

УДК: 537.226

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ДИНАМИКУ КОГЕРЕНТНЫХ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

В. Н. Нечаев, А. М. Рошупкин

Исследована динамика когерентных межфазных границ в твердых телах с точечными дефектами. Получено выражение для силы торможения межфазной границы, обусловленной тепловым эффектом фазового превращения, и для силы примесного торможения. Показано, что сила примесного торможения существенно зависит от направления (в сторону высокотемпературной фазы или в сторону низкотемпературной фазы) движения межфазной границы. Проведено сравнение относительной роли этих двух эффектов.

1. Постановка задачи

Пусть межфазная граница в кристалле разделяет высокотемпературную фазу II и низкотемпературную фазу I. Точечные дефекты, имеющиеся в кристалле, распределяются между фазами I и II в условиях равновесия таким образом, чтобы химические потенциалы их в этих фазах совпадали. В приближении теории слабых растворов [1]

$$\mu = \psi(T) + k_B T \ln(Mc/\rho),$$

где M — масса одного атома матрицы, ρ — плотность вещества матрицы, ψ — величина, определяющая изменение свободной энергии кристалла при введении одного дефекта, и, следовательно, равновесные концентрации дефектов c_I^0 , c_{II}^0 в фазах I, II находятся из соотношения [1]

$$c_I^0/c_{II}^0 = \exp(|\psi|/k_B T).$$

Здесь введено обозначение: $[a] = a_{II} - a_I$.

Известное в теории слабых растворов условие равновесия фаз [1] легко обобщается на случай твердых тел и имеет вид (см. также [2])

$$\{\sigma_{ik}\} \{\omega_{ik}^0\} + [H_0] (T - T_0)/T_0 + k_B T [c] = 0, \quad (1)$$

σ_{ik} — тензор напряжений; ω_{ik}^0 — тензор спонтанной дисторсии, связанной с фазовым превращением; H_0 — энтальпия единицы объема фазы при температуре равновесия фаз T_0 в бездефектном кристалле. Фигурные скобки означают полусумму стоящей в них величины по обе стороны от межфазной границы: $\{a\} = (a_I + a_{II})/2$. Следуя [2], можно показать, что условие равновесия фаз (1) сохраняет свою силу для динамического случая.

Наличие в кристалле дефектов смещает температуру равновесия фаз на величину ΔT_0 , которая, согласно (1), равна

$$\frac{\Delta T_0}{T_0} = \frac{T^* - T_0}{T_0} = -k_B T_0^* \frac{[c_0]}{[H_0]}. \quad (2)$$

В нашем случае скачок $[H_0] = H_{II} - H_I > 0$ и, таким образом,

$$\text{sgn } \Delta T_0 = -\text{sgn } [c_0].$$

Равновесие фаз может быть нарушено каким-либо внешним воздействием. Например, изменяя температуру кристалла на величину $\Delta T_{\text{ext}} = T_{\text{ext}} - T_0^*$ по отношению к температуре равновесия фаз, мы вызываем движение межфазных границ. Межфазные границы будут двигаться так, чтобы

$$\Delta T_{\text{ext}} = \Delta T' + \Delta T'', \quad (3)$$

где $\Delta T'$ — изменение температуры на границе за счет теплового эффекта превращения; $\Delta T''$ — эффективное изменение температуры на границе, связанное с перераспределением примесей вблизи движущейся границы. Предполагая, что динамический скачок концентраций примесей на границе изменяется по сравнению со статическими в $(1 + \alpha)$ раз: $[c] = (1 + \alpha) \times [c_0]$, а также учитывая соотношение (2) и что, согласно (1),

$$[H_0] \frac{T - T_0}{T_0} + k_B T_0 [c] = 0,$$

запишем эффективное изменение температуры $\Delta T''$, на границе обусловленное примесями, в виде

$$\Delta T = T_0^* \alpha (\Delta T / T_0) / (1 - \alpha \Delta T / T_0). \quad (4)$$

Внешние напряжения, приложенные к кристаллу с помощью (1), легко пересчитываются на эффективное изменение температуры; поэтому в дальнейшем термодинамический стимул, вызывающий движение межфазных границ, будем связывать с изменением температуры кристалла.

Перейдем к расчету величин $\Delta T'$, $\Delta T''$ в выражении (3).

2. Примесное торможение межфазных границ

Рассмотрим задачу о движении межфазной границы в кристалле с дефектами и вычислим силу, действующую на границу со стороны дефектов, в зависимости от скорости ее движения. Задачи о влиянии примесных атмосфер на движение границ зерен и границ в ферромагнетиках в другой постановке изучались ранее в работах [3-11]. В [3-9] исследовались миграции границ зерен в твердых растворах. Граница рассматривалась как некий плоский дефект, характеризуемый определенной энергией взаимодействия с примесными атомами. При движении граница увлекает за собой примесную атмосферу, которая в свою очередь осуществляет эффективное торможение границы. В указанных работах исследована зависимость движущей силы от скорости движения границы и концентрации примесей. Показано, что в общем случае зависимость скорости границы от внешней движущей силы является нелинейной функцией. Для достаточно высоких концентраций примеси существует область, где скорость границы падает с ростом движущей силы. В работах [8, 9] произведено обобщение этих результатов на случай более сложных конфигураций границ, а также учтено влияние поверхностного натяжения границ на их динамику. В [10] исследовалось закрепление 180°-ных доменных границ в ферромагнетиках вследствие стрикционного взаимодействия точечных дефектов с локальной намагниченностью. В последующей работе [11] изучено влияние примесных атмосфер на внутреннее трение в ферромагнитных материалах.

Согласно (1), для определения силы, действующей на границу со стороны примесной атмосферы в пренебрежении концентрационными напряжениями, достаточно знать скачок концентраций c на границе, который в свою очередь определяется из решения уравнения диффузии. Пусть закон движения границы есть $x_0(t)$. Перейдем в систему координат, связанную с границей, т. е. осуществим в уравнении диффузии преобразование

$$t = t', \quad x = x' + x_0(t).$$

Тогда уравнение диффузии примет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t'} - V \frac{\partial c}{\partial x'} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x'^2}. \quad (5)$$

Здесь $V = dx_0/dt$ — скорость движения границы. С учетом различия коэффициентов диффузии для разных фаз граничное условие, отвечающее непрерывности потока частиц, имеет вид

$$\left[D \frac{\partial c}{\partial x'} \right] + V |c| = 0. \quad (6)$$

Перейдем к новым переменным, а именно будем считать концентрацию примесных атомов c функцией $t = t'$ и $\xi = x'/\sqrt{4Dt'}$. Тогда для уравнения диффузии вместо (5) имеем

$$4t \frac{\partial c}{\partial t} = 2(\xi + \xi_0(t)) \frac{\partial c}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 c}{\partial \xi^2}. \quad (7)$$

Здесь $\xi_0(t) = V\sqrt{t/D}$. Это уравнение нужно записать для каждой из фаз

$$4t \frac{\partial c_I}{\partial t} = 2(\xi + \xi_0(t)) \frac{\partial c_I}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 c_I}{\partial \xi^2}, \quad (8')$$

$$4t \frac{\partial c_{II}}{\partial t} = 2(\eta + \eta_0(t)) \frac{\partial^2 c_{II}}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 c_{II}}{\partial \eta^2}, \quad (8'')$$

где

$$\xi = x'/\sqrt{4D_I t'}, \quad \eta = x'/\sqrt{4D_{II} t'}.$$

Граничное условие (6) при этом принимает вид

$$\frac{1}{\eta_0} (\partial c_{II} / \partial \eta)_{\eta=0} - \frac{1}{\xi_0} (\partial c_I / \partial \xi)_{\xi=0} + 2(c_{II}(0) - c_I(0)) = 0. \quad (9)$$

Для определенности будем считать, что $\xi < 0$, а $\eta > 0$.

Выберем начальное условие, отвечающее равновесному распределению дефектов по кристаллу (рис. 1). Будем также считать, что это равновесное распределение сохраняется при $x \rightarrow \pm\infty$. Выпишем начальные условия в явном виде

$$c(x', 0) = c^0(x') = \begin{cases} c_{II}^0, & x' > 0 \\ c_I^0, & x' < 0 \end{cases}$$

Рис. 1. Распределение концентрации дефектов c в кристалле в начальный момент времени.

Область $\eta > 0$ отвечает II фазе, а область $\xi < 0$ I фазе.

или, если считать c функцией t и ξ (или η),

$$c(\infty, 0) = c_{II}, \quad c(-\infty, 0) = c_I^0.$$

Соответственно для граничных условий имеем

$$c(\infty, t) = c_{II}^0, \quad c(-\infty, t) = c_I^0$$

или в переменных Больцмана

$$c(\infty, t) = c_{II}^0, \quad c(-\infty, t) = c_I^0.$$

Как видно из приведенных выше формул, рассматриваемые начальные условия в координатах Больцмана являются частным случаем граничных условий, не зависящих от времени

$$c(\infty) = c_{II}^0, \quad c(-\infty) = c_I^0. \quad (10)$$

Очевидно, что в координатах Больцмана решение не зависит от времени, если $\xi_0(t)$, $\eta_0(t)$ являются константами. Такой режим движения в дальнейшем мы будем называть стационарным диффузионным режимом, оправдывая это название тем, что, как будет показано ниже, движение

в этом случае происходит с постоянной силой со стороны примесей, и, следовательно, решение системы уравнений (8'), (8'') будет описывать движение границы под действием постоянного термодинамического стимула.

Таким образом, задача свелась к решению системы уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c_I}{\partial \xi^2} + 2(\xi + \xi_0) \frac{\partial c_I}{\partial \xi} &= 0, \\ \frac{\partial^2 c_{II}}{\partial \eta^2} + 2(\eta + \eta_0) \frac{\partial c_{II}}{\partial \eta} &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями (10). Общее решение системы (11) имеет вид

$$c_I = A_I \Phi(\xi + \xi_0) + B_I, \quad c_{II} = A_{II} \Phi(\eta + \eta_0) + B_{II}, \quad (12)$$

где $\Phi(x) = 2\sqrt{\pi} \cdot \int_0^x e^{-t^2} dt$. Граничные условия (10), а также соотношение

$$c_I(0)/c_{II}(0) = c_I^0/c_{II}^0,$$

следующее из условия непрерывности химического потенциала на границе, позволяют исключить из (12) три произвольные постоянные. В результате имеем

$$\begin{aligned} c_I &= c_I^0 \left(1 + \alpha \frac{1 + \Phi(\xi + \xi_0)}{1 + \Phi(\xi_0)} \right), \\ c_{II} &= c_{II}^0 \left(1 + \alpha \frac{1 - \Phi(\eta + \eta_0)}{1 - \Phi(\eta_0)} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

где α — не определенная пока произвольная постоянная.

Для нахождения α используем граничное условие (9), учитывая при этом, что

$$\Phi'(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}.$$

Тогда

$$\alpha = \frac{c_{II}^0 - c_I^0}{c_I^0 - c_{II}^0 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{c_{II}^0}{\eta_0} \frac{e^{-\eta_0^2}}{1 - \Phi(\eta_0)} + \frac{c_I^0}{\xi_0} \frac{e^{-\xi_0^2}}{1 + \Phi(\xi_0)} \right)}. \quad (14')$$

В случае, когда $D_I = D_{II}$ и, следовательно, $\xi_0 = \eta_0$, это выражение можно записать в виде

$$\alpha = \beta(\xi_0) \frac{[c_0]}{\{c_0\} - (\beta(\xi_0) - 1/2 \cdot \Phi(\xi_0)) |c_0\}}, \quad (14'')$$

где

$$\beta(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} x e^{x^2} (1 - \Phi^2(x)) \quad (15)$$

— монотонно возрастающая от нуля до единицы функция.

Сила, действующая на границу со стороны примесной атмосферы, согласно (1), равна

$$\psi = -k_B T [c] = -k_B T [c_0] (1 + \alpha) = \psi_{ст} (1 + \alpha). \quad (16)$$

Из выражения (16) видно, что по сравнению со статистическим случаем сила изменяется в $(1 + \alpha)$ раз.

Заметим, что анализ выражения (16) для силы примесного торможения ψ достаточно привести лишь для случая $0 \leq c_I^0/c_{II}^0 \leq 1$. Случай же $1 \leq c_I^0/c_{II}^0 < \infty$ в силу нечетности функций $\beta(x)$, $\Phi(x)$ простым преобразованием $c_I^0 \rightleftharpoons c_{II}^0$ сводится к указанному выше.

Выражение (14) для α упрощается в предельных случаях: если $\xi_0 = \eta_0 = 0$, то $\alpha = 0$; если $\eta_0 \gg 1$, $\xi_0 \gg 1$ и $\eta_0 > 0$, $\xi_0 > 0$, что соответствует движению границы в сторону высокотемпературной фазы (рис. 1),

$$\alpha = \frac{[c_0]}{\{c_0\} - 1/2 \cdot [c_0]} = \left(\frac{c_{II}^0}{c_I^0} - 1 \right), \quad (17)$$

если же граница движется в противоположном направлении $\xi_0 \rightarrow -\infty$, $\eta_0 \rightarrow -\infty$, то

$$\alpha = \frac{[c_0]}{\{c_0\} + 1/2 \cdot [c_0]} = \left(\frac{c_I^0}{c_{II}^0} - 1 \right). \quad (18)$$

Функция $\alpha(\xi_0)$ монотонно возрастает от одного предельного значения (17) к другому (18). Зависимость силы примесного торможения ψ от величины диффузионного параметра ξ_0 изображена на рис. 2. Распределение концентрации примесных атомов вблизи движущейся границы показано на рис. 3.

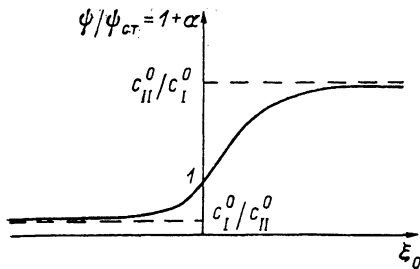


Рис. 2. Соотношение динамической ψ и статической $\psi_{ст}$ силы, связанной с дефектами, в зависимости от диффузионного параметра ξ_0 .

$\xi_0 = V\sqrt{t/D}$, где V — скорость движения межфазной границы, D — коэффициент диффузии примесных атомов.

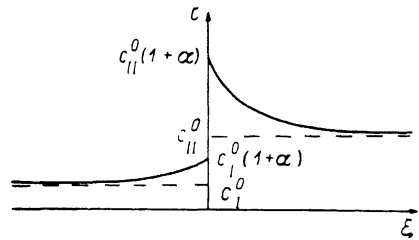


Рис. 3. Зависимость распределения концентрации дефектов c вблизи движущейся границы от переменной $\xi = x/\sqrt{4Dt}$, где D — коэффициент диффузии.

В частном случае, если $c_I^0 = 0$, то

$$1 + \alpha = 1/[1 - \sqrt{\pi} \xi_0 e^{\xi_0^2} (1 - \Phi(\xi_0))], \quad (19)$$

и сила примесного торможения неограниченно возрастает при $\xi_0 \rightarrow +\infty$. При движении границы в обратном направлении, в сторону низкотемпературной фазы, $\psi \rightarrow 0$, если $\xi_0 \rightarrow -\infty$.

Следует указать область применимости полученных результатов. Поскольку расчеты в данной работе проводились в рамках теории слабых растворов, где дефекты считались невзаимодействующими, то концентрация дефектов в кристалле, в том числе и вблизи межфазной границы, должна быть достаточно мала $cl^3 \ll 1$, где l — характерный размер искажений, вызываемых в кристалле точечным дефектом. В случае центров дилатации это условие заменяется на следующее: $c\Omega \ll 1$. Вследствие локального возрастания концентрации дефектов вблизи межфазной границы условие применимости теории в первую очередь может нарушиться в именно этой области. Требуя выполнения приближения невзаимодействующих дефектов во всех точках кристалла и учитывая при этом выражения (13), (14), находим условие применимости развиваемой теории

$$1 + \alpha \ll \min \left\{ \frac{1}{c_I^0 l^3}, \frac{1}{c_{II}^0 l^3} \right\}.$$

3. Торможение межфазных границ, обусловленное тепловым эффектом фазового превращения

Движение межфазных границ в кристалле обязательно сопровождается поглощением или выделением скрытой теплоты фазового превращения. В результате происходит локальное охлаждение или разогрев области кристалла вблизи межфазной границы. Последующее выравнивание температур вследствие процессов теплопроводности приводит к диссипации энергии. Вклад в силу торможения межфазных границ, обусловленный этими процессами, очевидно, будет конкурировать с примесным торможением. Для сравнения относительной роли двух эффектов получим выражение для силы ψ_T торможения межфазной границы, связанной тепловым эффектом превращения. Искомая сила представляется первым слагаемым в (1), где температура T на поверхности межфазной границы определяется из решения уравнения теплопроводности

$$\partial T / \partial t - \chi \Delta T = 0 \quad (20)$$

($\chi = \kappa / c_p$ — коэффициент температуропроводности, κ — коэффициент теплопроводности, c_p — теплоемкость единицы объема вещества) с граничным условием на межфазной границе

$$[\kappa \nabla T] \cdot \mathbf{n} + V [H_0] = 0. \quad (21)$$

Так же как и уравнение диффузии, уравнение теплопроводности (20) удобно решать в системе координат, связанной с движущейся границей ($t = t'$, $x = x' + x_0(t)$). В этой системе координат граничное условие (21) не меняется, в то время как уравнение (20) принимает вид

$$\frac{\partial T}{\partial t'} - V \frac{\partial T}{\partial x'} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2}.$$

Учитывая, что в общем случае коэффициент температуропроводности различен в контактирующих фазах, и переходя к переменным Больцмана $t = t'$, $\zeta = x' / \sqrt{4\chi_I t'}$, если $x' < 0$, и $t = t'$, $\eta = x' / \sqrt{4\chi_{II} t'}$, если $x' > 0$, будем иметь

$$\begin{aligned} 4t \frac{\partial T_I}{\partial t} &= 2(\zeta + \zeta_0^I(t)) \frac{\partial T_I}{\partial \zeta} + \frac{\partial^2 T_I}{\partial \zeta^2}, \\ 4t \frac{\partial T_{II}}{\partial t} &= 2(\eta + \zeta_0^{II}(t)) \frac{\partial T_{II}}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 T_{II}}{\partial \eta^2}. \end{aligned} \quad (22)$$

Условие непрерывности теплового потока на границе (21) при этом принимает вид

$$\frac{c_{p2}}{2\zeta_0^{II}} (\partial T / \partial \eta)_{\eta=0} - \frac{c_{p1}}{2\zeta_0^I} (\partial T / \partial \zeta)_{\zeta=0} + [H_0] = 0. \quad (23)$$

Интересуясь в дальнейшем лишь стационарными решениями системы (22), будем считать $\zeta_0^I = V \sqrt{t / \chi_I}$, $\zeta_0^{II} = V \sqrt{t / \chi_{II}}$ постоянными величинами, характеризующими стационарный режим движения. Стационарность понимается в том смысле, как в приведенной выше диффузионной задаче. Будем полагать также, что в начальный момент времени температура T во всех точках кристалла одинакова и совпадает с температурой равновесия фаз T_0 . Эта же температура будет сохраняться и для произвольного момента времени при $x \rightarrow \pm \infty$. Другими словами, решение системы (22) должно удовлетворять условию

$$T(-\infty, t) = T(+\infty, t) = T_0. \quad (24)$$

Условия (23), (24) совместно с условием непрерывности температуры на межфазной границе $(T_{II})_{\eta=0} = (T_I)_{\zeta=0}$ определяют произвольные постоянные A_I, B_I, A_{II}, B_{II} в общем решении системы (22)

$$T_I = A_I \Phi(\zeta + \zeta_0^I) + B_I, \quad T_{II} = A_{II} \Phi(\eta + \zeta_0^{II}) + B_{II}.$$

В результате несложных вычислений находим распределение температуры в кристалле

$$T = T_0 - \frac{\sqrt{\pi} \zeta_0^I \zeta_0^{II} (1 - \Phi(\zeta_0^{II})) (1 + \Phi(\zeta + \zeta_0^I)) [H_0]}{c_{p1} \zeta_0^{II} \exp(-(\zeta_0^I)^2) (1 - \Phi(\zeta_0^{II})) + c_{p2} \zeta_0^I \exp(-(\zeta_0^{II})^2) (1 + \Phi(\zeta_0^I))},$$

$$T = T_0 + \frac{\sqrt{\pi} \zeta_0^I \zeta_0^{II} (1 + \Phi(\zeta_0^I)) (1 - \Phi(\eta + \zeta_0^{II})) [H_0]}{c_{p1} \zeta_0^{II} \exp(-(\zeta_0^I)^2) (1 - \Phi(\zeta_0^{II})) + c_{p2} \zeta_0^I \exp(-(\zeta_0^{II})^2) (1 + \Phi(\zeta_0^I))} \quad (25)$$

и выражение для силы торможения границы ψ_T , обусловленной тепловым эффектом фазового превращения

$$\psi_T = \frac{1}{T_0} \frac{\sqrt{\pi} \zeta_0^I \zeta_0^{II} (1 + \Phi(\zeta_0^I)) (1 - \Phi(\zeta_0^{II})) [H_0]^2}{c_{p1} \zeta_0^{II} \exp(-(\zeta_0^I)^2) (1 - \Phi(\zeta_0^{II})) + c_{p2} \zeta_0^I \exp(-(\zeta_0^{II})^2) (1 + \Phi(\zeta_0^I))}. \quad (26)$$

Полагая для простоты анализа $\chi_I = \chi_{II}$, $c_{p1} = c_{p2}$, $\zeta_0^I = \zeta_0^{II}$, имеем

$$\psi_T = \frac{\sqrt{\pi}}{2c_p T_0} [H_0]^2 \zeta_0 e^{\zeta_0^2} (1 - \Phi^2(\zeta_0)) = \frac{[H_0]^2}{c_p T_0} \beta(\zeta_0). \quad (27)$$

Если режим движения таков, что $\zeta_0 \ll 1$, то

$$\psi_T \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2c_p T_0} [H_0]^2 \zeta_0.$$

В случае $\zeta_0 \gg 1$ сила торможения асимптотически стремится к максимальному значению ψ_T^∞ (рис. 4)

$$\psi_T^\infty = [H_0]^2 / c_p T_0. \quad (28)$$

Используя численные значения параметров, оценим ψ_T^∞ для некоторых типичных структурных фазовых превращений I рода в твердых телах.

а) Переход мартенситного типа в системе медь—алюминий [12]:

$$[H_0] = 2.37 \cdot 10^7 \text{ Дж/м}^3, \quad c_p = 2.65 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3 \cdot \text{град}, \quad T_0 = 323 \text{ К}, \quad \psi_T^\infty = 6.6 \cdot 10^5 \text{ Дж/м}^3 = 6.6 \cdot 10^6 \text{ дин/см}^2.$$

б) Сегнетоэлектрический фазовый переход в BaTiO_3 [13]:

$$[H_0] = 1.9 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3, \quad c_p \approx 2.8 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3 \cdot \text{град}, \quad T_0 = 393 \text{ К}, \quad \psi_T^\infty = 0.3 \cdot 10^4 \text{ Дж/м}^3.$$

в) Антисегнетоэлектрический фазовый переход в $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ [14]:

$$[H_0] = 10^6 \text{ Дж/м}^3, \quad c_p = 1.3 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3 \cdot \text{град}, \quad T_0 = 150 \text{ К}, \quad \psi_T^\infty = 0.5 \cdot 10^4 \text{ Дж/м}^3.$$

г) Сегнетоэластический фазовый переход в $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$ [15]:

$$[H_0] = 4.0 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3, \quad c_p \approx 4 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3 \cdot \text{град}, \quad T_0 = 453 \text{ К}, \quad \psi_T^\infty = 0.9 \cdot 10^4 \text{ Дж/м}^3.$$

В то же время максимальная сила торможения ψ^∞ , обусловленная точечными дефектами в случае обычной их концентрации $c \approx 10^{18} \text{ (см)}^{-3}$, $[c] \approx c$, $c_{II}^0/c_1^0 = 5$, $k_B T \approx 5 \cdot 10^{-14} \text{ эрг} = 5 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$, согласно (16), равна $\psi^\infty = 2.5 \cdot 10^4 \text{ Дж/м}^3$. Таким образом, как показывает анализ, примеси даже

при относительно невысокой концентрации включений определяющий вклад в динамику межфазных границ в большинстве случаев, за исключением фазовых переходов мартенситного типа.

Возвращаясь теперь к (3), мы можем конкретно указать, как будет двигаться межфазная граница при заданном перегреве или переохлаждении ΔT_{ext} образца. Действительно, суммируя результаты, полученные в разделах 2 и 3, а именно учитывая в (3), (4) выражения (14), (15), (26), находим

$$\Delta T_{\text{ext}} = \Delta T_H \beta(\zeta_0) + T_0^* \frac{\beta(\gamma \zeta_0) [c_0] (\Delta T_0/T_0)}{\{c_0\} - (\beta(\gamma \zeta_0) - 1/2 \cdot \Phi(\gamma \zeta_0)) [c_0]}, \quad (29)$$

где $\gamma = \sqrt{\chi/D}$. При записи (29) сохранены лишь слагаемые, пропорциональные первой степени малого параметра $\Delta T_0/T_0 \ll 1$. Разрешая эти уравнения, например, графически относительно ζ_0 , записываем закон движения границы.

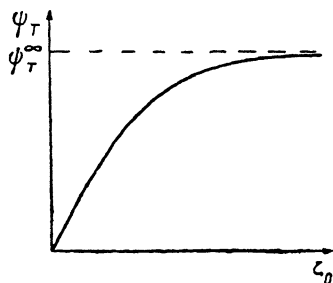


Рис. 4. Зависимость силы торможения межфазной границы ψ_T , обусловленной тепловым эффектом фазового превращения, от параметра ζ_0 .

$\zeta_0 = V \sqrt{t/\chi}$ (где χ — коэффициент температуропроводности); $\psi_T^\infty = [H_0]^2 c_p T_0$ — максимальная сила торможения, связанная с этим эффектом ($[H_0]$ — удельная теплота превращения, c_p — теплоемкость кристалла).

В частном случае, когда в кристалле нет примесей ($c=0$) $\Delta T_{\text{ext}} = \Delta T_H \beta(\zeta_0)$. В случае переходов мартенситного типа обычно $\Delta T_H \gg \Delta T_{\text{ext}}$ и, следовательно, $\zeta_0 \ll 1$; тогда, раскладывая $\beta(\zeta_0)$ в ряд для закона движения границы, будем иметь

$$V = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Delta T_{\text{ext}}}{\Delta T_H} \sqrt{\frac{\chi}{t}}.$$

Особенности движения границы в кристалле с дефектами, исследованные в данной работе, не являются специфическими для переходов мартенситного типа. Результаты сохраняют свою силу для любых фазовых переходов первого рода, в частности для сегнетоэлектриков. Однако в таких кристаллах ситуация значительно усложняется за счет существенного влияния электрических полей на статику и динамику межфазных границ в кристалле.

Несимметричность $1+\alpha$ как функции ξ_0 является общей особенностью движения границы в кристалле с дефектами. Несимметричность $1+\alpha$ и связанная с ней несимметричность силы примесного торможения являются одной из причин гистерезиса, наблюдаемого при фазовом переходе.

В принципе такие же особенности примесного торможения могут наблюдаться и для доменных границ в кристалле, если существует тип дефектов, имеющий разную собственную энергию в разных доменах.

Авторы выражают благодарность А. Л. Ройтбурду за обсуждение работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1986, ч. 1, с. 295.
- [2] Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рошупкин А. М. Поверхность, 1983, № 10, с. 36—51.
- [3] Глейтер Г., Чалмерс Б. Большеугловые границы зерен. М.: Мир, 1975, с. 242.
- [4] Can J. W. Acta Met., 1962, vol. 10, N 9, p. 789—798.
- [5] Люкке К., Штюве Г. П. В сб.: Возврат и рекристаллизация металлов. М.: Металлургия, 1966, с. 157—194.
- [6] Lücke K., Stüwe H. P. Acta Met., 1971, vol. 19, N 10, p. 1087—1098.
- [7] Temkin D. E. Phys. St. Sol. (a), 1976, vol. 34, N 1, p. 413—425.

- [8] *Аристов В. Ю., Фрадков В. Е., Швиндлерман Л. С.* ФТТ, 1980, т. 22, № 6, с. 1817—1828.
- [9] *Фрадков В. Е., Швиндлерман Л. С.* Поверхность, 1982, № 1, с. 90—95.
- [10] *Любов Б. Я., Власов И. М.* ФММ, 1974, т. 37, № 3, с. 455—460.
- [11] *Власов И. М., Любов Б. Я.* В сб.: Механизмы внутреннего трения в твердых телах. М.: Наука, 1976, с. 37—39.
- [12] *Косилов А. Т., Василенко А. Ю.* ФММ, 1979, т. 48, № 2, с. 303—308.
- [13] *Иона Ф., Ширани Р.* Сегнетоэлектрические кристаллы. М.: Мир, 1965. 555 с.
- [14] *Landolt-Börnstein. Zahlenwerte und Funktion aus Naturwissenschaften und Technik. Neue Series: Bd 3, Ferro- und Antiferroelectrische substanzen.* Berlin, 1969.
- [15] *Gilletta F., Chabin M., Cao-Xuan A.* Phys. St. Sol. (a), 1976, vol. 35, N 2, p. 545—549; *Toledano J. C., Pateau L., Primot J., Aubree J., Morin D.* Mat. Res. Bull., 1975, vol. 10, N 2, p. 103—112.

Воронежский
политехнический институт
Воронеж

Поступило в Редакцию
11 января 1988 г.