3 + 2u_1 e_2 (e_2^2 + e_3^2) + (a_2 + a_4) \frac{d^2}{d\xi_+^2} e_2 = 0, \quad (20)$$

$$2r_2 e_3 + 3v_1 e_3^2 - 3v_1 \frac{1}{L} \int d\xi_+ e_2^2 + 4u_1 e_3 \left(e_3 + \frac{1}{L} \int d\xi_+ e_2^2 \right) = 0. \quad (21)$$

Здесь L — длина кристалла в направлении ξ_+ .

Если пренебречь неоднородностью в e_2 , то уравнения (20) и (21) описывают фазовый переход первого рода при T_c , определяющейся из условия $r_2 = v_1^2/4u_1$. Спонтанные деформации определяются соотношениями

$$\left. \begin{aligned} e_3 &= \rho \cos \varphi, \quad e_2 = \rho \sin \varphi, \\ \varphi &= \pi, \pi/3, -\pi/3; \quad \rho = \frac{3v_1}{u_1} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{32}{9} \frac{r_2 u_1}{v_1^2}} \right). \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Различным значениям фазы φ соответствуют три домена. Найдем границу между двумя доменами с $\varphi = \pi/3$ и $\varphi = -\pi/3$. Для такого состояния $e_3 = \text{const}$ по всему объему, и граница, очевидно, описывается решением вида (12), так что необходимо решать систему уравнений (20) и (21). При граничных условиях $\varphi(\xi_+ = -\infty) = -\pi/3$, $\varphi(\xi_+ = \infty) = \pi/3$ уравнение (20) имеет решение

$$e_2(\xi_+) = e_2^0 \text{th} \frac{\xi_+}{\Delta}, \quad (23)$$

где амплитуда и ширина доменной стенки определяются формулами

$$\frac{1}{\Delta^2} = \frac{3}{4} \frac{u_1 \rho^2}{|a_2 + a_4|}, \quad e_2^0 = \frac{\sqrt{3}}{2} \rho, \quad e_3 = \frac{1}{2} \rho.$$

Найденное решение (23) описывает доменную стенку во всем температурном интервале существования диссимметричной фазы. В [5] доменная стенка для системы, описываемой тем же функционалом (19), была получена только в одной температурной точке (точке фазового перехода). Причина такого парадоксального результата состоит в игнорировании в [5] того факта, что задачу с условием (9) следует рассматривать как предельный случай бесконечной жесткости модулей r_1 и r_3 , соответствующих объемной и сдвиговой деформациям. Только в этом пределе существует решение $e_3 = \text{const}$ во всем интервале температур.

3. Неустойчивость к сдвиговой деформации

Пусть теперь при $T \rightarrow T_c$, $r_3 \rightarrow 0$, а r_1 и r_2 велики, так что деформации e_1 и e_2 , e_3 малы. Рассмотрим предел $r_1, r_2 \rightarrow \infty$, когда

$$e_1 \equiv 0, \quad e_2 = e_3 \equiv 0. \quad (24)$$

Уравнения совместности (6) и (7) принимают вид

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} e_4 &= \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} e_5 = \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} e_6 = 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} e_4 &= \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} e_6 + \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} e_5, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} e_5 &= \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} e_6 + \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} e_4, \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} e_6 &= \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} e_5 + \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} e_4. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Они допускают три частных решения следующего вида:

1) $e_4 = \text{const}$, $e_5 = e_5(x, y)$, $e_6 = e_6(x, y)$,

$$\frac{\partial}{\partial x} e_5 = \frac{\partial}{\partial y} e_6, \quad (26)$$

2) $e_5 = \text{const}$, $e_4 = e_4(y, z)$, $e_6 = e_6(y, z)$,

$$\frac{\partial}{\partial z} e_4 = \frac{\partial}{\partial y} e_6, \quad (27)$$

3) $e_6 = \text{const}$, $e_4 = e_4(x, z)$, $e_5 = e_5(x, z)$,

$$\frac{\partial}{\partial z} e_4 = \frac{\partial}{\partial x} e_5. \quad (28)$$

Общее решение является суперпозицией этих трех частных решений. Каждое из этих решений может описывать объект типа «стержня», направленного вдоль ребра куба.

Запишем функционал энергии (2), (3) для частного решения (26)

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \left\{ r_3 (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) + v_2 e_4 e_5 e_6 + u_2 (e_4^2 + e_5^2 + e_6^2)^2 + u_3 (e_4^4 + e_5^4 + e_6^4) + \right. \\ &+ \alpha_5 \left[e_5 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) e_5 + e_6 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) e_6 \right] + \alpha_6 e_6 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} e_5 + \eta \left(\frac{\partial e_5}{\partial x} - \frac{\partial e_6}{\partial y} \right) \left. \right\} \quad (29) \end{aligned}$$

с условиями устойчивости

$$u_2 + u_3 > 0, \quad 3u_2 + u_3 > 0, \quad \alpha_5 < 0, \quad 4\alpha_5 + \alpha_6 < 0.$$

Множитель Лагранжа $\eta(x, y)$ учитывает связь между производными e_5 и e_6 , присутствующую в (26). Задача минимизации с однородными деформациями определяет три устойчивые фазы: аустенит и два мартенсита:

1) $e_4 = e_5 = e_6 = 0$,

2) $e_4 = e_5 = e_6 = e_0$, $e_0 = -\text{sign } v_2 \frac{|v_2| + \sqrt{v_2^2 - 32r_3(3u_2 + u_3)}}{8(3u_2 + u_3)}$,

3) $e_4 = e_5 = 0$, $e_6^2 = \bar{e}^2 \equiv -r_3/2(u_2 + u_3)$,

причем фаза 2 имеет четыре домена вида $(e_0 e_0 e_0)$, $(-e_0 - e_0 e_0)$, $(-e_0 e_0 - e_0)$, $(e_0 - e_0 - e_0)$, а фаза 3 — шесть доменов: $(\pm \bar{e} 0 0)$, $(0 \pm \bar{e} 0)$, $(0 0 \pm \bar{e})$. Между этими фазами происходят фазовые переходы первого рода благодаря кубическому инварианту в потенциале, и фазовая диаграмма на плоскости r_3 , v_2 показана на рисунке. Линии переходов даются уравнениями парабол

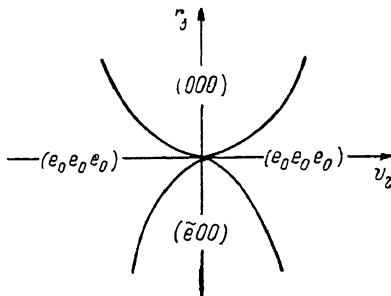
$$r_3 = \frac{v_3^2}{36(3u_2 + u_3)}, \quad r_3 = -\frac{v_3^2}{32(3u_2 + u_3)} \frac{2\alpha + 1}{\alpha^2},$$

$$\alpha = (1 - u_3/2(u_2 + u_3))^{1/2} - 1.$$

Рассмотрим теперь неоднородные решения для функционала (29). Уравнения $\delta\Phi/\delta e_5 = 0$ и $\delta\Phi/\delta e_6 = 0$ можно представить в виде уравнений для величин $e_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_6 \pm e_5)$

$$\begin{aligned} & [2r_3 + v_2 e_4 + 4u_2(e_4^2 + e_+^2 + e_-^2) + 2u_3(3e_-^2 + e_+^2)] e_+ + \\ & + \frac{1}{2}(4\alpha_5 + \alpha_6) \frac{\partial^2 e_+}{\partial \xi_+^2} + \frac{1}{2}(4\alpha_5 - \alpha_6) \frac{\partial^2 e_+}{\partial \xi_-^2} = \frac{\partial \eta}{\partial \xi_-} \end{aligned} \quad (30)$$

и аналогичного уравнения с заменой e_{\pm} на e_{\mp} и ξ_{\pm} на ξ_{\mp} . Условие на решение (26) можно переписать в форме $\partial e_-/\partial \xi_+ = \partial e_+/\partial \xi_-$, откуда теперь видно, что уравнения (30) допускают решение



$$\frac{\partial \eta}{\partial \xi_-} = e_+ [2r_3 + v_2 e_4 + 4u_2(e_4^2 + e_+^2 + e_-^2) + 2u_3(3e_-^2 + e_+^2)], \quad e_+ = \text{const}, \quad \frac{\partial e_-}{\partial \xi_+} = 0$$

со следующим уравнением для e_-

$$[2r_3 + v_2 e_4 + 4u_2(e_4^2 + e_+^2)] e_- + (4u_2 + 2u_3) e_-^2 = -\frac{1}{2}(4\alpha_5 + \alpha_6) \frac{d^2}{d\xi_-^2} e_-, \quad (31)$$

и симметричное ему решение $e_- = \text{const}$, $\partial e_+/\partial \xi_- = 0$. В этом уравнении e_4 следует считать константой, определяющейся из уравнения $\partial\Phi/\partial e_4 = 0$.

Уравнение (31) имеет решение

$$e_- = e_0^0 \text{th} \frac{\xi_-}{\Delta}, \quad \frac{1}{\Delta^2} = \frac{|2r_3 + v_2 e_4 + 4u_2(e_4^2 + e_+^2) + 2u_3 e_4^2|}{|4\alpha_5 + \alpha_6|}, \quad (32)$$

описывающее границу между двумя доменами $(-e_0 - e_0 e_0)$ и $(-e_0 e_0 - e_0)$ фазы 2. Ширина границы Δ находится из формулы (32), в которой нужно положить $e_4 = -e_0$. Аналогичное решение для e_+ (ξ_+) описывает границу между доменами $(e_0 e_0 e_0)$ и $(e_0 - e_0 - e_0)$. Таким образом, стенка, описываемая только одной деформацией e_+ или e_- , направлена перпендикулярно грани куба.

Граница между доменами $(o \tilde{e} o)$ и $(o o \tilde{e})$ фазы 3 также описывается решением (32), где $e_+ = e_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{e}$ и $e_4 = 0$, так что $1/\Delta^2 = |2r_3|/|4\alpha_5 + \alpha_6|$. Аналогичное решение для e_+ описывает стенку между доменами (o, \tilde{e}, o) и $(o o - \tilde{e})$. В этой фазе также существуют стенки между доменами $(o \tilde{e} o)$ и $(o - \tilde{e} o)$

$$e_5 = \tilde{e} \text{th} \frac{y}{\Lambda}, \quad \frac{1}{\Lambda^2} = \frac{|r_3|}{2|\alpha_5|}, \quad (33)$$

направленная перпендикулярно оси y . Аналогичная граница между доменами $(o, o \tilde{e})$ и $(o o - \tilde{e})$ оказывается расположенной перпендикулярно оси x .

4. Обсуждение результатов

Неустойчивость по отношению к тетрагональной деформации проявляют сплавы In—Ta, In—Pd и некоторые соединения со структурой A-15 (V_3Si , Nb_3Sn и др.). В них наблюдается типичная картина предмартенситных явлений, когда появляются плоские объекты, расположенные перпендикулярно диагоналям граней куба, в соответствии с анализом, проведенным в разделе 2 [9, 10].

Неустойчивость по отношению к сдвиговой деформации приводит к фазовому переходу из кубической фазы в фазу ($e_0 e_0 e_0$), отвечающей ромбоэдрическому искажению куба. Примером такого перехода является V_2Zr со структурой C-15. В нем обнаружены предпереходные явления, проявляющиеся в диффузном рассеянии с другой геометрией в обратном пространстве [11]. Для его объяснения привлекаются плоские образования в прямом пространстве, перпендикулярные направлениям (110) и (111). Если первые не противоречат анализу раздела 3, то для описания вторых необходимо привлекать объемную деформацию. К сожалению, в настоящее время нам неизвестна информация о модулях упругости и доменной структуре этого соединения, поэтому полное сравнение с выводами раздела 3 пока затруднительно.

Что касается реконструктивных переходов типа ОЦК—ГЦК, их описание требует одновременного учета сдвиговых и тетрагональных деформаций. Соответствующий анализ уравнений минимизации и совместности далеко выходит за пределы данной работы и будет опубликован в другом месте.

Л и т е р а т у р а

- [1] Proceedings ICOMAT-82, J. Phys., 1982, vol. 43, N 12, Suppl. C4.
- [2] *Kassan-Ogly F. A., Naish V. E.* Acta. Cryst., 1986, vol. B42, p. 297—335.
- [3] *Изюмов Ю. А., Лантеев В. М.* ФТТ, 1987, т. 29, № 12, с. 3603—3610.
- [4] *Falk F. Z.* Phys. B, 1983, vol. 51, N 2, p. 177—185.
- [5] *Barsh G. R., Krumhansl J. A.* Phys. Rev. Lett., 1984, vol. 53, N 11, p. 1069—1072.
- [6] *Jacobs A. E.* Phys. Rev. B, 1986, vol. 34, N 9, p. 5984—5989.
- [7] *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мпр. 1985. 352 с.
- [8] *Изюмов Ю. А., Сыромятников В. Н.* Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. 247 с.
- [9] *Onozuka T., Yamamoto T., Hirabayashi M.* Sci. Rep. Research. Inst. Tokoku university, 1984, vol. 32, N 1, p. 21—31.
- [10] *Кондратьев В. В., Пушин В. Г.* ФММ, 1985, т. 60, № 3, с. 629—650.
- [11] *Пушин В. Г., Кожанов В. Н., Сюткина Н. Н., Романова Р. Р., Романов Е. П.* ДАН СССР, 1980, т. 254, № 1, с. 100—104.

Институт физики металлов
УрО АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
4 января 1988 г.