

01,07

# Неадиабатическая динамика атомов и кинетика фазовых превращений в твердых телах

© Ю.А. Хон

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,  
Томск, Россия

E-mail: khon@ispms.ru

Поступила в Редакцию 26 января 2024 г.

В окончательной редакции 26 января 2024 г.

Принята к публикации 27 января 2024 г.

Предложена модель фазовых превращений в твердых телах, учитывающая взаимосвязь нелинейных процессов, протекающих на различных пространственно-временных масштабах в нелинейной открытой системе ядер и электронов. Характерные времена структурных изменений определяются двумя механизмами смещений атомов: термически активируемым при тепловых флуктуациях и атермическим при неадиабатических переходах атомов Ландау–Зинера. Кооперативные процессы на больших пространственно-временных масштабах описываются двумя параметрами порядка. Макроскопическая кинетика фазового превращения определяется двумя связанными нелинейными уравнениями параболического типа для параметров порядка. Указанные уравнения имеют два типа решений, описывающих характерные особенности морфологических изменений в твердом теле при диффузионных и мартенситных фазовых превращениях. Зарождение и рост новой фазы при диффузионных фазовых превращениях описываются решениями в виде волны переключения из метастабильной фазы в стабильную. Образование зародыша новой фазы определяется структурными изменениями на атомных масштабах. Термоупругие и реконструктивные мартенситные превращения описываются решениями в виде статических автосолитонов — локализованных распределений параметров порядка. Термоупругие мартенситные превращения развиваются на фоне меняющегося ближнего порядка, определяемого атермическими смещениями атомов. Реконструктивные мартенситные превращения определяются атермическими смещениями в неустойчивой фазе, и наличие каких-либо источников начальных возмущений не требуется.

**Ключевые слова:** фазовые превращения, неадиабатическая динамика атомов, атермические смещения, параметры порядка, кинетика, диффузионные превращения, термоупругие мартенситные превращения, реконструктивные мартенситные превращения.

DOI: 10.61011/FTT.2024.03.57473.7

## 1. Введение

Фазовые переходы первого рода (ФП) в твердых телах (полиморфные, диффузионные и мартенситные превращения, кристаллизация аморфной фазы, распад твердого раствора и др.) широко распространены в природе и играют ключевую роль в изменении микроструктуры и свойств различных материалов. По этой причине экспериментальному и теоретическому изучению фазовых превращений уделялось и уделяется большое внимание [1–18]. Установлено, что в зависимости от химического состава, температуры, скорости нагрева/охлаждения механизмы и кинетика фазового превращения могут быть разными, что отражается на морфологии полученного продукта. При сравнительно высоких температурах и в условиях, близких к равновесным (малые скорости нагрева/охлаждения), фазовое превращение относят к диффузионным, механизмом которого считаются термически активируемые смещения атомов. В интервале температур  $\Delta T$  новая фаза растет за счет старой фазы. Метастабильная фаза становится неустойчивой относительно малых возму-

щений плотности вне интервала  $\Delta T$  при температуре ниже (выше)  $T_{in}$  при охлаждении (нагреве). Фазовые превращения, определяемые атермическими сдвиговыми смещениями атомов, относят к мартенситным (бездиффузионным). Их отличительная особенность состоит в том, что внутри интервала превращения с самого начала образуются кристаллы новой фазы, которые при дальнейшем изменении температуры не растут. Доля новой фазы увеличивается за счет образования новых кристаллов. Деформация кристаллов носит преимущественно сдвиговой характер, объемные изменения при фазовом превращении малы. Различают термоупругие и реконструктивные мартенситные превращения. Типичным представителем систем с термоупругим мартенситным превращением (ТМП) являются сплавы на основе титана. ТМП могут развиваться в условиях, близких к равновесным. На равновесной диаграмме состояния сплавов имеется двухфазная область, отделяющая аустенитную фазу от мартенситной. При  $T < A_f$  ( $T > M_f$ ) имеется только одна мартенситная (аустенитная) фаза. В интервале  $M_s < T < A_s$  аустенитная и мартенситная фазы находятся в равновесии. Здесь  $A_s$ ,  $A_f$

( $M_s$ ,  $M_f$ ) общепринятые обозначения температур начала и конца интервала превращения аустенита (мартенсита) в мартенсит (аустенит) соответственно. Переходу из аустенитной (мартенситной) фазы в мартенситную (аустенитную) предшествует предпереходное состояние. В этом состоянии наблюдается ближний порядок, нехарактерный для аустенитной (мартенситной) фазы. При реконструктивных мартенситных превращениях (РМП) образование фазы с другой кристаллической структурой (ГЦК  $\rightarrow$  ОЦК, ОЦК  $\rightarrow$  ГПУ и пр.) происходит при быстром охлаждении до низких температур. Например, в сплавах железа внедрения, замещения РМП наблюдаются при охлаждении до температур в интервале  $M_s - M_f$ . Разность температур может достигать сотен Кельвинов. При охлаждении ниже температуры  $M_f$  новая фаза не образуется. При РМП объемная доля мартенситной фазы всегда меньше единицы. На равновесной диаграмме состояния двухфазная область отсутствует. Предпереходные состояния, равно как и зародыши новой фазы, не наблюдаются. В отдельных твердых телах в зависимости от температуры и скорости охлаждения фазовые превращения могут протекать как по одному, так и по другому механизму.

Существующее разнообразие фазовых превращений обусловлено совокупностью сложных взаимосвязанных нелинейных процессов, протекающих на различных пространственно-временных масштабах. Макроскопическая кинетика фазового превращения, в конечном счете, определяется динамикой атомов. В большинстве существующих моделях фазовых превращений предполагается, что динамика атомов и, следовательно, кинетика превращения определяются только колебательными степенями свободы, вклад электронных степеней свободы в динамику атомов не учитывается, неявно предполагается выполнимость адиабатического приближения (электроны мгновенно подстраиваются под медленное движение ядер). В этом случае переход из метастабильной фазы в стабильную возможен по механизму гетерогенного зарождения. Новая фаза начинает расти, если зародыш новой фазы, образовавшийся в метастабильной фазе за счет тепловых флуктуаций, превышает критическое значение. Присутствующие в метастабильной фазе дефекты различного типа могут понижать высоту потенциального барьера, увеличивая вероятность образования критического зародыша. Переходы через потенциальные барьеры промежуточных состояний также повышают вероятность образования зародыша [12–15]. С дефектами и промежуточными состояниями связываются и наблюдаемые в ряде случаев повышенные скорости движения межфазных границ. Вместе с тем применимость модели гетерогенного зарождения к мартенситным превращениям вызывает сомнение. В частности, при низких температурах и высоких скоростях охлаждения скорость образования критического зародыша может быть намного меньше наблюдаемой скорости превращения, сравнимой во многих случаях со скоростью звука.

Твердое тело при фазовом превращении является открытой системой ядер и электронов. В такой системе имеются два пути смещения атомов из положений равновесия. Первый путь, как и в изолированной системе, определяется тепловыми флуктуациями при колебаниях атомов. Реализуется термически активируемый механизм смещений атомов. Вероятность смещений экспоненциально уменьшается с понижением температуры. Второй путь определяется неадиабатическими переходами атомов Ландау–Зинера (ЛЗ) при электронных переходах между пересекающимися поверхностями потенциальной энергии [19–24]. При этом потенциальная энергия системы всегда понижается. Реализуется атермический механизм смещения атомов. Вероятность неадиабатических переходов ЛЗ от температуры не зависит. Изменение межатомных взаимодействий при неадиабатических переходах ЛЗ приводит к смещениям ядер, выводит систему из прежнего положения равновесия и сопровождается понижением потенциальной энергии системы. Смещения атомов при неадиабатических переходах ЛЗ для краткости в [25,26] были названы динамическими смещениями (ДС). В открытой системе изменение кристаллической структуры (фазовое превращение) возможно и без образования критического зародыша. Заметим, что в теории Зельдовича [1] такой вариант фазового превращения не исключался. В теории предполагается, что в системе имеется докритический зародыш. Механизм его образования может быть как термически активируемым, так и атермическим. Кинетика роста зародыша определяется скоростью перехода атомов из метастабильной фазы на зародыш, а сама скорость зависит от механизмов роста зародыша. Каких-либо ограничений на механизмы роста зародыша и его размеры не накладывалось. Сами же механизмы определяются динамикой атомов.

Механизм образования зародышей новой фазы в твердом теле, определяемый неадиабатическими переходами Ландау–Зинера в открытой системе ядер и электронов, был предложен в работе [26]. Найдены условия образования устойчивых и неустойчивых зародышей. Настоящая работа является продолжением [26] и ставит своей целью решение задачи о кинетике фазового превращения при термически активируемых и атермических смещениях атомов.

## 2. Модель фазового превращения

Рассматривается однородное твердое тело, в котором при ФП меняется только топологический ближний порядок. Твердое тело может быть как однокомпонентным, так и многокомпонентным, как кристаллическим, так и аморфным. Фазовые превращения, протекающие в интервале температур  $\Delta T$ , сопровождаются изменением объема  $\Delta V$ , поглощением/выделением тепла. Внутри интервала  $\Delta T$  одновременно существуют новая и старая фазы. На кривой зависимости  $V$  от  $T$  имеется

петля гистерезиса. Макроскопические характеристики системы  $\Delta T, \Delta V$  предполагаются известными. Две фазы находятся в равновесии при температуре  $T_0$ . Фазу, в которой образуется зародыш (зародыши) новой фазы, будем называть родительской. Тогда при охлаждении родительской будет фаза, стабильная при  $T > T_0$ , а при нагреве — при  $T < T_0$ . Введем безразмерную температуру  $\theta = \frac{T-T_0}{T_0}$ ,  $(\theta = \frac{T_0-T}{T_0})$  и скорость ее изменения  $\dot{\theta} = \dot{T}/T_0$  ( $\dot{T} = dT/dt$ ,  $t$  — время) при нагреве (охлаждении) системы. При фазовом превращении объем системы  $V(\theta)$  меняется от  $V_p(\theta)$  в родительской фазе до  $V_n(\theta)$  в новой фазе. Уравнения состояния  $V_p = V_p(\theta)$ ,  $V_n = V_n(\theta)$  предполагаются известными. Относительное изменение объема  $\vartheta(\theta) = [V(\theta) - V_p(\theta)]/V_p(\theta)$  характеризует отклик системы на протекающие в среде процессы при температуре  $\theta$ .

Относительное изменение объема  $\vartheta_n = [V_n - V_p]/V_p$  при фазовом превращении определяется суммой диагональных элементов тензора макроскопической деформации фазовым превращением. В системе координат, связанной с главными осями, рассматриваются [27] три главных значения тензора деформации  $\varepsilon_j$ . Здесь  $j = 1, 2, 3$ . Локальное изменение объема системы  $\vartheta(\mathbf{r}, \theta)$  равно первому инварианту тензора деформации  $I_1(\mathbf{r}, \theta) = \varepsilon_1(\mathbf{r}, \theta) + \varepsilon_2(\mathbf{r}, \theta) + \varepsilon_3(\mathbf{r}, \theta)$ , а локальная сдвиговая деформация определяется вторым инвариантом  $I_2(\mathbf{r}, \theta) = \varepsilon_1(\mathbf{r}, \theta)\varepsilon_2(\mathbf{r}, \theta) + \varepsilon_1(\mathbf{r}, \theta)\varepsilon_3(\mathbf{r}, \theta) + \varepsilon_2(\mathbf{r}, \theta)\varepsilon_3(\mathbf{r}, \theta)$ . Здесь  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор точки в декартовой системе координат  $x = x_1, y = x_2, z = x_3$ . Функции  $I_1(\mathbf{r}, \theta)$ ,  $I_2(\mathbf{r}, \theta)$  задают пространственное распределение новой фазы, а  $\langle I_1(\mathbf{r}, \theta) \rangle$ ,  $\langle I_2(\mathbf{r}, \theta) \rangle$  — объемную долю новой фазы. Символ  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по объему системы. При этом  $\vartheta = \langle I_1(\mathbf{r}, \theta) \rangle$ . Скорость протекающих при фазовом превращении процессов должна удовлетворять неравенству  $\langle \dot{I}_1(\mathbf{r}, t) \rangle \geq \dot{V}_p$ . Величина  $\dot{V}_p = dV_p/dt$  задается скоростью нагрева/охлаждения системы.

Деформация фазовым превращением определяется смещениями атомов из положений  $\mathbf{R}_0 = \{\mathbf{R}_{01}, \dots, \mathbf{R}_{0N}\}$  в родительской фазе в положения  $\mathbf{R}_n = \{\mathbf{R}_{n1}, \dots, \mathbf{R}_{nN}\}$  в новой фазе. Траектории атомов переходят с поверхности потенциальной энергии (ППЭ) родительской фазы  $E_0(\mathbf{R})$  на ППЭ новой фазы  $E_n(\mathbf{R})$ . Каждая ППЭ представляет гиперповерхность в  $3N$  — мерном пространстве со своими минимумами и разделяющих их потенциальными барьерами [28,29]. Потенциальная энергия родительской (новой) фазы в точке минимума  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$  ( $\mathbf{R} = \mathbf{R}_n$ ) равна  $E_0[\mathbf{R}_0]$  ( $E_n[\mathbf{R}_n]$ ). В открытой системе ядер и электронов траектории всех атомов должны проходить через ППЭ  $E_\gamma(\mathbf{R}_\gamma)$ , расположенные между ППЭ  $E_0$  и  $E_n$ . Здесь  $\gamma = 1, \dots, m-1$  — номер ППЭ. Для ППЭ  $E_0(E_n)$   $\gamma = 0(m)$ . ППЭ различаются распределением ядер, электронов и межатомными взаимодействиями. Среднее значение энергетического интервала между двумя соседними ППЭ  $\Delta E_\gamma \approx (E_n - E_0)/N$ . Высота потенциального барьера, разделяющего минимумы на двух

соседних ППЭ, по порядку величины равна  $\Delta E_\gamma$ . При большом числе ППЭ  $\Delta E_\gamma \ll k_B T$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана. При изменении объема системы в результате нагрева/охлаждения ППЭ смещаются друг относительно друга и пересекаются. В этих условиях возможны два механизма перехода с одной ППЭ на другую.

Термически активируемый механизм смещений определяется переходами атомов между ППЭ при тепловых флуктуациях. При этом электронная подсистема мгновенно подстраивается к другому распределению ядер. Вероятность  $P_{1th}$  и время перехода  $t_{1th}$  между соседними ППЭ определяются известными выражениями

$$P_{1th} \propto \exp\left(-\frac{\Delta E_\gamma}{k_B T}\right), \quad (1)$$

$$t_{1th} \propto \exp\left(\frac{\Delta E_\gamma}{k_B T}\right). \quad (2)$$

Атермический механизм смещений определяется вероятностью  $P$  неадиабатического перехода атомов между двумя пересекающимися ППЭ за счет электронной подсистемы с последующим смещением ядер. Для системы из двух атомов, энергетические уровни которой вблизи точки пересечения имеют одинаковые знаки производных от потенциальной энергии по координате [19]:

$$P = \exp(-2\pi W_0^2/(\hbar v |F_2 - F_1|)). \quad (3)$$

Здесь  $v$  — скорость смещения атомов, определяемая скоростью изменения объема при нагреве/охлаждении,  $F_1, F_2$  — производные от потенциальной энергии по координате вблизи точки пересечения энергетических уровней 1 и 2 соответственно,  $2W_0$  — ширина энергетической щели между уровнями. Характерное время одного перехода

$$t_{1LZ} = W_0/(v|F_2 - F_1|) \quad (4)$$

от температуры не зависит, уменьшается с увеличением  $v$ . При двух независимых процессах

$$1/t_1 = 1/t_{1LZ} + 1/t_{1th}. \quad (5)$$

Из (2)–(5) видно, что при высоких температурах и малых скоростях нагрева/охлаждения  $t_{1th} \ll t_{1LZ}$  и  $t_1 = t_{1th}$ . При низких температурах и/или больших скоростях нагрева/охлаждения  $t_1 = t_{1LZ}$ . Неадиабатическими переходами атомов определяется атермический механизм смещений, присущий мартенситным превращениям.

С учетом сказанного выше смещения атомов  $\mathbf{u}(t) = \mathbf{R}_n(t) - \mathbf{R}_0(t)$  записываются в виде

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}_d(t) + \mathbf{u}_{el}(t). \quad (6)$$

Здесь  $\mathbf{u}_d = \{\mathbf{u}_{d1}, \dots, \mathbf{u}_{dn}\}$  — динамические смещения атомов, вызванные изменением межатомных взаимодействий,  $\mathbf{u}_{el}$  — смещения, определяемые колебательными степенями свободы. Распределением атомов с координатами  $\mathbf{R}_0 + \mathbf{u}_d$  определяется динамический ближний порядок (ДБП), нехарактерный для родительской фазы [25].

При пороговых значениях  $u_d$  система с ДБП становится неустойчивой относительно малых смещений при колебаниях атомов. Нахождение ДС сводится к решению уравнений неадиабатической динамики атомов (НДА), в которых объем системы является управляющим параметром. Но из-за нелинейности уравнений НДА любые малые возмущения (например, смена набора ППЭ) приводят к разным крупномасштабным распределениям ДС. В результате прогноз динамики системы на больших пространственных и/или временных масштабах становится неоднозначным. В этой ситуации для нахождения крупномасштабных распределений ДС, которые определяют макроскопические свойства системы, используется подход, развитый в теории нелинейных систем [30]. Для ясности дальнейшего изложения отметим основные моменты. Как и в [26], рассматривается одномерный случай.

## 2.1. Параметры порядка

Обозначим через  $\bar{u}_d$  однородное стационарное распределение ДС при  $\theta > 0$ . Рассмотрим статическую волну смещений  $\delta u(x) \propto \exp(ikx)$  с длиной волны  $\lambda \propto 1/k > l_0$ . Здесь  $l_0$  — межатомное расстояние. При  $\theta < \theta_1$  любое возмущение  $\delta u$  приводит к увеличению потенциальной энергии системы, метастабильная фаза устойчива относительно малых возмущений. На пороге устойчивости  $\theta_1$  распределение атомов, характерное для родительской фазы, неустойчиво относительно малых возмущений  $\propto \exp(k_1 x)$  с волновым вектором  $k_1$ . При  $\theta > \theta_1$  потенциальная энергия системы понижается, метастабильная фаза неустойчива относительно малых возмущений. Вблизи безразмерного порога устойчивости  $a_1 = \frac{\theta - \theta_1}{\theta} \ll 1$  возмущения с частотой  $\omega_1 \propto 1/t_1$  нарастают. Результирующее возмущение функции распределения ищется в виде суперпозиции плоских волн с волновыми векторами  $k = k_1 \pm \Delta k$  ( $\frac{\Delta k}{k_1} \ll 1$ ). Такая суперпозиция, как известно, описывает биения с амплитудой  $\varphi(x, t)$ . Амплитуда неустойчивой моды  $\varphi(x, t)$  характеризует коррелированные (коллективные) смещения атомов в родительской фазе на пространственных масштабах  $l_1 \propto \frac{1}{k_1} > l_0$ . Вблизи безразмерного порога устойчивости крупномасштабное пространственное распределение смещений  $u_d(x, t)$  может быть записано в виде [30]:

$$u_d(x, t) - \bar{u}_d = u_d^0 [\varphi(x, t) \exp(ik_1 x) + cc], \quad (7)$$

где  $u_d^0$  — параметр, определяемый свойствами среды,  $cc$  означает комплексное сопряжение. В стабильной родительской фазе  $\varphi = 0$ . Отметим, что помимо распределения (7) возможны и другие распределения. Но частота  $\omega_1$  является наибольшей из всех возможных. Поэтому время образования распределения (7) является наименьшим. По этой причине оно и проявляется в эксперименте. Все другие распределения либо не проявляются, либо их вклад мал.

Локализованные смещения атомов (7) приводят к дальнедействующим напряжениям и неоднородной деформации  $\varepsilon_j(\mathbf{r}, \theta)$ . Решение уравнений механики сплошной среды можно избежать, если рассматривать коллективные моды деформации, определяемые колебательными степенями свободы. Обозначим через  $\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \bar{\varepsilon}_3$  главные значения тензора однородной деформации. При  $\vartheta < \vartheta_c$  деформация среды остается однородной, малое возмущение  $\propto \exp(ikx)$  с любым волновым вектором  $k$  приводит к увеличению потенциальной энергии системы. На пороге устойчивости  $\vartheta_c$  имеется неустойчивая мода смещений  $\propto \exp(ik_2 x)$  с волновым вектором  $k_2 < k_1$ . При  $\vartheta > \vartheta_c$  малые возмущения с частотой  $\omega_2 \propto 1/t_2$  нарастают. Вблизи безразмерного порога устойчивости  $a_2 = \frac{\vartheta(\varphi) - \vartheta_c}{\vartheta_c} \ll 1$  деформация определяется суперпозицией плоских волн с волновыми векторами  $k = k_2 \pm \Delta k$  ( $\frac{\Delta k}{k_2} \ll 1$ ). Пространственно-временное распределение главных деформаций при фазовом превращении записывается в виде

$$\varepsilon_j(x, t) - \bar{\varepsilon}_j = \varepsilon_j^0 [\eta(x, t) \exp(ik_2 x) + cc]. \quad (8)$$

Здесь коэффициент  $\varepsilon_j^0$  определяет величину главных деформаций,  $\eta(x, t)$  — амплитуда неустойчивой моды, характеризующая неоднородную деформацию среды на пространственных масштабах  $l_2 \propto \frac{1}{k_2} > l_1$ . Первый и второй инвариант деформации  $I_1(x, t), I_2(x, t)$  находятся стандартным образом. В физике амплитуды неустойчивых мод, следуя Ландау, принято называть параметрами порядка (ПП). Безразмерный порог устойчивости  $a_2$  в линейном приближении может быть записан в виде

$$a_2 = -1 + \frac{\vartheta(\varphi)}{\vartheta_c} = -1 + p\varphi, \quad p = \frac{1}{\vartheta_c} \frac{d\vartheta(\varphi)}{d\varphi}. \quad (9)$$

Из определения  $a_2$  следует, что величина  $p > 0$ , знак производной  $\frac{d\vartheta(\varphi)}{d\varphi}$  должен совпадать со знаком  $\vartheta_c$ .

## 2.2. Уравнения для параметров порядка

При нахождении уравнений для ПП исходим из того, что в открытой системе протекают те процессы, при которых потенциальная энергия системы атомов понижается. Относительное изменение объема и величина сдвиговой деформации при ФП, как правило, не превышают десяти процентов. Это позволяет считать ПП  $\varphi, \eta$  малыми параметрами. Поэтому для нахождения уравнений для ПП можно воспользоваться подходами Гинзбурга–Ландау и Ландау–Халатникова. Полученные таким образом уравнения для ПП с учетом (9) имеют вид [26]:

$$t_1 \partial_t \varphi = [\alpha - g\eta]\varphi + q_2 \varphi^2 - q_3 \varphi^3 + l_1^2 \partial_x^2 \eta, \quad (10)$$

$$t_2 \partial_t \eta = (-1 + p\varphi)\eta - b\eta^3 + l_2^2 \partial_x^2 \eta. \quad (11)$$

В уравнении (11) характерная скорость  $v_2 = l_2/t_2$  является групповой скоростью. В безразмерных переменных

$$\tilde{t} = t/t_2, \quad \tilde{x} = x/l_2, \quad \tilde{\eta} = \eta b^{1/2}, \quad \tilde{\varphi} = \varphi q_3^{1/2} \quad (12)$$

уравнения (10) и (11) принимают вид (знак „~“ в дальнейшем опускается)

$$\tau \partial_t \varphi = (\alpha - c\eta)\varphi + \beta\varphi^2 - \varphi^3 + l^2 \partial_{x^2}^2 \varphi, \quad (13)$$

$$\partial_t \eta = (-1 + d\varphi)\eta - \eta^3 + \partial_{x^2}^2 \eta. \quad (14)$$

Здесь

$$\tau = \frac{t_1}{t_2}, \quad l = \frac{l_1}{l_2}, \quad \beta = q_2 q_3^{-1/2}, \quad d = p q_3^{-1/2}, \quad c = g b^{-1/2}. \quad (15)$$

Коэффициенты в уравнениях (13), (14) являются параметрами, определяемыми свойствами родительской и новой фазы. Предполагается, что эти параметры известны либо могут быть вычислены. В (13) параметр  $c \propto \vartheta_n$  характеризует увеличение упругой энергии системы при зарождении новой фазы. Смысл параметров  $\alpha, \beta$  рассмотрен ниже. Уравнение (13) описывает динамику бистабильной среды. Бистабильность определяется тем, что при фазовом переходе траектории атомов одновременно могут находиться на ППЭ  $E_0(\mathbf{R}_0)$  и  $E_\gamma(\mathbf{R}_\gamma)$  с  $\gamma > 0$ . Уравнение (14) представляет вещественное уравнение Гинзбурга–Ландау [30].

### 3. Однородные стационарные решения

Уравнение (13) при  $c = 0$  имеет три стационарных однородных решения:  $\varphi_0 = 0$ ,

$$\varphi_h = \frac{\beta}{2} + \left(\frac{\beta^2}{4} + \alpha\right)^{1/2}, \quad \varphi_{in} = \frac{\beta}{2} - \left(\frac{\beta^2}{4} + \alpha\right)^{1/2},$$

показанных на рис. 1. Параметр  $\beta$  определяет численное значение  $\varphi$ . Анализ устойчивости решений показывает следующее. Решение  $\varphi_{in}$  (пунктирная кривая 3 на рис. 1) всегда неустойчиво. Решение  $\varphi_0$  единственно и устойчиво при  $\alpha < \alpha_1 = -\frac{\beta^2}{4}$  (область I на рис. 1), что имеет место для стабильной родительской фазы при  $\theta < \theta_0$ . При  $-\alpha_1 < \alpha < 0$  среда находится в бистабильном состоянии (области II, III на рис. 1). Если  $\alpha_1 < \alpha < \alpha_2 = -\frac{2\beta^2}{9}$ , то решение  $\varphi_0$  стабильно, а  $\varphi_h$  метастабильно (кривая 1 на рис. 1). При  $\alpha_2 < \alpha < 0$  решение  $\varphi_h$  стабильно (кривая 2 на рис. 1),  $\varphi_0$  — метастабильно. При  $\alpha = \alpha_2$  оба решения имеют одинаковую устойчивость. При  $\alpha > 0$  (область IV на рис. 1) решение  $\varphi_h(\varphi_0)$  стабильно (неустойчиво), любое малое возмущение  $\alpha$  возрастает. Отсюда следует, что параметр  $\alpha = \alpha(\theta)$ . Температура  $\theta_0$  находится из равенства  $\alpha = -2\beta^2/9$ . Из уравнения  $\alpha(\theta) = 0$  находится температура  $\theta_{in}$  потери устойчивости родительской фазы относительно малых возмущений. Знак „—“ перед коэффициентом  $c$  в правой части уравнения (13) показывает, что упругая деформация среды увеличивает потенциальную энергию ( $\propto -\int \partial_t \varphi d\varphi$ ) системы.

Уравнение (14) при  $d = 0$  имеет единственное устойчивое решение  $\eta_0 = \eta = 0$ . При  $d > 1/\varphi$  имеется решение  $\eta > 0$ , которому соответствует меньшее значение потенциальной энергии ( $\propto -\int \partial_t \eta d\eta$ ). Величина  $d\varphi - 1 > 0$  определяет скорость возрастания ПП  $\eta$ .

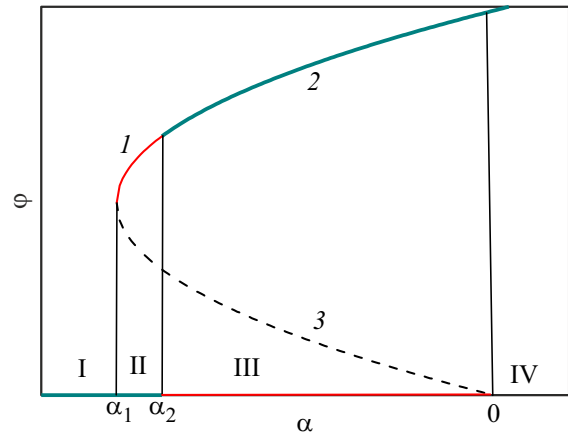


Рис. 1. Зависимость параметра порядка  $\varphi$  от  $\alpha$ . Пояснения приведены в тексте статьи.

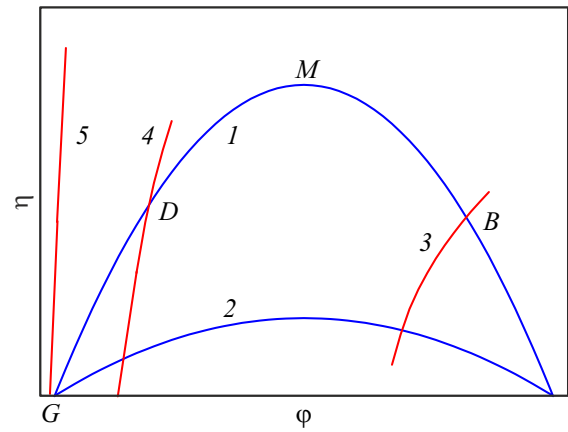


Рис. 2. Нуль-изоклины уравнений (17) — синие кривые (1, 2) и (18) — красные кривые (3, 4, 5).

Уравнения (13), (14) всегда имеют однородное стационарное решение (ОСР)  $\eta_0, \varphi_0$ , соответствующее родительской фазе. Стандартный анализ устойчивости показывает, что решение  $\eta_0, \varphi_0$  устойчиво относительно малых однородных и неоднородных возмущений с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $k$  при

$$-\tau + \alpha < 0, \quad (16)$$

$$-\alpha > 0. \quad (17)$$

При  $\alpha < 0$  эти неравенства всегда выполняются, что имеет место для родительской фазы в стабильном и метастабильном состояниях. Другие ОСР определяются точками пересечения кривых (нуль-изоклин):

$$(\alpha - c\eta)\varphi + \beta\varphi^2 - \varphi^3 = 0, \quad (18)$$

$$(-1 + d\varphi)\eta - \eta^3 = 0. \quad (19)$$

Графики кривых (18), (19) при  $\alpha < 0$  и характерные точки пересечения приведены на рис. 2. Парабола (18)

пересекает прямую  $\eta = 0$  в точках  $\varphi = \varphi_{in}$  и  $\varphi = \varphi_h$ . Кривая (19) при

$$d_G > d_D > d_B > d_0 \quad (20)$$

и фиксированных значениях остальных параметров может пересекать параболу (18) в трех характерных точках В, D, G. Здесь  $d_0$  — значение  $d$ , меньше которого кривые (18), (19) не пересекаются. При

$$d = d_m = \frac{2}{\beta} \left[ 1 + \left( \frac{\beta^2 - 4\alpha}{4c} \right)^2 \right] \quad (21)$$

пересечение кривых происходит в вершине параболы (точка М) при  $\varphi = \beta/2$ . С учетом (8) меньшему значению  $\vartheta_c$  соответствует большее значение  $d$ .

Анализ устойчивости ОСР показывает следующее. Решение  $\eta_B > 0$ ,  $\varphi_B > 0$  в точке В устойчиво относительно малых однородных и неоднородных возмущений. ОСР  $\eta_D > 0$ ,  $\varphi_D > \varphi_{in}$  в точке D устойчиво относительно малых однородных, но неустойчиво относительно неоднородных возмущений. При этом  $\varphi_D < \varphi_B$ . В точке G (ОСР  $\eta_G = 0$ ,  $\varphi_G < \varphi_{in}$ ) устойчивых решений нет [26,31]. Такая ситуация возможна в системах, в которых фазовые превращения не протекают, например, при закалке высокотемпературной фазы.

## 4. Неоднородные решения

Неоднородные решения  $\varphi(x, t)$ ,  $\eta(x, t)$  описывают переходы системы из метастабильного состояния  $\eta_0$ ,  $\varphi_0$  в состояния в точках В и D. При переходе в точку В формируется и распространяется волна переключения (ВП)  $\varphi(x - v_{sw}t)$ ,  $\eta(x - v_{sw}t)$ , скорость которой равна  $v_{sw}$ . Перед (за) фронтом среда находится в состоянии  $\eta_0$ ,  $\varphi_0$  ( $\varphi_B > 0$ ,  $\varphi_V > 0$ ). ПП меняются на фронте ВП. При переходе в точку D могут возбуждаться локализованные решения  $\varphi(x, t)$ ,  $\eta(x, t)$  — автосолитоны (АС) [32]. Они являются неравновесными локализованными состояниями нелинейной среды. Для зарождения ВП и АС необходимо начальное возмущение ПП  $\varphi$  с амплитудой

$$\Delta\varphi_0 > \varphi_{in}. \quad (22)$$

Для этого  $N_{in}$  атомов должны сместиться в положение, нехарактерные для родительской фазы. Вероятность смещения  $N_{in}$  атомов определяется произведением вероятностей (1) либо (3). Тогда при неадиабатических переходах атомов время образования начального возмущения (22):

$$t_{LZ} = N_{in}W_0/(v|F_2 - F_1|), \quad (23)$$

а при термически активированных смещениях

$$t_{th} \propto \exp\left(\frac{N_{in}\Delta E_\gamma}{k_B T}\right). \quad (24)$$

Произведение  $N_{in}\Delta E_\gamma$  имеет смысл энергии образования критического зародыша. Из формул (23), (24) следует,

что при  $N_{in} \gg 1$  время образования начального возмущения (22) при тепловых флуктуациях будет велико по сравнению с (23). Поэтому выполнение условия (22) определяется временем (23). Этот вывод не должен удивлять, поскольку родительская и новая фазы различаются межатомными взаимодействиями.

## 5. Диффузионные фазовые превращения

Диффузионные фазовые превращения протекают при сравнительно высоких температурах, малых скоростях изменения температуры, характеризуются широкой петлей гистерезиса и большими по сравнению с мартенситными превращениями изменениями объема. В этих условиях с учетом (8) коэффициент  $d$  должен быть мал, переход из метастабильного состояния происходит в точку В. Принято считать, что зарождение и рост новой фазы определяются термически активируемыми процессами. Действительно, в этих условиях, как следует из (4), при малых скоростях  $v$  в (23),  $N_{in} \approx 1$  выполняется неравенство  $t_1 = t_{lth}$ . Смещения атомов определяются колебательными степенями свободы. Этими же степенями свободы определяется и деформация среды. Это означает, что параметры  $\tau < 1$ ,  $l < 1$  должны иметь близкие значения, т. е.

$$\tau \lesssim l. \quad (25)$$

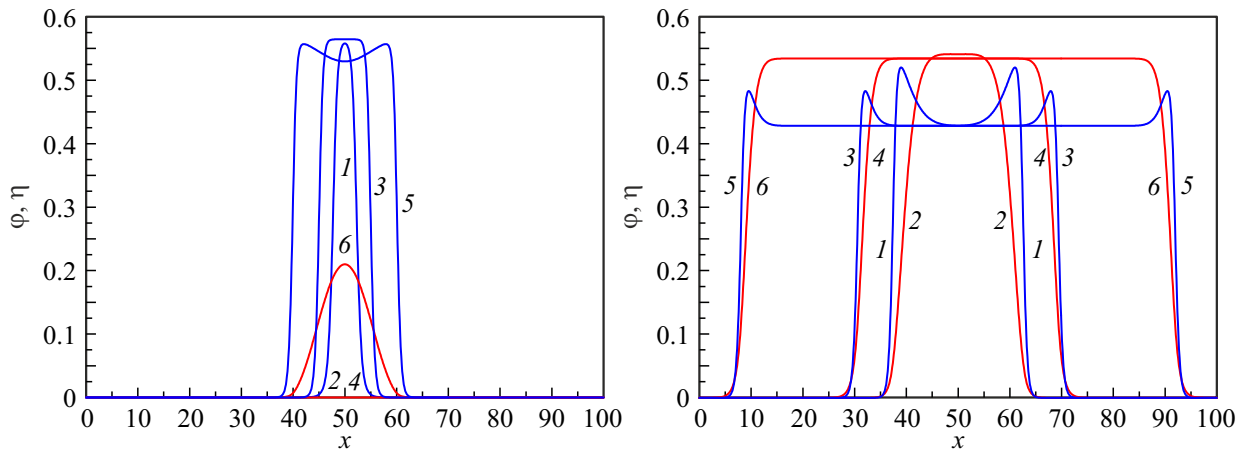
При выполнении этого условия  $v_1 = l_1/t_1 \lesssim v_2 = l_2/t_2$ . Диффузионное превращение происходит на границе раздела новой фазы и матрицы. При движении указанной границы объемная доля новой (родительской) фазы увеличивается (уменьшается). Такая картина превращения описывается неоднородными решениями в виде волны переключения.

Динамика зарождения и распространения ВП рассмотрена на основе численного решения уравнений (13), (14), в которых все параметры определяются свойствами фаз. Вид начальных возмущений приведен в Приложении. В качестве примера на рис. 3 приведены результаты расчетов при

$$\alpha = -0.02, \quad \beta = 0.6,$$

$$c = 0.1, \quad d = 3, \quad l = 0.15, \quad \tau = 0.1. \quad (26)$$

При данных параметрах  $\varphi_h \approx 0.56$ ,  $\varphi_{in} \approx 0.04$ ,  $\eta_D \approx 0.53$ ,  $\varphi_D \approx 0.43$ . Параметры начального возмущения  $\Delta\varphi_0 = 0.1$ ,  $\sigma_\varphi = 3$ ,  $x_0 = 50$ . Из приведенных на рис. 3 данных видно, что зарождение и рост новой фазы протекают в две стадии. На первой стадии вначале происходит увеличение ПП  $\varphi$ , ПП  $\eta \approx 0$  (рис. 3, а). При выполнении неравенства  $d\varphi > 1$  ПП  $\eta$  начинает расти. Скорость его роста определяется величиной  $(-1 + d\varphi)\eta$ . Это видно из уравнения (14), в котором  $\dot{\eta} \sim (-1 + d\varphi)\eta$ . При этом ПП  $\varphi$  почти не меняется. К моменту времени  $t = t_{inc}$  оба



**Рис. 3.** Пространственное распределение параметров порядка  $\varphi$  — синие кривые (1, 3, 5),  $\eta$  — красные кривые (2, 4, 6) в волне переключения в разные моменты времени  $t$ . На левой панели  $t = 5$  (1, 2), 10 (3, 4), 20 (5, 6). На правой панели  $t = 25$  (1, 2), 40 (3, 4), 90 (5, 6).

ПП принимают стационарные значения  $\eta_B$ ,  $\varphi_B$ . Локализованное распределение ПП можно рассматривать как образовавшийся зародыш новой фазы. Заметим, что его образование происходит в результате эволюции неравновесной системы на атомных масштабах. Привлекать представления о каких-либо источниках в виде дефектов не требуется. На второй стадии (при  $t > t_{inc}$ ) происходит рост зародыша путем распространения ВП. Объем, занятый новой (родительской) фазой, увеличивается (уменьшается) (рис. 3, б). При выполнении условия (25) ширина переходной области между родительской и новой фазой остается постоянной. При  $t \gg t_{inc}$  весь объем заполняется новой фазой. Время  $t_{inc}$  имеет смысл инкубационного периода, в течение которого на первой стадии образуется зародыш новой фазы.

При большом изменении объема параметр  $d < d_0$ . В этом случае имеется только ОСР  $\eta = 0$ ,  $\varphi = \varphi_h$ , устойчивое относительно малых возмущений. Переход системы из состояния  $\eta_0$ ,  $\varphi_0$  в метастабильное состояние  $\eta = 0$ ,  $\varphi = \varphi_h$  происходит путем зарождения и распространения ВП  $\varphi(x - v_1 t)$ ,  $\eta = 0$ . Однородное решение  $\eta = 0$ ,  $\varphi = \varphi_h$ , устойчиво относительно малых возмущений ПП  $\eta$  с амплитудой  $\Delta\eta > (d_B - d_0)\varphi_h$ . Такое возмущение может быть создано путем возбуждения продольной волны за счет внешнего воздействия. Тогда при наличии возмущения зарождается и распространяется ВП из состояния  $\eta = 0$ ,  $\varphi = \varphi_h$  в состояние  $\eta_B$ ,  $\varphi_B$ . Если возмущения возникают во всем объеме образца, то фазовое превращение может происходить одновременно во всем объеме. В этом случае скорость фазового превращения может быть высокой. Возможно, что такой режим фазового превращения наблюдается при „взрывной“ кристаллизации аморфных материалов [32].

При отсутствии источников упругих деформаций (система однородна) и при медленном изменении температуры ( $t_{LZ} \gg t_{th}$ ) условие (22) не выполняется. При

$\theta < \theta_{in}$  ( $\alpha < 0$ ) система остается в метастабильном состоянии. При  $\theta > \theta_{in}$  ( $\alpha > 0$ ) метастабильная фаза неустойчива относительно малых возмущений. Любое малое возмущение приводит к фазовому превращению. Диффузионное превращение протекает в режиме переохлаждения/перегрева.

## 6. Мартенситные превращения

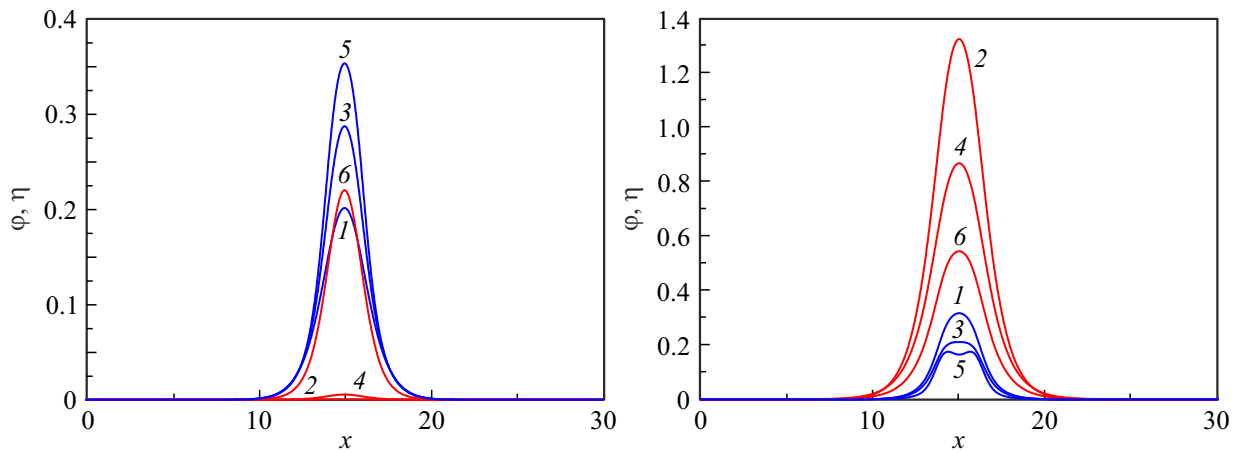
Атермический механизм мартенситных превращений, как было сказано выше, определяется неадиабатическими переходами атомов. Сдвиговой механизм деформации при мартенситных превращениях объясняется следующим. Относительные изменения объема  $v_c$  в (9) для систем с мартенситными превращениями, как правило, не превышают нескольких процентов и меньше, чем при диффузионных. Поэтому параметр  $d \propto 1/v_c$  должен быть больше, чем при диффузионных превращениях. Интерес представляет решения, описывающие переход из метастабильной родительской фазы в точку D на рис. 2. В этом случае могут возбуждаться локализованные решения  $\varphi(x, t)$ ,  $\eta(x, t)$  — автосолитоны (АС) [33]. Кинетические переменные резко меняются внутри АС, а на его периферии равны стационарным значениям (в данном случае равным нулю). Статические АС описывают локализованные распределения новой фазы, характерные для мартенситных превращений. Статические АС могут возбуждаться при наличии возмущения конечной амплитуды (22), выполнении неравенств [33]:

$$\tau < 1, \quad l \ll 1, \quad \tau > l \quad (27)$$

и условия

$$d > 1/\varphi_D. \quad (28)$$

Первое неравенство в (27) согласно (15) означает близость характерных времен на всех пространственных



**Рис. 4.** Пространственное распределение параметров порядка  $\varphi$  — синие кривые (1, 3, 5),  $\eta$  — красные кривые (2, 4, 6) в статическом автосолидоне в разные моменты времени  $t$ . На левой панели  $t = 5$  (1, 2), 20 (3, 4), 23 (5, 6). На правой панели  $t = 26$  (1, 2), 35 (3, 4), 70 (5, 6).

масштабах. Из второго неравенства следует, что смещения атомов на атомных масштабах должны быть малы по сравнению с межатомными расстояниями. Из последнего неравенства в (27) следует неравенство  $v_2 > v_1$ . Т.е. макроскопическая деформация должна осуществляться быстрыми механизмами, к каковым относится образование двойников. Такая особенность присуща мартенситным превращениям. Для выяснения физического смысла условия (27) обратимся к рис. 2. Из него видно, что при одном и том же значении параметра  $d$  величина  $\varphi_D$  уменьшается с увеличением параметра  $c$  и наоборот. Параметр  $c$  характеризует увеличение упругой энергии системы при образовании новой фазы. Модули сдвига в твердом теле всегда меньше модуля всестороннего сжатия. Поэтому увеличение упругой энергии при сдвиговой деформации всегда меньше, чем при изменении объема системы. Неудивительно, что при мартенситных превращениях объемные изменения малы, а деформация определяется сдвиговыми компонентами.

Пространственно-временные распределения ПП при зарождении и развитии статического АС приведены на рис. 4 при

$$d = 10, \quad \tau = 0.9, \quad l = 0.05. \quad (29)$$

Остальные параметры оставлены теми же, что и в (26). При выбранных значениях параметров  $\eta_D \approx 0.11$ ,  $\varphi_D \approx 0.35$ . Из рис. 4 видно, что имеются три стадии. На первой стадии ПП  $\varphi$  возрастает до значения  $\varphi_{\max} \approx 0.29$  за время  $t \approx 20$ , ПП  $\eta$  близок к нулю. На второй стадии ПП  $\eta$  быстро возрастает, к моменту времени  $t \approx 26$  достигает максимального значения  $\eta_{\max} \approx 1.3$ . На третьей стадии оба ПП уменьшаются до стационарных значений в статическом АС.

Образование статического АС проявляется в виде полосы локализованной сдвиговой макроскопической деформации и сопровождается понижением упругой энергии системы. При этом согласно (8) в однородной систе-

ме образуется система регулярно расположенных устойчивых полос локализованной деформации. При дальнейшем изменении температуры новые полосы могут возникать только между ранее образовавшимися полосами. Такая картина качественно согласуется с наблюдаемой экспериментально при мартенситных превращениях.

При увеличении параметра  $c$ , как видно из рис. 2, стационарное значение ПП  $\eta_D$  уменьшается до  $\eta_D \approx 0.08$ . Тогда при одном и том же значении параметра  $d$  возбуждается осциллирующий АС с периодически меняющейся амплитудой. Напомним, что величина  $c \propto \vartheta_n$ , а  $\vartheta_n$  определяется свойствами кристаллических решеток аустенитной и мартенситной фаз. Мартенситное превращение может наблюдаться в тех системах, в которых переход кристаллической решетки аустенитной фазы в кристаллическую решетку мартенситной фазы происходит в основном путем сдвигов атомов во взаимно перпендикулярных направлениях по двум осям. Сжатие/расширение вдоль третьей оси должно быть небольшим. Так, например, в сплавах TiNi, в которых наблюдается ТМП, аустенитная фаза имеет В2 структуру с параметром элементарной ячейки  $a_A \approx 0.30$  nm, мартенситная фаза В19' имеет моноклинно искаженную орторомбическую ячейку с параметрами  $a_M \approx 0.29$  nm,  $b_M \approx 0.41$  nm,  $c_M \approx 0.46$  nm. Объемные изменения не превышают нескольких десятых процента [5].

При реконструктивных мартенситных превращениях в сталях  $\text{Fe}_\gamma(\text{C}) \rightarrow \text{Fe}_\alpha(\text{C})$  (С — концентрация углерода) мартенситная фаза имеет объемно-центрированную тетрагональную решетку. Как известно, ГЦК-решетку можно перевести в ОЦК путем сжатия на 20% вдоль одной из осей  $\langle 001 \rangle$  и синхронных растяжений на  $\approx 13\%$  вдоль пары ортогональных осей  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  или  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  ГЦК-решетки. На атомных масштабах такая перестройка осуществляется за счет изменения межатомных взаимодействий. Фаза с ОЦК кристаллической решеткой при наличии атомов углерода является неустой-

чивой. Устойчивой является фаза с ОЦТ кристаллической решеткой. Объемные изменения при мартенситном превращении также малы. Этот результат достигается высокими скоростями закалки до температур, меньших пороговых значений. Вследствие этого предотвращается распад пересыщенного твердого раствора углерода в  $\alpha$ -фазе. Высокие скорости закалки и низкие температуры определяют атермический механизм мартенситных превращений.

В рамках предложенной модели находит объяснение наличие предпереходных состояний при ТМП и отсутствие таковых при РМП. При ТМП родительская фаза является метастабильной. Для перехода в стабильную фазу должно выполняться условие (22). Т.е. в системе должно быть создано начальное возмущение ПП  $\varphi$  конечной амплитуды. ПП  $\varphi$  характеризует распределение динамических смещений атомов при изменении межатомных взаимодействий. Изменение межатомных взаимодействий при изменении температуры (объема) сопровождается изменением упругих постоянных и формированием ДБП. При изменении температуры амплитуда  $\varphi$  достигает порогового значения, и на фоне возбужденного ДБП происходит ТМП. Возбуждением ДБП объясняется тот факт, что фазовые переходы первого рода протекают и при низких температурах. Например, в кристалле прустита ( $\text{Ag}_3\text{AsS}_3$ ) в равновесных условиях фазовый переход первого рода происходит при температуре  $T_{c0} = 28\text{--}30\text{ K}$  [34]. В неравновесных условиях (при увеличении скорости нагрева/охлаждения), возмущение конечной амплитуды будет достигнуто за меньшее время. Это эквивалентно тому, что температура неравновесного фазового перехода будет выше  $\theta_c$  при охлаждении и ниже  $\theta_c$  при нагреве. Именно такая закономерность наблюдается экспериментально [34].

При РМП динамические смещения атомов приводят к образованию неустойчивой  $\alpha$ -фазы с ОЦК-решеткой. Время ее образования согласно (23) обратно пропорционально скорости охлаждения. Для перехода из неустойчивой фазы в мартенситную фазу с ОЦТ-решеткой возмущение конечной амплитуды не требуется. При уменьшении объема системы (числа атомов) энергетический интервал между ППЭ увеличивается, вероятность неадиабатических переходов уменьшается. Как следствие, РМП в таких системах может быть затруднен, либо вообще не происходить.

## 7. Заключение

В предложенной модели фазовых превращений в твердых телах приняты во внимание процессы, протекающие в открытых системах на различных пространственно-временных масштабах. На атомных масштабах динамика атомов является неадиабатической, имеются два механизма смещений атомов: термически активируемый и атермический. Динамика системы на больших масштабах определяется коллективными (коррелированными)

смещениями атомов и описывается двумя параметрами порядка — амплитудами неустойчивых мод, возбуждающихся на порогах устойчивости системы. Пороги устойчивости определяются термодинамическими характеристиками и уравнениями состояния двух фаз. Развитие неустойчивостей на всех пространственно-временных масштабах сопровождается понижением потенциальной энергии системы.

Кинетика фазового превращения описывается двумя связанными нелинейными уравнениями параболического типа для параметров порядка. Управляющими параметрами уравнений являются макроскопические характеристики системы: температура (объем метастабильной фазы) и разность объемов двух фаз. На основе анализа решений уравнений найдены условия, при которых реализуются различные кинетики фазового превращения.

Диффузионные фазовые превращения протекают в системах, в которых разность объемов двух фаз сравнительно велика. Зарождение и рост новой фазы описываются решениями в виде волны переключения из метастабильной фазы в стабильную. Образование зародыша новой фазы вызывается атермическими смещениями атомов. Имеется инкубационный период зарождения и роста зародыша. В зависимости от скорости изменения температуры переход из одной фазы в другую может протекать в режиме переохлаждения/перегрева или „взрывного“ превращения.

Мартенситные превращения протекают в системах, в которых преобразование кристаллических решеток при фазовом переходе сопровождается малым изменением объема и большими сдвиговыми деформациями. Решения уравнений, описывающие образующуюся мартенситную фазу, представляющие статические автосолитоны. Термоупругие мартенситные превращения развиваются на фоне смещений, определяемых изменением межатомных взаимодействий при переходе от одной кристаллической решетки к другой. Образовавшийся ближний порядок, нехарактерный для метастабильной фазы, выступает в качестве зародышей мартенситной фазы. При реконструктивных мартенситных превращениях, протекающих в неравновесных условиях, образовавшийся ближний порядок характерен для неустойчивой фазы. Вследствие этого для образования мартенситной фазы каких-либо зародышей не требуется.

Таким образом, сравнительно простая в математическом плане модель фазовых превращений в твердых телах приводит к результатам, которые качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Это означает, что в модели учтены основные физические процессы, протекающие в открытой системе ядер и электронов при фазовом превращении.

## Приложение

Численное решение уравнений (13), (14) проводилось конечно-разностным методом по полностью неявной

схеме в интервале  $0 \leq x \leq X$ . При  $t = 0$  система находится в состоянии  $\eta_0$ ,  $\varphi_0$ . Начальное возмущение для переменной  $\varphi$  задавалось в виде

$$\Delta\varphi = \Delta\varphi_0 \exp[-\sigma_\varphi(x - x_0)^2].$$

Здесь  $\delta\varphi_0$ ,  $\sigma_\varphi$ ,  $x_0$  — амплитуда, дисперсия и координата начального возмущения соответственно. Начальное возмущение для переменной  $\eta$  взято стохастическим с амплитудой  $0 \leq \Delta\eta(x) \leq 10^{-3}$ . Задавались периодические граничные условия.

## Благодарности

Автор благодарит С.П. Беляева, Л.Б. Зуева, А.И. Лоткова, Н.Н. Реснину, Н. Zapolsky за интерес к работе, полезные советы и замечания.

## Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2021-0011.

## Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] Я.Б. Зельдович. ЖЭТФ **12**, 525 (1942).
- [2] Дж. Кристиан. Теория превращений в металлах и сплавах. Мир, М. (1978). Т. 1. 806 с. [J. Christian. The Theory of Transformations in Metals and Alloys. Pergamon Press (1965). V. 1.]
- [3] Nucleation theory and application/ Ed. J.W.P. Schmelzer. Wiley-VCH (2006). 453 p.
- [4] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Физическая кинетика. Физматлит, М. (2002). 535 с. [E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii. Physical Kinetics. Pergamon, London, UK (1981).]
- [5] В.Г. Пушин, В.В. Кондратьев, В.Н. Хачин. Предпереходные явления и мартенситные превращения. УрО РАН, Екатеринбург (1998). 368 с.
- [5] А.И. Потекаев, А.А. Клопотов, В.В. Кулагина, Ю.В. Соловьева, С.Г. Аникеев. Структура и свойства сплавов на основе NiTi в предпереходных слабоустойчивых состояниях / Под ред. А.И. Потекаева. Изд-во НТЛ, Томск (2021). 360 с.
- [6] V. Dmitriev. Discontinuous Phase Transitions in Condensed Matter. World Scientific (2023). 439 p.
- [7] Wen-Zheng Zhang. Crystals **10**, 11, 1042 (2020). doi.org/10.3390/cryst10111042
- [8] Г.А. Малыгин. УФН **171**, 187 (2001). [G.A. Malygin. Phys.-Usp. **44**, 2, 173 (2001).]
- [9] М.П. Кашченко. УФН **181**, 345 (2011). [M.P. Kashchenko, V.G. Chashchina. Phys.-Usp. **54**, 4, 331 (2011).]
- [10] Г.А. Малыгин. ФТТ **64**, 570 (2022). [G.A. Malygin. Phys. Solid State **64**, 5, 563 (2022).]
- [11] А.Л. Ройтбурд. УФН **113**, 69 (1974). [A.L. Roitburd. Sov. Phys. Usp. **17**, 326 (1974).]
- [12] Г.Е. Абросимова, Д.В. Матвеев, А.С. Аронин. УФН. **192**, 247 (2022). [G.E. Abrosimova, D.V. Matveev, A.S. Aronin. Phys.-Usp. **65**, 3, 227 (2022).]
- [13] V. Levitas. Int. J. Plast. **140**, 102914 (2021). https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102914.
- [14] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. Prog. Surf. Sci. **151**, 11 (1996). DOI: 10.1016/0079-6816(96)82931-5.
- [15] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. УФН **168**, 1083 (1998). [S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. Phys.-Usp. **41**, 10, 983 (1998).]
- [16] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ФТТ **56**, 4 761 (2014). [S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. Phys. Solid State **56**, 4, 792 (2014).]
- [17] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **65**, 9, 1455 (2023). DOI: http://dx.doi.org/10.21883/FTT.2023.09.56240.114
- [18] T.R. Kirkpatrick, D. Thirumalai. Rev. Mod. Phys. **87**, 183 (2015). DOI: 10.1103/RevModPhys.87.183
- [19] L. Landau. Phys. Z. Sowjetunion. **2**, 46 (1932).
- [20] C. Zener. Proc. R. Soc. London A **137**, 696 (1932).
- [21] E.C.G. Stükelberg. Helv. Phys. Acta **5**, 369 (1932).
- [22] E. Majorana. Nuovo Cimento **9**, 43 (1932).
- [23] C. Zhu, H. Nakamura. J. Chem. Phys. **101**, 10630 (1994).
- [24] C. Zhu, H. Nakamura. J. Chem. Phys. **102**, 7448 (1995).
- [25] В.Е. Егорюшкин, Н.В. Мельникова. ЖЭТФ **103**, 214 (1993). [V.E. Egorushkin, N.V. Mel'nikova. JETP **76**, 1, 103 (1993).]
- [26] Ю.А. Хон. ФТТ **65**, 1263 (2023). [Yu.A. Khon. Phys. Solid State **65**, 8, 1211 (2023).] DOI: 10.21883/PSS.2023.08.56564.100.
- [27] Л.И. Седов. Механика сплошной среды. Наука, М. (1976). Т. 1. 536 с.
- [28] J.C. Tully. J. Chem. Phys. **137**, 22A301 (2012).
- [29] B.F.E. Curchod, U. Rothlisberger, I. Tavernelli. Chem. Phys. Chem. **14**, 1314 (2013).
- [30] P.C. Hohenberg, A.P. Krekhov. Phys. Rep. **572**, 1 (2015).
- [31] Ю.А. Хон, Л.Б. Зуев. Физ. мезомеханика **24**, 15 (2021). [Yu.A. Khon, L.B. Zuev. Phys. Mesomech. **25**, 111 (2022)] DOI: 10.1134/S1029959922020023.
- [32] В.А. Шкловский, В.М. Кузьменко. УФН **157**, 311 (1989). [V.A. Shklovskii, V.M. Kuzmenko. Phys.-Usp. **32**, 2, 163 (1989).]
- [33] Б.С. Кернер, В.В. Осипов. УФН **157**, 201 (1989). [B.S. Kerner, V.V. Osipov. Phys.-Usp. **32**, 2, 101 (1989).]
- [34] И.М. Шмыгко, И.М. Афонникова, Н.С. Дорохова. ФТТ **40**, 2217 (1998).

Редактор Ю.Э. Кутаев