05

Мера близости кристаллических решеток

© В.П. Верещагин, М.П. Кащенко

Уральская государственная лесотехническая академия,
620032 Екатеринбург, Россия

(Поступило в Редакцию 27 февраля 1998 г.)

Определяется мера, численно выражающая различие между кристаллическими решетками. Конструктивность определения демонстрируется на конкретном примере, связанном с выделенностью ориентационного соответствия между объемноцентрированной кристаллической (ОЦК (ОЦТ)) решеткой α-мартенсита и гранецентрированной кристаллической (ГЦК) решеткой γ-аустенита в случаях, когда последняя совершенна и отличается от совершенной в окрестности винтовой дислокации.

1. В теории мартенситных превращений (МП) при трактовке стадии зародышеобразования используются представления (см., например, [1–3]), связывающие возможность спонтанной структурной перестройки аустенита с определенными местами, в которых аустенит предварительно уже деформирован. Считается, что эти деформации сближают решетки аустенита и мартенсита, обеспечивая выгодные условия для флуктуационного преодоления энергетического барьера. Свидетельством тому могут служить, например, результаты работ [4,5]. В [4] установлено существоание температуры M, превышающей температуру M_S начала МП на 35–40 K. При температурах из интервала (M_S, M) МП вызывается внешними напряжениями $\sigma_m < \sigma_\tau$, где σ_τ — предел текучести. Таким значениям σ_m отвечают деформации $\varepsilon < 10^{-3}$. Поэтому можно сделать вывод, что упругие деформации, вызванные внешним нагружением, снижают порог для зарождения мартенсита. В [5] говорится об ориентационном эффекте — появлении преимущественно большеугловых ориентировок пластин атермического мартенсита при упругом растяжении, указывающими на то, что одноосные упругие напряжения действуют избирательно, снижая барьер для зарождения кристаллов мартенсита одних ориентировок и повышая его для кристаллов остальных ориентировок. Анализ эффекта [6] позволяет сделать заключение, что барьер снижается, если напряжения приводят к сжатию и растяжениям, способствующим тем вариантам деформации Бейна, которые реализуются в мартенситной пластине, и повышается, если это не так. С другой стороны, эффект — дислокация, в частности, ничем не уступает в этом плане внешней нагрузке и может, стало быть, снижать барьер для зарождения мартенсита в каком-то месте или местах. Более того, имеются работы [7–10], свидетельствующие (в отношении $\gamma \to \alpha$ МП в сплавах железа по крайней мере) о причастности именно дислокаций к зарождению мартенсита и невозможности самопроизвольного МП в совершенном аустените.

Вместе с тем ясно, что на уровне упругих деформаций перестройку решетки, такую, скажем, как ГЦК $\to$ ОЦК(ОЦТ) по схеме Бейна, реализовать нельзя. Упругие сжатие и растяжения могут лишь сближать ГЦК и ОЦК(ОЦТ) решетки, способствуя деформации Бейна. Это обстоятельство и приводит к трудностям, когда нужно установить картину упругих деформаций, снижающих барьер для зарождения мартенсита, поскольку само понятие близости решеток, хотя и неявно постулируемое в ряде подходов, не является количественным. Для количественной же характеристики сближения требуется мера, выражающая различие между решетками числом. В принципе такая мера необходима и при изучении многих вопросов, связанных с сопряжением областей, сосуществующих в гетерогенном твердом теле и имеющих разные кристаллические решетки. Определение меры близости решеток и является основной целью работы. Конструктивность же предлагаемого определения иллюстрируется здесь на конкретном примере, представляющем интерес в связи с оценкой влияния упругого поля винтовой дислокации на выделенность ориентационного соответствия между ОЦК(ОЦТ) решеткой α-мартенсита и ГЦК решеткой γ-аустенита.

2. Пусть имеются решетки $\{\mathbf{X}\}$ и $\{\mathbf{X}'\}$. Требуется определить меру, характеризующую количественно различие между ними. Задачу эту можно и удобно, поскольку речь идет о приложениях к мартенситным превращениям, сформулировать иначе — в терминах отображений. Действительно, пусть решетки $\{\mathbf{X}\}$ и $\{\mathbf{X}'\}$ есть результат деформаций заданной решетки $\{\mathbf{r}\}$, описываемых отображениями

$$\mathbf{X}_i = \mathbf{L}\mathbf{r}_i, \quad \mathbf{X}'_r = \mathbf{T}\mathbf{r}_i; \quad i = 1, 2, 3, \tag{1}$$

где $\mathbf{X}_i, \mathbf{X}'_i, \mathbf{r}_i$ — векторы трансляций решеток $\{\mathbf{X}\}$, $\{\mathbf{X}'\}$, $\{\mathbf{r}\}$, соответственно.

Тогда близость решеток $\{\mathbf{X}\}$ и $\{\mathbf{X}'\}$ будет означать близость тензоров $\mathbf{L}$ и $\mathbf{T}$ и наоборот. Паре же тензоров $\mathbf{L}$ и $\mathbf{T}$ можно поставить в соответствие число

$$m(\mathbf{L}, \mathbf{T}) = \Big\{\mathrm{Sp}\big[(\mathbf{L} - \mathbf{T})(\mathbf{L}^* - \mathbf{T}^*)\big]\Big\}^{1/2}, \tag{2a}$$

имеющее смысл расстояния между точками, изображающими тензоры $\mathbf{L}$ и $\mathbf{T}$ в абстрактном девятимерном евклидовом пространстве, и удовлетворяющее условиям $m(\mathbf{L}, \mathbf{L}) = 0$, $m(\mathbf{L}, \mathbf{T}) > 0$ $(\mathbf{L} \neq \mathbf{T})$, $m(\mathbf{L}, \mathbf{T}) = m(\mathbf{T}, \mathbf{L})$, $m(\mathbf{L}, \mathbf{T}) \leqslant m(\mathbf{L}, \mathbf{F}) + m(\mathbf{F}, \mathbf{T})$, обычным для расстояния между точками; в (2a) и ниже звездочка при символе тензора означает транспонирование.

Заметим, что формула (2a), устанавливающая соответствие между числами и парами тензоров, получена путем обобщения формулы

$$m(A,B)=\left\{\sum_{i=1}^{3}(a_i-b_i)^2\right\}^{1/2},$$

которая каждой паре точек A и B трехмерного евклидового пространства ставит в соответствие число $m(A,B)$ — расстояние между точками. По его значениям можно судить о близости или удаленности точек. Положение точек A и B задается тройками чисел $\{a_i\}$ и $\{b_i\}$ — их координат относительно декартовой прямоугольной системы координат. Тензоры $\mathbf{L}$ и $\mathbf{T}$ второго ранга в этой системе координат представляются наборами $\{L_{in}\}$ и $\{T_{in}\}$ матричных элементов, где $i,n=1,2,3$, из девяти чисел каждый. Ничто не мешает, однако, рассматривать числа $\{L_{in}\}$ и $\{T_{in}\}$ как координаты точек (обозначим их, как и тензоры, через $\mathbf{L}$ и $\mathbf{T}$) в абстрактном девятимерном евклидовом пространстве и определить расстояние между ними формулой

$$m(\mathbf{L},\mathbf{T})=\left\{\sum_{i,n=1}^{3}(L_{in}-T_{in})^2\right\}^{1/2}$$

по аналогии с расстоянием между точками в трехмерном пространстве. От нее уже нетрудно перейти к формуле

$$m(\mathbf{L},\mathbf{T})=\left\{\sum_{i=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}(\mathbf{L}-\mathbf{T})_{in}(\mathbf{L}^*-\mathbf{T}^*)_{ni}\right\}^{1/2},$$

учитывая, что $(L_{in}-T_{in})^2=\left[(\mathbf{L}-\mathbf{T})_{in}\right]^2=(\mathbf{L}-\mathbf{T})_{in}\times\times(\mathbf{L}-\mathbf{T})_{in}=(\mathbf{L}-\mathbf{T})_{in}(\mathbf{L}^*-\mathbf{T}^*)_{ni}$, затем к формуле

$$m(\mathbf{L},\mathbf{T})=\left\{\sum_{i=1}^{3}\left[(\mathbf{L}-\mathbf{T})(\mathbf{L}^*-\mathbf{T}^*)\right]_{ii}\right\}^{1/2}$$

и, наконец, к формуле (2a), не зависящей явным образом от выбора системы координат.

Число (2a), характеризующее разницу между тензорами $\mathbf{L}$ и $\mathbf{T}$, естественно принять, учитывая (1), за характеристику различия между решетками $\{\mathbf{X}\}$ и $\{\mathbf{X}'\}$ и положить

$$m\big(\{\mathbf{X}\},\{\mathbf{X}'\}\big)=m(\mathbf{L},\mathbf{T}). \tag{2b}$$

Тогда оно будет служить мерой, позволяющей выразить в количественной форме свойства близости таких объектов, как решетки, и наряду с понятиями равенства (совмещения) и неравенства (несовмещения) решеток установить для них отношение порядка. В результате открывается возможность для решения на количественной основе задач, связанных с выбором решетки из некоторого множества решеток, наиболее близкой к заданной решетке. С другой стороны, величина $m(\{\mathbf{X}\},\{\mathbf{r}\})=m(\mathbf{L},\mathbf{I})$, где $\mathbf{I}$ — единичный тензор, может использоваться в качестве параметра порядка при описании деформационных фазовых переходов $\mathbf{L}\{\mathbf{r}\}\to\{\mathbf{X}\}$, который в отличие от тензора $\mathbf{L}$ является скалярным. Действительно, m принимает различные значения: $m(\mathbf{I},\mathbf{I})=0$ в исходной и $M(\mathbf{L},\mathbf{I})\neq 0$ в конечной фазах, характеризуя количественную разницу между ними. Наконец, в отношении определения (2) заметим, что абстрактное пространство точек, изображающих тензоры, не обязательно считать евклидовым. Можно выбрать и другую метрику (см., например, [11]), постулировав в зависимости от специфики задачи метрический тензор, отличный от единичного.

3. Формулировка свойства близости решеток в терминах отображений приводит к постановке задачи, достаточно интересной с точки зрения мартенситной проблематики. Возникает она в связи с трактовкой отображения $\{\mathbf{r}\}\to\{\mathbf{X}\}$ как последовательности отображений $\{\mathbf{r}\}\to\{\mathbf{X}'\}\to\{\mathbf{X}\}$ в соответствии с разложением [12] тензора $\mathbf{L}$ в произведение

$$\mathbf{L}=\mathbf{\Omega}\mathbf{E} \tag{3}$$

ортогонального $\mathbf{\Omega}$ и симметричного $\mathbf{E}$ тензоров. Решетки $\{\mathbf{X}'\}$ и $\{\mathbf{X}\}$ отличаются только их ориентацией относительно решетки $\{\mathbf{r}\}$. Поэтому, считая $\mathbf{E}$ в (3) заданным[1], можно определить множество $\big\{\{\mathbf{X}(\mathbf{\Omega})\}\big\}$ решеток, нумеруемых преобразованием $\mathbf{\Omega}$, и поставить вопрос о выборе решетки $\{\mathbf{X}(\mathbf{\Omega}_0)\}$, наиболее близкой к $\{\mathbf{r}\}$. Фактически этот вопрос о выделенности такого варианта ориентационного соответствия решеток, при котором разница между ними будет минимлаьной. Решение его сводится к решению задачи на экстремум (минимум) меры $m(\{\mathbf{X}(\mathbf{\Omega})\},\{\mathbf{r}\})=m(\mathbf{L}(\mathbf{\Omega}),\mathbf{I})$ в зависимости от $\mathbf{\Omega}$, где $\mathbf{\Omega}$, будучи поворотом, действует на произвольный вектор $\mathbf{a}$ согласно правилу $\mathbf{\Omega}\mathbf{a}=\big[\mathbf{I}\cos\varphi+(1-\cos\varphi)\mathbf{l}\cdot\mathbf{l}\big]\mathbf{a}+\sin\varphi[\mathbf{l},\mathbf{a}]$, $0\leqslant\varphi<2\pi$ — угол поворота, единичный вектор $\mathbf{l}$ задает ориентацию оси поворота.[2] Условие минимума, необходимое и достаточное, выражается в этом случае уравнением $\mathrm{Sp}(\mathbf{E}d\mathbf{\Omega})=0$. Оно эквивалентно системе уравнений $(d\mathbf{l},E\mathbf{l})(1-\cos\varphi)=0$, $[\mathrm{Sp}\mathbf{E}=(\mathbf{l},E\mathbf{l})\sin\varphi=0$ относительно φ и $\mathbf{l}$. Последняя удовлетворяется тождественно при $\varphi=0$ и любом $\mathbf{l}$. Этому решению отвечает $\mathbf{\Omega}_0=\mathbf{I}$. Следовательно, среди решеток $\big\{\{\mathbf{X}(\mathbf{\Omega})\}\big\}$ требованию максимальной близости к решетке $\{\mathbf{r}\}$ отвечает решетка $\{\mathbf{X}(\mathbf{I})\}=\{\mathbf{X}'\}$ и, значит, выделенным является ориентационное соответствие между решетками, связанными собственно деформацией $\mathbf{E}$.

4. Обратимся теперь к случаю ГЦК и ОЦК(ОЦТ) решеток (или γ и α в более кратких обозначениях). Разница между ними будет минимальной при ориентационном соответствии Бейна. Непосредственная проверка для

---

[1] Относительно подходов к кристаллографии мартенсита и построению тензоров $\mathbf{E}$ [13].

[2] Символы $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$, $(\mathbf{a},\mathbf{b})$, $[\mathbf{a},\mathbf{b}]$, используемые в тексте, означают соответственно тензорное, скалярное, векторное произведения векторов; действие тензора $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$ на вектор $\mathbf{c}$ определяется правилом $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\ \mathbf{c}=\mathbf{a}(\mathbf{b},\mathbf{c})$.

решеток α_B, α_N, α_{K-Z} трех ориентировок относительно γ решетки, отвечающих ориентационным соотношениям (ОС) Бейна, Нишиямы, Курдюмова–Закса, например, дает

$$m(\alpha_B,\gamma) < m(\alpha_N,\gamma) < m(\alpha_{K-Z},\gamma), \qquad (4)$$

где $m(\alpha,\gamma) = \{\mathrm{Sp}[(\mathbf{L}-\mathbf{I})(\mathbf{L}^*-\mathbf{I})]\}^{1/2}$; $\mathbf{L} = \boldsymbol{\Omega}\mathbf{E}$ — тензор, преобразующий γ-решетку, $\mathbf{E}$ и $\boldsymbol{\Omega}$ определяются формулами (П1) и (П2) из Приложения.

Итак, исходя из близости γ- и α-решеток, следует ожидать бейновского ориентационного соответствия между решетками γ-аустенита и α-мартенсита в сплавах железа. Оно и наблюдалось при МП в очень тонких пленках [14]. Для решеток же α-мартенсита массивных образцов характерны ориентировки, близкие к α_N или α_{K-Z}. Однако отношение порядка, устанавливаемое неравенствами (4) для решеток $\alpha_B, \alpha_N, \alpha_{K-Z}$, получено в предположении, что γ-решетка совершенна. Оно может измениться, если γ-решетка отличается от совершенной. Изучение подобных случаев представляет интерес, поскольку современные концепции зарождения мартенсита, гетерогенного или гомогенного (в смысле работы [1]), совместимы с такой идеализацией, как совершенный γ-аустенит, в качестве модели структурного состояния, предшествующего МП.

5. Допустим, что искажения аустенита обусловлены винтовой дислокацией характеристического для ГЦК решеток направления $\boldsymbol{\gamma} = \langle 110\rangle_\gamma/\sqrt{2}$. Тензор дисторсии $\boldsymbol{\chi}$, описывающий в континуальном приближении упругие искажения решетки вокруг бесконечной винтовой дислокации с линией $\langle 110\rangle_\gamma$ и вектором Бюргерса $\mathbf{b} = b\boldsymbol{\beta}$ в неограниченном кристалле кубической симметрии, выражается формулой $\boldsymbol{\chi} = 2\tilde{\varepsilon}\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{i}$, где $\mathbf{i} = [\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\tau}]$, $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{r} = [\boldsymbol{\tau},[\mathbf{r}_O,\boldsymbol{\tau}]]$, радиус-вектор $\mathbf{r}_O$ определяет положение точки в совершенном аустените относительно полюса O, выбранного на линии дислокации, $\tilde{\varepsilon} = bA^{1/2}(4\pi r f)$, A — параметр упругой анизотропии,

$$f = A + 2(1-A)\sum_{n=1}^{3}(\mathbf{e}_n,\boldsymbol{\tau})^2(\mathbf{e}_n,\mathbf{i})^2, \qquad (5)$$

$\{\mathbf{e}_n\}$ — правая тройка ортов, направленных вдоль осей симметрии четвертого порядка.

Обозначим через γ' решетку несовершенного аустенита и будем рассматривать ее как результат отображения $\gamma \to \gamma'$ решетки совершенного аустенита, описываемого тензором $\mathbf{T} = \mathbf{I} + \boldsymbol{\chi}$. Местонахождение точек, в окрестности которых мера различия между решеткой $\gamma'(\mathbf{T})$ и решеткой $\alpha(\mathbf{L})$ заданной ориентировки достигает абсолютного минимума, определяется из решения уравнения $\mathrm{Sp}\{(\mathbf{L}^*-\mathbf{T}^*)[(\partial\mathbf{T}/\partial r)dr + (d\boldsymbol{\rho},\partial/\partial\boldsymbol{\rho})\mathbf{T}]\} = 0$, выражающего необходимое и достаточное условия минимума меры $m(\alpha(\mathbf{L}),\gamma'(\mathbf{T})) = \{\mathrm{Sp}[(\mathbf{L}-\mathbf{T})(\mathbf{L}^*-\mathbf{T}^*)]\}^{1/2}$. Уравнение это эквивалентно системе уравнений $(\boldsymbol{\rho},(\mathbf{L}^*-\boldsymbol{\chi}^*)\boldsymbol{\beta}) = 0$, $(\mathbf{i},(\mathbf{L}^*-\boldsymbol{\chi}^*)\boldsymbol{\beta}) = 0$ относительно r и $\boldsymbol{\Omega}$, удовлетворяющейся тождественно при $r = r_a$ и $\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}_a$, где $r_a = 2b\tilde{\varepsilon}_a/J$, $\boldsymbol{\rho}_a = [\boldsymbol{\tau},\mathbf{i}_a]$, $\mathbf{i}_a = (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\tau})\mathbf{J}/J$, $\mathbf{J} = [\boldsymbol{\tau},[\mathbf{L}^*\boldsymbol{\tau},\boldsymbol{\tau}]]$, $\tilde{\varepsilon}_a = A^{1/2}/(4\pi f_a)$, f_a — значение функции (5) при $\mathbf{i} = \mathbf{i}_a$. Упругие искажения решетки совершенного аустенита в точках, удаленных в направлении $\boldsymbol{\rho}_a$ на расстояние r_a линии дислокации, описываются тензором $\mathbf{T} = \mathbf{T}_a$, где $\mathbf{T}_a = \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{J}$. Тензор $\mathbf{T} = T_a$ отображает решетку γ в решетку $\gamma'_a = \gamma'(\mathbf{T}_a)$, максимально близкую к решетке $\alpha(\mathbf{L})$. Различие между ними характеризуется наименьшим значением меры $m(\alpha(\mathbf{L}),\gamma'(\mathbf{T}))$

$$m_a(\alpha(\mathbf{L}),\gamma'_a) = [m^2(\alpha(\mathbf{L}),\gamma) - J^2]^{1/2}. \qquad (6)$$

При заданном $\mathbf{L} = \boldsymbol{\Omega}\mathbf{E}$ (т.е. при заданной взаимной ориентации α- и γ-решеток в данном случае) не все дислокации из рассматриваемого семейства одинаково сближают решетки $\alpha(\mathbf{L})$ и γ в указанных точках. Наименьшим (обозначим их $m_a(\alpha_B,\gamma'_a)$, $m_a(\alpha_N,\gamma'_a)$, $m_a(\alpha_{K-Z},\gamma'_a)$) среди значений (6) отвечают дислокации (четыре, две и одна соответственно), линии которых образуют наименьшие углы с направлениями, входящими в ОС Бейна, Нишиямы, Курдюмова–Закса. Расчеты же с использованием данных из [5] о параметрах γ- и α-решеток показывают, что $m_a(\alpha_{K-Z},\gamma'_a) < m_a(\alpha_N,\gamma'_a), m_a(\alpha_B,\gamma'_a)$.

Таким образом, отношение порядка для решеток $\alpha_B, \alpha_N, \alpha_{K-Z}$ изменяется на противоположное, если их сравнивать с решеткой γ'_a, и выделенной становится ориентировка Курдюмова–Закса при условии, что направление $\boldsymbol{\Lambda}$, входящее в ОС Курдюмова–Закса, параллельно линии дислокации. Обсуждением этого случая и ограничимся, полагая для определенности $\mathbf{p} = [001]_\gamma$, $\boldsymbol{\Lambda} = -\boldsymbol{\tau} = [\bar{1}01]_\gamma/\sqrt{2}$, $\mathbf{N} = [111]_\gamma/\sqrt{3}$ в формулах (П1), (П2). Расстояние r_a и направление $\boldsymbol{\rho}_a$ будут тогда выражаться формулами

$$r_a = bA^{1/2}(2\pi J), \quad \boldsymbol{\rho}_a = (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\tau})[0\bar{1}0]_\gamma, \qquad (7)$$

где $J = \kappa(2-t^2)[2(2+t^2)]^{-1/2}$. Значения J варьируются в пределах 0.27–0.33 в зависимости от значений κ и t, а r_a/b — в пределах $(0.48-0.58)A^{1/2}$. Заметим, что искажения аустенита, обусловленные дислокацией, неоднородны и убывают при удалении от линии дислокации. Поэтому область, в которой соответствие Курдюмова–Закса между решетками α и γ' еще не проигрывает по сравнению с соответствием Бейна, должна иметь конечные размеры в поперечном сечении $(\bar{1}01)_\gamma$. Положение точек этого сечения удобно задать радиус-векторами $\mathbf{r} = r(\boldsymbol{\rho}_a\cos\psi + \mathbf{i}_a\sin\psi)$ в базисе, образованном векторами $\boldsymbol{\rho}_a$ (см. формулы (7)) и $\mathbf{i}_a = (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\tau})[101]_\gamma/\sqrt{2}$, где r и ψ определяются условием $m(\alpha_{K-Z},\gamma'(\mathbf{T})) \leqslant m(\alpha_B,\gamma)$, которое в свою очередь приводит к неравенствам

$$\Gamma_-(\psi) \leqslant r/r_a \leqslant \Gamma_+(\psi), \quad -\psi_c \leqslant \psi \leqslant \psi_c,$$

где $\Gamma_\pm = [\cos\psi \pm (\cos^2\psi - \cos^2\psi_c)^{1/2}]/(f\cos^2\psi_c)$, $\cos^2\psi_c = [m^2(\alpha_{K-Z},\gamma) - m^2(\alpha_B,\gamma)]/J^2$, $f = A - -(A-1)\cos^2\psi$.

Значения угла ψ_c в зависимости от значений κ и t варьируются в пределах $(0.190-0.195)\pi$. Максимальный размер рассматриваемого сечения в направлении $\boldsymbol{\rho}_a$ выражается формулой $2r_a \sin\psi_c/\cos^2\psi_c$ и составляют величину $(1.64-1.73)r_a$. Максимальный же размер в направлении $\mathbf{i}_a$ можно оценить по формуле

$$(2/A)^{1/2} r_a \Big\{ 2\sin^2\psi_c - A^{-1} + \big[A^{-2} + 4(1 - A^{-1})\sin^2\psi_c\big]^{1/2}\Big\}^{1/2} / \cos\psi_c.$$

При $A \gg 1$ этот размер слабо зависит от A и приблизительно равен $1.5b$.

Итак, сравнение решеток $\alpha_B, \alpha_N, \alpha_{K-Z}$ с решеткой аустенита, отличающейся от совершенной в окрестности винтовой дислокации, указывает на выделенность ориентировки Курдюмова–Закса в области, имеющей форму цилиндра (некругового), параллельного линии дислокации. В поперечном сечении эта область характеризуется двумя размерами: наименьшим в направлении $\mathbf{i}_a$ и наибольшим в направлении $\boldsymbol{\rho}_a$. Первый слабо зависит от параметра упругой анизотропии и близок к $1.5b$. Второй же пропорционален $A^{1/2}$ и достигает величины двух–трех десятков b лишь при $A \geqslant 300$. Следовательно, размеры эти сравнимы с размерами, обычно принимаемыми [16] для зародыша α-мартенсита, если упругая анизотропия велика. Такая анизотропия нехарактерна для объемных упругих свойств сплавов железа (в сплавах Fe–Ni инварного состава, например $A \approx 4$ [17], но в принципе реализуема в системах с достаточно заметным смягчением упругого модуля C' вблизи температуры начала МП. Не исключено также и существование локальных областей вблизи дефектов, где можно ожидать [18] частичного смягчения упругих модулей и снижения устойчивости.

Если сближение γ- и α-решеток ведет к снижению барьера для зарождения α-мартенсита, то упругое поле винтовой дислокации обеспечивает наиболее выгодные условия для зарождения мартенсита с решеткой α_{K-Z}, вызывая не только собственно деформацию аустенитной решетки, но и ее поворот. Деформация описывается тензором деформаций $\boldsymbol{\epsilon} = (\boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\chi}^*)/2$ и представляет собой растяжение $\varepsilon_1 = \tilde{\varepsilon}$ и сжатие $\varepsilon_2 = -\tilde{\varepsilon}$ в направлениях $\boldsymbol{\xi}_1 = (\mathbf{i} + \boldsymbol{\beta})/\sqrt{2}$ и $\boldsymbol{\xi}_2 = (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\tau})(\mathbf{i} - \boldsymbol{\beta})/\sqrt{2}$. В случае дислокации с линией $\boldsymbol{\tau} = [10\bar{1}]_\gamma/\sqrt{2}$, в частности, $\tilde{\varepsilon} = bA^{1/2}\{4\pi r[A + (1 - A)\cos^2\psi]\}^{-1}$, $\mathbf{i} = \mathbf{i}_a\cos\psi - \boldsymbol{\rho}_a\sin\psi$, где $\mathbf{i}_a$ и $\boldsymbol{\rho}_a$ определены выше. Следовательно, при фиксированном r и $A > 1$ именно в направлении $\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}_a$, где $\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}_a\cos\psi + \mathbf{i}_a\sin\psi$, растяжение и сжатие достигают максимальных значений, а $\boldsymbol{\xi}_1$ и $\boldsymbol{\xi}_2$ совпадают (если $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\tau}$) с направлениями $[100]_\gamma$ и $[001]_\gamma$, характерными для растяжения и сжатия при деформации Бейна с осью сжатия $\mathbf{p} = [001]_\gamma$. Это согласуется с направлениями $\boldsymbol{\Lambda} = [\bar{1}01]_\gamma/\sqrt{2}$ и $\mathbf{N} = [111]_\gamma/\sqrt{3}$ в ОС Курдюмова–Закса. Последнее немаловажно с точки зрения упругой модели дислокационного центра зарождения (ДЦЗ) мартенсита [3]. В модели ДЦЗ выгодные для зарождения места связываются с окрестностью точек, в которых реализуются растяжение и сжатие аустенита вдоль ортогональных направлений, близкие к экстремальным для задаваемой дислокации. Так что выводы относительно мест, благоприятных для зарождения α-мартенсита, следующие из модели ДЦЗ в случае винтовой дислокации, не расходятся с выводами, полученными на основе определения (2) меры близости решеток. В плане сопоставления с упругой моделью ДЦЗ уместно также напомнить, что для любого из рассмотренных ориентационных вариантов α-решетки выделенными всегда оказываются ориентировки, при которых направление, входящее в ОС, образует наименьший угол именно с направлением линии дислокации. Тем самым независимо подтверждаются выводы работы [19] в отношении винтовой дислокации, а также представления работы [3] о взаимосвязи упругого состояния центра зарождения и морфологии мартенсита.

6. Подведем итоги. Исследование взаимной ориентировки решеток α-мартенсита и γ-аустенита, непосредственно связанных с их близостью, приводит к разумным результатам для совершенной и несовершенной решеток γ-аустенита. Это обстоятельство свидетельствует в пользу конструктивности определения (2) меры близости решеток.

Понятие близости решеток, выраженное в количественной форме, расширяет возможности геометрического подхода к изучению влияния упругугого поля дефекта на барьер для зарождения мартенсита, позволяя установить отношение порядка для решетки несовершенного аустенита и задаваемой решетки. Причем последняя может и не совпадать с решеткой мартенсита, а постулироваться на основе представлений о деформациях, обеспечивающих наиболее выгодные условия для перехода к новому структурному состоянию на стадии зародышеобразования, как это делается например, в модели ДЦЗ. Деформация, постулируемая в модели ДЦЗ, и по характеру (деформация со слабоискаженными плоскостями), и по величине $\sim 10^{-4}-10^{-3}$ пороговых растяжениях и сжатия существенно отличается от бейновской. Использование понятия близости решеток применительно к модели ДЦЗ, а также для исследования наиболее выгодных вариантов частично когерентного сопряжения решеток α-мартенсита и γ-аустенита может служить предметом отдельного рассмотрения.

Приложение

Тензор $\mathbf{E}$, описывающий $\gamma \to \alpha$ перестройку по Бейну, можно выразить формулой

$$\mathbf{E} = \kappa\sqrt{2}\Big\{\mathbf{I} + \big[(t/\sqrt{2}) - 1\big]\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}\Big\}, \qquad (\text{П}1)$$

где $\kappa = a_\alpha/a_\gamma$, $t = c_\alpha/a_\alpha$, a_γ — параметр γ-решетки, a_α и c_α — параметры α-решетки; $\mathbf{p} = \langle 100\rangle_\gamma$ задает ориентацию оси бейновского сжатия.

Поворот $\mathbf{\Omega}$, обеспечивающий после деформации Бейна ориентационное соответствие Нишиямы и Курдюмова–Закса между γ- и α-решетками, выражается формулой

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{N} \cdot \mathbf{e} + \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{e}' + [\mathbf{N}, \mathbf{\Lambda}] \cdot [\mathbf{e}, \mathbf{e}'], \qquad (\Pi 2)$$

где $\mathbf{e} = (\mathbf{N}, \mathbf{E}^{-2}\mathbf{N})^{-1/2}\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}$, $\mathbf{e}' = (\mathbf{\Lambda}, \mathbf{E}^2\mathbf{\Lambda})^{-1/2}\mathbf{E}\mathbf{\Lambda}$; $\mathbf{N} = \langle 111 \rangle_\gamma / \sqrt{3}$ — вектор нормали к плоскости, входящей в ОС Нишиямы и Курдюмова–Закса; $\mathbf{\Lambda}$ задает направление, входящее в ОС, $\mathbf{\Lambda} = \sqrt{6}\big[\mathbf{N}, [\mathbf{p}, \mathbf{N}]\big]/2$ при ориентационном соответствии Нишиямы и $\mathbf{\Lambda} = \sqrt{6}\Big\{[\mathbf{p}, \mathbf{N}] \pm \sqrt{3}\big[\mathbf{N}, [\mathbf{p}, \mathbf{N}]\big]\Big\}/4$ при соответствии Курдюмова–Закса.

Список литературы

[1] *Кондратьев В.В., Пушин В.Г.* // ФММ. 1985. Т. 60. № 4. С. 629–650.

[2] *Верещагин В.П., Кащенко С.М.* // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 5. С. 287–289.

[3] *Верещагин В.П., Кащенко М.П.* // МиТОМ. 1994. № 7. С. 5–11.

[4] *Саррак В.И., Суворова С.О.* // Изв. АН СССР. Металлы. 1982. № 6. С. 90–97.

[5] *Леонтьев А.А., Счастливцев В.М., Ромашов Л.Н.* // ФММ. 1984. Т. 58. № 5. С. 950–957.

[6] *Кащенко М.П.* // ФММ. 1984. Т. 58. № 5. С. 852–869.

[7] *Easterling K.E., Thölen A.R.* // Acta Met. 1976. Vol. 24. P. 333–341.

[8] *Винтайкин Е.З.* // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. М.: ВИНИТИ, 1983. Т. 17. С. 3–63.

[9] *Easterling K.E., Miekk-oja H.M.* // Acta Met. 1967. Vol. 15. P. 1133–1141.

[10] *Monzen R., Sato A., Mori T.* // Trans. JIM. 1981. Vol. 22. N 1. P. 65–73.

[11] *Верещагин В.П.* // Изв. вузов. Физика. Томск, 1996. 16 с. Деп. ВИНИТИ. № 3010-В96. М., 1996.

[12] *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.

[13] *Кристиан Дж.У.* // Физическое металловедение. М.: Мир, 1968. Вып. 2. С. 227–346.

[14] *Nichiyama Z., Shimizu K., Sugino K.* // Acta Met. 1961. Vol. 9. P. 620.

[15] *Gu N.J.* // Proc. Intern. Conf. Martensite Transform. Japan: Inctitute of Metals, 1986. P. 325–330.

[16] *Петров Ю.Н.* Дефекты и бездиффузионное превращение в стали. Киев: Наукова думка, 1978. 262 с.

[17] *Haush G., Warlimont H.* // Acta Met. 1973. Vol. 21. N 4. P. 401–414.

[18] *Guenin G., Clapp P.C.* // Proc. Intern. Conf. Martensite Transform. Nara (Japan), 1986. P. 171–179.

[19] *Верещагин В.П., Кащенко М.П.* // ФТТ. 1991. Т. 33. Вып. 5. С. 1605–1607.