

ФОНОННО-ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ОБОБЩЕННЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ ГИНЗБУРГА – ЛАНДАУ ДЛЯ ОПИСАНИЯ МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ГЦК- И ОЦК-СТРУКТУРАМИ В МЕТАЛЛАХ

В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 октября 2010 г.

Развивается метод теоретического описания мартенситных переходов между ГЦК- и ОЦК-фазами металлов на основе обобщенных функционалов Гинзбурга – Ландау (ОФГЛ), в которых параметрами превращения являются «фононный» параметр, описывающий относительные скольжения плотноупакованных атомных плоскостей, а также деформации ГЦК-решетки в области мартенситного включения. Предложены общие выражения для расчетов деформационных вкладов в ОФГЛ. Выполнены численные оценки локальных деформаций и локальных модулей упругости в области мартенситных включений. Обсуждаются возможности построения феноменологических выражений для ОФГЛ с использованием интерполяций имеющихся экспериментальных данных о структуре, фонах и модулях упругости в ГЦК- и ОЦК-фазах.

1. ВВЕДЕНИЕ

Разработка адекватного теоретического описания мартенситных фазовых превращений в металлах и сплавах имеет как фундаментальный, так и большой прикладной интерес, в частности, в связи с проблемой оптимизации металлургических процессов. Имеющиеся теоретические обсуждения механизмов и путей мартенситных превращений [1–10] носят обычно феноменологический или качественный характер, микроскопические же подходы здесь пока не развиты. Как отмечено в работе [11], для развития последовательной количественной теории данных превращений можно использовать метод обобщенного функционала Гинзбурга – Ландау (ОФГЛ). В этом методе эволюция структуры кристалла при мартенситном превращении описывается с помощью нескольких слабонеоднородных параметров превращения η_p , в качестве которых естественно выбирать деформации кристалла u_{ij} и параметр s , который описывает относительные смещения плотноупакованных атомных плоскостей [11]. При описании мартенситных превращений этот параметр иногда называют параметром «тасования» (shuffling) атомных плоскостей [3, 8, 9]. Однако в общей теории твердых

тел относительные смещения атомных плоскостей (в случае, когда они малы) принято описывать на языке оптических фононов, и этот язык удобен также при расчетах функционала Гинзбурга – Ландау, соответствующих таким смещениям [11]. Поэтому ниже, как и в работе [11], мы называем s фононным параметром превращения. В ходе превращения параметры $\eta_p = \eta_p(\mathbf{R}, t)$ меняются с координатой \mathbf{R} и временем t , но для реальных мартенситных превращений эти изменения, по-видимому, являются медленными сравнительно, соответственно, с межатомными расстояниями и с периодами фононных колебаний. Поэтому эффекты пространственной неоднородности можно описывать с помощью разложения ОФГЛ по степеням градиентов η_p , а для описания временной эволюции использовать уравнения релаксации, т. е. уравнения Гинзбурга – Ландау, зависящие от времени [12, 13].

Основное внимание в работе [11] уделялось «фононным» путям превращений, связанным со скольжением плотноупакованных атомных плоскостей. В настоящей работе обсуждаются в основном деформационные вклады в ОФГЛ, связанные с образованием и ростом ОЦК-мартенсита в ГЦК-матрице. Прежде всего, мы обобщаем результаты работы [11], в которой рассматривались фононно-деформацион-

*E-mail: vaks@mbslab.kiae.ru

ные пути перехода в мартенсит с ориентационными соотношениями Нишиямы [2] (для краткости называемые ниже переходами в мартенсит Нишиямы или в N-мартенсит), на случай переходов с ориентационными соотношениями Курдюмова–Закса [2], которые мы будем называть переходами в мартенсит Курдюмова–Закса или в KS-мартенсит. Далее мы обсудим значения деформаций решетки в мартенситном включении относительно ГЦК-матрицы (аустенита). Используя экспериментальные данные о ГЦК–ОЦК-переходе в железе, мы покажем, что как для N-мартенсита, так и для KS-мартенсита эти деформации, обычно, по-видимому, малы. Это позволит нам вывести общие выражения для расчетов локальных напряжений и локальных модулей упругости, которые могут использоваться при расчетах *ab initio* ОФГЛ, описывающих рассматриваемые мартенситные переходы. Мы оценим также масштаб локальных изменений модулей упругости для мартенсита в матрице аустенита относительно модулей упругости аустенита и покажем, что для значительного большинства модулей упругости в железе эти изменения невелики. Это можно использовать для построения разумных интерполяций деформационной части рассматриваемых ОФГЛ, аналогичных выполненным в работе [11] для фононной части таких функционалов. Основные выводы приводятся в Заключение.

2. ФОНОННО-ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ПУТИ ПЕРЕХОДА ИЗ ГЦК-ФАЗЫ В N-МАРТЕНСИТ И В KS-МАРТЕНСИТ

Будем называть ГЦК-структуру фазой γ , ОЦК-структуру — фазой α (как это принято для ГЦК- и ОЦК-фаз железа), а структуру, образующуюся при переходе из фазы γ в N-мартенсит или в KS-мартенсит, как фазу α_N или α_{KS} . Фононно-деформационный путь превращения $\gamma \rightarrow \alpha_N$ подробно описан в статье [11]. Ниже мы приводим необходимые соотношения из работы [11], а также обобщаем их на случай пути превращения $\gamma \rightarrow \alpha_{KS}$.

Для рассматриваемых фононно-деформационных путей превращения полное смещение атомов в плотноупакованной плоскости m кристалла, который соответствует этому пути превращения и имеет l атомов в элементарной ячейке, будем обозначать как \mathbf{p}_m . При этом номер плоскости (или подрешетки) m принимает значения от единицы до l , а число неэквивалентных плоскостей l для ФП $\gamma \rightarrow \alpha$, как показано в работе [11], равно шести. Амплитуду относительных смещений плотноупако-

ванных плоскостей вдоль пути превращения (для краткости называемых фононными смещениями) будем обозначать как s , так что смещение каждого атома в плоскости m равно $s\mathbf{p}_m$, а значение s в ходе превращения меняется от нуля до единицы. Эти смещения можно описывать с помощью оператора фононных смещений $\hat{T}(s) \equiv \hat{T}_s$, определяя действие \hat{T}_s на вектор \mathbf{R}_m m -й подрешетки (плотнупакованной плоскости) рассматриваемых кристаллов соотношением

$$\hat{T}_s \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_m + s\mathbf{p}_m. \quad (1)$$

Явный вид векторов \mathbf{p}_m приводится ниже.

Деформации однородных растяжений (или сжатий, что ниже обычно не оговаривается) u_ν вдоль трех декартовых осей ν удобно определять соотношениями (1) из работы [11]:

$$x_\nu(u_\nu) = x_\nu(0) \exp(u_\nu), \quad (2)$$

которые можно использовать как при малых, так и при немалых деформациях u_ν . При этом объемная деформация u (изменение которой du связано с изменением объема кристалла Ω соотношением $du = d\Omega/\Omega$) выражается через величины u_ν так же, как и в случае малых деформаций:

$$u = u_1 + u_2 + u_3. \quad (3)$$

Результат действия на векторы решетки $\mathbf{R} = (x, y, z)$ растяжений u_ν , по аналогии с соотношением (1), удобно записывать с помощью операторов растяжений $\hat{T}(u_\nu) \equiv \hat{T}_\nu$, определяемых равенством (2), например:

$$\hat{T}_2 \mathbf{R} = (x, e^{u_2} y, z). \quad (4)$$

Тогда полное значение вектора решетки $\mathbf{R}'_m = \mathbf{R}'_m(s, u_\nu)$ на пути превращения можно выразить через его исходное значение \mathbf{R}_m таким образом:

$$\mathbf{R}'_m = \hat{T}_{123} \hat{T}_s \mathbf{R}_m = \hat{T}_{123} \mathbf{R}_m + s\tilde{\mathbf{p}}_m, \quad (5)$$

где для краткости обозначено $\hat{T}_{123} = \hat{T}_{123}\{u_\nu\} = \hat{T}_1 \hat{T}_2 \hat{T}_3$, и $\tilde{\mathbf{p}}_m = \hat{T}_{123} \mathbf{p}_m$.

Как обсуждалось в работе [11], структуры кристаллов, возникающих на рассматриваемых путях превращений, удобно описывать с помощью обозначений, использованных в работе [14] для кристаллической ГПУ-решетки. Гексагональную ось z этой ГПУ-решетки выбираем перпендикулярно плотноупакованным плоскостям, и период вдоль оси z обозначаем как \mathbf{c} . Компоненты векторов решетки \mathbf{R} вдоль оси z в рассматриваемых структурах обозначаем символом \mathbf{H} , а «поперечные» компоненты в базовой плоскости xy — символом \mathbf{r} : $\mathbf{R} = \mathbf{r} + \mathbf{H}$. Эти

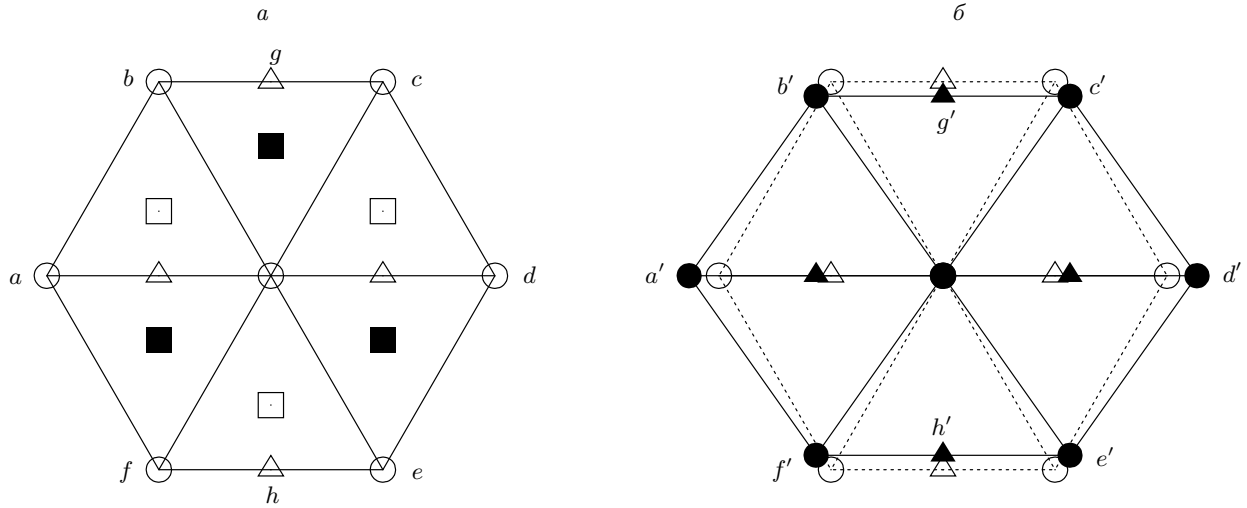


Рис. 1. а) Положения атомов \mathbf{r} в плотноупакованных плоскостях ГЦК-структуры и структуры λ на пути превращения $\gamma \rightarrow \alpha$. Светлые кружки, темные и светлые квадраты указывают соответственно поперечные координаты \mathbf{r}_A , \mathbf{r}_B и \mathbf{r}_C в ГЦК-решетке, определенные равенствами (9). Светлые треугольники указывают положения \mathbf{r}_D в структуре λ , определяемые формулами (11) и занимаемые атомами в четных плоскостях с $H = 2nh$, где n — целое число. б) То же для структуры λ (светлые символы) и для плоскостей $(011)_\alpha$ ОЦК-решетки в N-мартенсите (темные символы). Кружки соответствуют нечетным плоскостям со значением высоты $H = (2n + 1)h$, а треугольники — четным плоскостям с $H = 2nh$, и межплоскостное расстояние h в структуре λ равно $a_\gamma/\sqrt{3}$, а в ОЦК-фазе — $a_\alpha/\sqrt{2}$, где a_γ или a_α — параметр ГЦК- или ОЦК-решетки

поперечные компоненты \mathbf{r} мы будем выражать через три периода \mathbf{b}_s используемой ГПУ-решетки в плоскости xy , равные \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 , и $\mathbf{b}_3 = -(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$, и через три их линейные комбинации \mathbf{d}_s , определенные равенствами

$$\mathbf{d}_s = \frac{\mathbf{b}_{s+1} - \mathbf{b}_{s+2}}{3}, \quad \mathbf{b}_s = \mathbf{d}_{s+2} - \mathbf{d}_{s+1}. \quad (6)$$

Здесь индекс s у векторов \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s определен по модулю 3: $(s + 2) = (s - 1)$; $|\mathbf{b}_s| = b$ есть расстояние между ближайшими соседями в базовой плоскости ГПУ-решетки; и $|\mathbf{d}_s| = d = b/\sqrt{3}$. Отметим также полезные для дальнейшего соотношения для скалярных произведений векторов \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s друг на друга:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_s \mathbf{b}_{s\pm 1} &= -\frac{b^2}{2}, & \mathbf{d}_s \mathbf{d}_{s\pm 1} &= -\frac{b^2}{6}, \\ \mathbf{b}_s \mathbf{d}_s &= 0, & \mathbf{d}_s \mathbf{b}_{s\pm 1} &= \pm \frac{b^2}{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Если выбирать оси x и y так же, как в работе [14], направляя ось x по вектору \mathbf{b}_1 , а ось y по \mathbf{d}_1 , то декартовы компоненты \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s имеют такие значения:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= b(100), & \mathbf{b}_2 &= b(\bar{1}\sqrt{3}0)/2, \\ \mathbf{b}_3 &= b(\bar{1}\sqrt{3}0)/2, & \mathbf{d}_1 &= b(010)/\sqrt{3}, \\ \mathbf{d}_2 &= -b(\sqrt{3}10)/2\sqrt{3}, & \mathbf{d}_3 &= b(\sqrt{3}\bar{1}0)/2\sqrt{3}. \end{aligned} \quad (8)$$

При рассмотрении ГЦК-решетки плотноупакованные атомные плоскости со значениями векторов \mathbf{H} , равными $(3n + 1)\mathbf{h}$, $(3n + 2)\mathbf{h}$ и $3n\mathbf{h}$, где $\mathbf{h} = \mathbf{c}/2$, мы будем обозначать соответственно символами A , B , и C , а гексагональное отношение c/b здесь имеет «идеальное» значение $\sqrt{8/3} = 1.63$. Тогда значения поперечных компонент \mathbf{r} для атомов ГЦК-решетки в плоскостях A , B и C можно записывать как

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_A &= m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2, & \mathbf{r}_B &= \mathbf{r}_A + \mathbf{d}_s, \\ \mathbf{r}_C &= \mathbf{r}_A - \mathbf{d}_s, \end{aligned} \quad (9)$$

где m_1 и m_2 — целые числа, а индекс s можно выбрать любым, т. е. равным единице, двум или трем. При этом периоды \mathbf{a}_1^γ , \mathbf{a}_2^γ и \mathbf{a}_3^γ кубической элементарной ячейки ГЦК-решетки связаны со введенными выше векторами \mathbf{b}_s , \mathbf{d}_s и \mathbf{h} ГПУ-решетки с идеальным значением $c/b = \sqrt{8/3}$ так:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{1}{2} (\mathbf{a}_3^\gamma - \mathbf{a}_2^\gamma), & \mathbf{b}_2 &= \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1^\gamma - \mathbf{a}_3^\gamma), \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{1}{2} (\mathbf{a}_2^\gamma - \mathbf{a}_1^\gamma), & \mathbf{h} &= \frac{1}{3} (\mathbf{a}_1^\gamma + \mathbf{a}_2^\gamma + \mathbf{a}_3^\gamma), \\ \mathbf{a}_1^\gamma &= \mathbf{h} + 2\mathbf{d}_1, & \mathbf{a}_2^\gamma &= \mathbf{h} + 2\mathbf{d}_2, & \mathbf{a}_3^\gamma &= \mathbf{h} + 2\mathbf{d}_3. \end{aligned} \quad (10)$$

Положения векторов \mathbf{r}_A , \mathbf{r}_B , \mathbf{r}_C , \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s в плотноупакованных плоскостях xy ГПУ- или ГЦК-фазы для выбранной нами системы координат иллюстрируются рис. 1а. Векторы \mathbf{p}_m в формулах (1) и (5)

тоже удобно записывать как линейные комбинации векторов \mathbf{b}_s и \mathbf{d}_s , определенных равенствами (6)-(8): $\mathbf{p}_m = \mathbf{p}_m(\mathbf{b}_s)$, и для перехода $\gamma \rightarrow \alpha$ эти \mathbf{b}_s соответствуют ГЦК-фазе и даются формулами (10).

Как обсуждалось в работе [11], реалистичные пути превращения $\gamma \rightarrow \alpha$, для которых деформации мартенсита, возникающего в аустените, невелики (в отличие, например, от простейшего пути трансформации Бейна), могут осуществляться с помощью фононных смещений, приводящих к образованию промежуточной структуры λ , изображенной на рис. 1а. В этой структуре расположение атомов в плотноупакованных плоскостях имеет периодичность вдоль оси z типа $ADAD\dots$, так же как в ОЦК-структуре, изображенной на рис. 1б темными символами. При этом поперечные координаты атомов \mathbf{r} в плоскостях A , показанные на рис. 1 кружками, даются выражением \mathbf{r}_A в формуле (9), а для плоскостей D эти позиции показаны на рис. 1а треугольниками и описываются выражением

$$\mathbf{r}_D = \mathbf{r}_A + \frac{\mathbf{b}_1}{2}. \quad (11)$$

В частности, для точек a, b, \dots, h , указанных на рис. 1а, поперечные координаты \mathbf{r} имеют такие значения:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_d = -\mathbf{r}_a = \mathbf{b}_1, \quad \mathbf{r}_b = -\mathbf{r}_e = \mathbf{b}_2, \\ \mathbf{r}_f = -\mathbf{r}_c = \mathbf{b}_3, \quad \mathbf{r}_g = -\mathbf{r}_h = \frac{3\mathbf{d}_1}{2}. \end{aligned} \quad (12)$$

При этом дальнейший переход $\lambda \rightarrow \alpha$ в структуру N-мартенсита или KS-мартенсита требует относительно малых деформаций u_ν , обсуждаемых ниже.

Возможные пути фононных смещений $s\mathbf{p}_m$ в формуле (1), реализующие переход $\gamma \rightarrow \lambda$, обсуждались в работе [11]. Три таких пути, обозначаемые как $(\gamma \rightarrow \lambda)n$ с n , равным 1, 2 или 3, показаны в табл. 1 (которая отличается от табл. 3 в работе [11] только обозначениями). Как обсуждалось в работе [11], эти фононные пути кажутся наиболее реалистичными, поскольку для них локальные сжатия, возникающие при «протаскивании» атомов соседних плотноупакованных плоскостей в ходе фононных смещений, по-видимому, имеют минимальные значения. Значение общего сдвига плоскостей \mathbf{u}_{0n} в табл. 1 определяется из условия неизменности положения центра тяжести всех шести рассматриваемых атомов в ходе превращения: $s \sum_m \mathbf{p}_m = 0$. Если это общее смещение \mathbf{u}_{0n} для пути превращения $(\gamma \rightarrow \lambda)n$ записывать как

$$\mathbf{u}_{0n} \equiv \mathbf{u}_0^{(\gamma \rightarrow \lambda)n}(s) = s\mathbf{p}_{0n}, \quad (13)$$

то, согласно таблице, векторы \mathbf{p}_{0n} даются такими выражениями:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{01} = \frac{1}{6}\mathbf{b}_3 - \frac{1}{12}\mathbf{b}_1, \quad \mathbf{p}_{02} = \frac{1}{4}\mathbf{b}_1, \\ \mathbf{p}_{03} = -\frac{1}{4}\mathbf{b}_1. \end{aligned} \quad (14)$$

Используя соотношения (13) и (14), мы можем записать координаты атомов $\mathbf{R}_m(s)$ в шестиатомной элементарной ячейке, описываемой в табл. 1, в виде общего выражения (1), в котором векторы \mathbf{p}_m для трех обсуждаемых путей превращения даются такими выражениями.

$$\begin{aligned} (\gamma \rightarrow \lambda)1 : \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_{01}, \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_{01} + \frac{\mathbf{d}_1}{2}, \\ \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_{01} + \mathbf{d}_1, \quad \mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_{01} + \frac{\mathbf{b}_1}{2}, \\ \mathbf{p}_5 = \mathbf{p}_{01} - \mathbf{d}_2, \quad \mathbf{p}_6 = \mathbf{p}_{01} - \frac{\mathbf{d}_1}{2}, \\ (\gamma \rightarrow \lambda)2 : \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_{02}, \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_{02} + \frac{\mathbf{d}_1}{2}, \\ \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_{02} + \mathbf{d}_2, \quad \mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_{02} - \frac{\mathbf{b}_1}{2}, \\ \mathbf{p}_5 = \mathbf{p}_{02} - \mathbf{d}_3, \quad \mathbf{p}_6 = \mathbf{p}_{02} - \frac{\mathbf{d}_1}{2}, \\ (\gamma \rightarrow \lambda)3 : \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_{03}, \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_{03} + \frac{\mathbf{d}_1}{2}, \\ \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_{03} + \mathbf{d}_3, \quad \mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_{03} + \frac{\mathbf{b}_1}{2}, \\ \mathbf{p}_5 = \mathbf{p}_{03} - \mathbf{d}_2, \quad \mathbf{p}_6 = \mathbf{p}_{03} - \frac{\mathbf{d}_1}{2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Обсудим теперь деформации u_ν , нужные для перевода структуры λ в α -фазу. Простейший путь такой деформации иллюстрируется рис. 1. Видно, что осуществляя в структуре λ , изображенной на рис. 1а, однородные растяжения вдоль главных осей x, y и z , мы можем перевести эту структуру в ОЦК-фазу, изображенную на рис. 1б темными символами. При этом, если начало координат выбрать в центре рисунка, то значения координат \mathbf{R} точек a', b', \dots, h' выражаются через периоды $\mathbf{a}_1^\alpha, \mathbf{a}_2^\alpha$ и \mathbf{a}_3^α кубической элементарной ячейки ОЦК-решетки так:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{a'} = -\mathbf{R}_{a'} = \mathbf{a}_1^\alpha, \\ \mathbf{R}_{b'} = (-\mathbf{a}_1^\alpha - \mathbf{a}_2^\alpha + \mathbf{a}_3^\alpha)/2, \\ \mathbf{R}_{c'} = (\mathbf{a}_1^\alpha - \mathbf{a}_2^\alpha + \mathbf{a}_3^\alpha)/2, \\ \mathbf{R}_{e'} = (\mathbf{a}_1^\alpha + \mathbf{a}_2^\alpha - \mathbf{a}_3^\alpha)/2, \\ \mathbf{R}_{f'} = (-\mathbf{a}_1^\alpha + \mathbf{a}_2^\alpha - \mathbf{a}_3^\alpha)/2, \\ \mathbf{R}_{g'} = (-\mathbf{a}_2^\alpha), \quad \mathbf{R}_{h'} = (-\mathbf{a}_3^\alpha). \end{aligned} \quad (16)$$

Сравнивая рис. 1а и 1б, мы видим, что переход из структуры λ в α -фазу можно осуществить, выполняя однородные растяжения вдоль осей 1, 2 и

Таблица 1. Значения поперечных координат атомов \mathbf{r} в плотноупакованных плоскостях при фононных смещениях (1) для путей превращения $(\gamma \rightarrow \lambda)n$

m	\mathbf{H}_m	\mathbf{r}_m^γ	$\mathbf{r}_m^{(\gamma \rightarrow \lambda)1}$	$\mathbf{r}_m^{(\gamma \rightarrow \lambda)2}$	$\mathbf{r}_m^{(\gamma \rightarrow \lambda)3}$	$\mathbf{r}_m^\lambda - \mathbf{p}_{0n}$
1	\mathbf{h}	\mathbf{r}_A	$\mathbf{r}_A + \mathbf{u}_{01}$	$\mathbf{r}_A + \mathbf{u}_{02}$	$\mathbf{r}_A + \mathbf{u}_{03}$	\mathbf{r}_A
2	$2\mathbf{h}$	\mathbf{r}_B	$\mathbf{r}_B + \mathbf{u}_{01} + \frac{1}{2}s \mathbf{d}_1$	$\mathbf{r}_B + \mathbf{u}_{02} + \frac{1}{2}s \mathbf{d}_1$	$\mathbf{r}_B + \mathbf{u}_{03} + \frac{1}{2}s \mathbf{d}_1$	\mathbf{r}_D
3	$3\mathbf{h}$	\mathbf{r}_C	$\mathbf{r}_C + \mathbf{u}_{01} + s \mathbf{d}_1$	$\mathbf{r}_C + \mathbf{u}_{02} + s \mathbf{d}_2$	$\mathbf{r}_C + \mathbf{u}_{03} + s \mathbf{d}_3$	\mathbf{r}_A
4	$4\mathbf{h}$	\mathbf{r}_A	$\mathbf{r}_A + \mathbf{u}_{01} + \frac{1}{2}s \mathbf{b}_1$	$\mathbf{r}_A + \mathbf{u}_{02} - \frac{1}{2}s \mathbf{b}_1$	$\mathbf{r}_A + \mathbf{u}_{03} + \frac{1}{2}s \mathbf{b}_1$	\mathbf{r}_D
5	$5\mathbf{h}$	\mathbf{r}_B	$\mathbf{r}_B + \mathbf{u}_{01} - s \mathbf{d}_2$	$\mathbf{r}_B + \mathbf{u}_{02} - s \mathbf{d}_3$	$\mathbf{r}_B + \mathbf{u}_{03} - s \mathbf{d}_2$	\mathbf{r}_A
6	$6\mathbf{h}$	\mathbf{r}_C	$\mathbf{r}_C + \mathbf{u}_{01} - \frac{1}{2}s \mathbf{d}_1$	$\mathbf{r}_C + \mathbf{u}_{02} - \frac{1}{2}s \mathbf{d}_1$	$\mathbf{r}_C + \mathbf{u}_{03} - \frac{1}{2}s \mathbf{d}_1$	\mathbf{r}_D

3 используемой декартовой системы координат (8), в которой ось 1 (ось x) направлена по вектору \mathbf{b}_1 , а ось 2 (ось y) — по вектору \mathbf{d}_1 . При этом необходимые значения растяжений u_ν , с учетом соотношений (12), (16), (2) и (3), определяются такими равенствами:

$$\frac{a'd'}{ad} = e^{u_1} = \frac{a_\alpha \sqrt{2}}{a_\gamma}, \quad (17)$$

$$\frac{g'h'}{gh} = e^{u_2} = \frac{2a_\alpha}{a_\gamma \sqrt{3}}, \quad u_3 = u - u_1 - u_2.$$

Учитывая, что $a_\alpha/a_\gamma = (\Omega_\alpha/2\Omega_\gamma)^{1/3} = e^{u/3} 2^{-1/3}$, находим из уравнений (17)

$$u_1 = \frac{u}{3} + \frac{1}{6} \ln 2 \approx 0.125,$$

$$u_2 = \frac{u}{3} - \frac{1}{6} \ln \left(\frac{27}{16} \right) \approx -0.078, \quad (18)$$

$$u_3 = \frac{u}{3} - \frac{1}{6} \ln \left(\frac{32}{27} \right) \approx -0.019,$$

где численные значения (приводимые для иллюстрации и использованные также при построении рис. 1б и 2) соответствуют переходу $\gamma \rightarrow \alpha$ в железе, для которого $u = \ln(\Omega_\alpha/\Omega_\gamma) \approx 0.027$ [11].

Покажем, что получаемая при этом ОЦК-структура имеет с начальной ГЦК-структурой ориентационные соотношения Нишиямы, т. е. является N-мартенситом. Эти ориентационные соотношения между фазами α и γ имеют вид [2]

$$(011)_\alpha \parallel (111)_\gamma, \quad [0\bar{1}1]_\alpha \parallel [2\bar{1}\bar{1}]_\gamma. \quad (19)$$

Первое из этих равенств означает параллельность плотноупакованных плоскостей в фазах α и γ , которая выполнена для всех путей превращений, обсуждаемых в настоящей работе. Второе равенство, согласно соотношениям (16), (12) и (10), соответствует

параллельности вектора $(\mathbf{R}_{g'} - \mathbf{R}_{h'}) = (\mathbf{a}_3^\alpha - \mathbf{a}_2^\alpha)$ на рис. 1б вектору $(\mathbf{r}_g - \mathbf{r}_h) = 3\mathbf{d}_1 = (2\mathbf{a}_1^\gamma - \mathbf{a}_2^\gamma - \mathbf{a}_3^\gamma)/2$ на рис. 1а. Эта параллельность очевидна из рис. 1. Таким образом, переход, осуществляемый деформациями растяжений и сжатий (18) структуры λ и изображенный на рис. 1, соответствует переходу $\gamma \rightarrow \alpha$ N в структуру N-мартенсита.

Ориентационные соотношения Курдюмова–Закса, связывающие ГЦК-структуру с KS-мартенситом, соответствуют параллельности в фазах α и γ не только плотноупакованных плоскостей, но и плотноупакованных направлений в этих плоскостях. Это может осуществляться с помощью соотношений двух типов [2]:

$$(011)_\alpha \parallel (111)_\gamma, \quad [11\bar{1}]_\alpha \parallel [10\bar{1}]_\gamma, \quad (20)$$

или

$$(011)_\alpha \parallel (111)_\gamma, \quad [1\bar{1}1]_\alpha \parallel [\bar{1}10]_\gamma. \quad (21)$$

Соотношения (20) или (21) соответствуют двум возможным двойниковым вариантам KS-мартенсита. Для первого из них координаты атомов $\mathbf{r} = (x, y)$ в плотноупакованных плоскостях α -фазы показаны темными символами на рис. 2, а для второго варианта аналогичные координаты \mathbf{r}_t получаются из \mathbf{r} зеркальным отражением относительно оси x : $\mathbf{r}_t = (x, -y)$. На рис. 2 вектор $(\mathbf{R}_{b''} - \mathbf{R}_{e''})$, который, согласно формулам (16), пропорционален вектору $(\mathbf{a}_1^\alpha + \mathbf{a}_2^\alpha - \mathbf{a}_3^\alpha)$ (т. е. направлен вдоль плотноупакованного направления $[11\bar{1}]_\alpha$ α -фазы), является параллельным вектору $(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_e)$, который по формулам (12) пропорционален вектору \mathbf{b}_2 , т. е. согласно формулам (10) направлен вдоль плотноупакованного направления $[10\bar{1}]_\gamma$ γ -фазы. Для упомянутого второго, двойникового варианта (соответствующего зер-

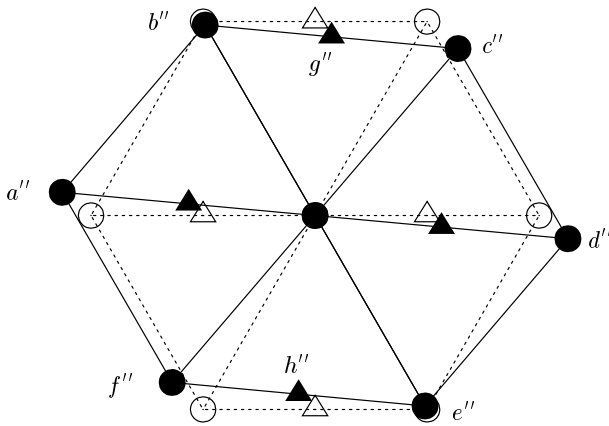


Рис. 2. Поперечные координаты атомов \mathbf{r} в структуре λ (светлые символы) и в KS-мартенсите (темные символы). Кружки и треугольники указывают положения \mathbf{r} соответственно в нечетных плоскостях со значением высоты $H = (2n + 1)h$ и в четных плоскостях с $H = 2nh$, где h — те же межплоскостные расстояния, что на рис. 1б

кальному отражению рис. 2 относительно оси x) аналогичная параллельность имеет место между векторами $(\tilde{\mathbf{R}}_{c''} - \tilde{\mathbf{R}}_{h''}) \propto (\mathbf{a}_1^\alpha - \mathbf{a}_2^\alpha + \mathbf{a}_3^\alpha)$ в α -фазе (где символ «тильда» указывает упомянутое отражение) и вектором \mathbf{b}_3 , направленным вдоль плотноупакованного направления $[110]_\gamma$ γ -фазы.

На рис. 2 видно, что структуру KS-мартенсита можно получить из структуры N-мартенсита поворотом вокруг оси, нормальной рассматриваемым плотноупакованным плоскостям. Этот поворот удобно описывать, выражая орты направлений $(\mathbf{r}_{d''} - \mathbf{r}_{a''})$ и $(\mathbf{r}_{g''} - \mathbf{r}_{h''})$ на рис. 2 через аналогичные орты направлений $(\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_a)$ и $(\mathbf{r}_g - \mathbf{r}_h)$ на рис. 1а. Обозначая эти четыре орта, соответственно, как $\mathbf{e}_{d''}$, $\mathbf{e}_{g''}$, \mathbf{e}_d и \mathbf{e}_g , имеем из рис. 2

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{d''} &= [\mathbf{e}_d(\sqrt{6} + 1) - \mathbf{e}_g(\sqrt{3} - \sqrt{2})]/2\sqrt{3}, \\ \mathbf{e}_{g''} &= [\mathbf{e}_d(\sqrt{3} - \sqrt{2}) + \mathbf{e}_g(\sqrt{6} + 1)]/2\sqrt{3}. \end{aligned} \quad (22)$$

Рисунок 2 и формулы (22) показывают, что угол φ обсуждаемого поворота достаточно мал: $\text{tg } \varphi \approx 0.092$.

При фактическом образовании мартенсита в матрице аустенита обсуждаемый поворот должен соответствовать наличию в области границы между KS-мартенситом и аустенитом дополнительных деформаций «кручения» сравнительно со случаем N-мартенсита. Однако при образовании

KS-мартенсита этот проигрыш в упругой энергии, по-видимому, с избытком компенсируется энергетическим выигрышем, связанным с сохранением при переходе в KS-мартенсит (в отличие от переходов в N-мартенсит) части плотноупакованных направлений. Количественно эти вопросы могут исследоваться на основе полных ОФГЛ, включающих энергетические вклады как от фононных смещений, так и от деформаций, и обсуждаемых ниже.

3. ФОНОННО-ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ, ОПИСЫВАЮЩИЕ МАРТЕНСИТ В МАТРИЦЕ АУСТЕНИТА

Ниже мы будем рассматривать ОФГЛ, которые могут использоваться для описания структуры и эволюции (например, процессов образования и роста) включений мартенсита в матрице аустенита. Эти проблемы наиболее типичны для приложений, и они привлекают основной интерес в исследованиях [1, 2]. При теоретическом описании таких структур и фононные, и акустические смещения атомов естественно отсчитывать от их значений в равновесной недеформированной γ -фазе в области, удаленной от обсуждаемого мартенситного включения. Поэтому как фононный параметр превращения $s(\mathbf{R})$, так и деформации $u_{ij}(\mathbf{R})$ отличны от нуля только в некоторой ограниченной области \mathbf{R} , содержащей мартенситное включение и его границы с окружающей γ -фазой, а при удалении от этой области значения s и u_{ij} должны обращаться в нуль.

Общее выражение для ОФГЛ, зависящего от медленноменяющихся параметров превращения s и u_{ij} , подробно обсуждалось в работе [11] и дается формулой [11, формула (35)]

$$F = \int d^3R \left[f(s, u_{ij}) + \sum_{kl} g_{kl}(s, u_{ij}) \nabla_k s \nabla_l s \right], \quad (23)$$

где буквы i, j, k, l — декартовы индексы, а атомный объем v_a , входивший общим множителем в формулу (35) из работы [11], теперь включен в величины f и g_{kl} . Первое слагаемое f в выражении (23), которое в общем случае имеет смысл плотности свободной энергии на единицу объема (а при пренебрежении температурными вкладами — просто плотности энергии на единицу объема), мы называем однородной частью функционала, а второе слагаемое — градиентным членом, и коэффициенты g_{kl} в этом члене можно выразить через динамическую матрицу кристалла на пути превращения по соотношениям (49) из работы [11].

Общее выражение (23) применимо, вообще говоря, для любых медленноменяющихся деформаций u_{ij} . Но как отмечалось выше и видно из дальнейшего, для реальных мартенситных включений значения возникающих в них деформаций решетки аустенита обычно, по-видимому, невелики. Тогда величины f и g_{kl} в формуле (23) можно разлагать по степеням u_{ij} . При этом, поскольку второй, градиентный член в (23) в используемом подходе предполагается малым сравнительно с первым членом, деформационные поправки в нем, по-видимому, можно отбрасывать. Поэтому ниже мы будем рассматривать деформационные вклады только в первое, однородное слагаемое f в (23), записывая его как

$$f = f_0(s) - \sum_{ij} \sigma_{ij}(s) u_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} c_{ijkl}(s) u_{ij} u_{kl}, \quad (24)$$

где σ_{ij} и c_{ijkl} являются производными от функции f в (23) по деформациям при нулевых значениях этих деформаций:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(s) &= - \left(\frac{\partial f}{\partial u_{ij}} \right)_{u_{ij}=0}, \\ c_{ijkl}(s) &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial u_{ij} \partial u_{kl}} \right)_{u_{ij}, u_{kl}=0}. \end{aligned} \quad (25)$$

Величины σ_{ij} и c_{ijkl} , очевидно, имеют смысл локальных напряжений и локальных модулей упругости, и они зависят только от одной фоновой переменной s . Для вычислений функций $f_0(s)$, $\sigma_{ij}(s)$ и $c_{ijkl}(s)$ можно использовать либо расчеты *ab initio*, либо те или иные интерполяции экспериментальных данных, например, те, которые обсуждаются ниже.

4. ОЦЕНКИ ЛОКАЛЬНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ ВО ВКЛЮЧЕНИЯХ МАРТЕНСИТА В МАТРИЦЕ АУСТЕНИТА

Оценим максимальные значения деформаций u_{ij} во включениях мартенсита в γ -фазе относительно свободной однородной γ -фазы. Естественно ожидать, что эти максимальные значения будут достигаться во «внутренней» части включения, максимально удаленной от границ с γ -фазой и близкой по свойствам к однородной и равновесной α -фазе. Тогда их можно оценивать, используя соотношения (18) и геометрические результаты разд. 2.

В этих оценках учтем малость всех обсуждаемых деформаций, которая иллюстрируется соотношениями (18) и приводимыми ниже равенствами

(32) и (33). Поэтому будет использоваться линейная теория упругости, в которой компоненты деформаций u_{ij} в разных системах координат преобразуются, как произведения компонент ортов главных осей \mathbf{e}_i этих систем координат. Для γ -фазы эти орты мы будем обозначать как $\mathbf{e}_{i\gamma} = \mathbf{a}_i^\gamma / a_\gamma$. При описании N-мартенсита деформации имеют простой вид (18) в структуре λ , для которой орты главных осей $\mathbf{e}_{i\lambda}$, согласно формулам (8) и (10), можно записать как $\mathbf{e}_{1\lambda} = \mathbf{b}_1/b$, $\mathbf{e}_{2\lambda} = \mathbf{d}_1/d$, и $\mathbf{e}_{3\lambda} = \mathbf{h}/h$. Для KS-мартенсита простые соотношения (18) выполняются в декартовой системе координат с ортами (22), которую мы для краткости будем называть системой главных осей κ , с ортами $\mathbf{e}_{1\kappa} = \mathbf{e}_{d''}$, $\mathbf{e}_{2\kappa} = \mathbf{e}_{g''}$, и $\mathbf{e}_{3\kappa} = \mathbf{h}/h$. Для деформаций u_{ij} будем использовать обозначения Фогта u_n : $u_{xx} = u_1$, $u_{yy} = u_2, \dots, u_{xy} = u_6$, и значения u_n в фазе γ будем обозначать как $u_{n\gamma}$, а в структуре λ или в системе κ — как $u_{n\lambda}$ или $u_{n\kappa}$.

При переходе от системы координат λ или κ к системе γ орты главных осей этих систем линейно связаны друг с другом:

$$\mathbf{e}_{i\gamma} = \sum_j A_{ij}^{\gamma\lambda} \mathbf{e}_{j\lambda}, \quad \mathbf{e}_{i\gamma} = \sum_j A_{ij}^{\gamma\kappa} \mathbf{e}_{j\kappa}, \quad (26)$$

где матрицы поворота $A_{ij}^{\gamma\lambda}$ и $A_{ij}^{\gamma\kappa}$, согласно формулам (8) и (22), даются соотношениями

$$\begin{aligned} A_{ij}^{\gamma\lambda} &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}, \\ A_{ij}^{\gamma\kappa} &= \end{aligned} \quad (27)$$

$$= \begin{pmatrix} (1/3 - 1/\sqrt{6}) & (1/3\sqrt{2} + 1/\sqrt{3}) & 1/\sqrt{3} \\ -2/3 & -\sqrt{2}/3 & 1/\sqrt{3} \\ (1/3 - 1/\sqrt{6}) & (1/3\sqrt{2} - 1/\sqrt{3}) & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

При этом компоненты тензора деформаций $u_{ij} = (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i) / 2$ преобразуются как симметризованные произведения компонент векторов \mathbf{e}_i :

$$\begin{aligned} u_{ij}^\gamma &= \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^3 (A_{ik} A_{jl} + A_{il} A_{jk}) u_{kl} \equiv \\ &\equiv \sum_{k,l=1}^3 B_{ij,kl} u_{kl}, \end{aligned} \quad (28)$$

или, в обозначениях Фогта:

$$u_{m\gamma} = \sum_{n=1}^3 B_{mn} u_n + 2 \sum_{n=4}^6 B_{mn} u_n. \quad (29)$$

В формулах (28) и (29) A_{ij} есть $A_{ij}^{\gamma\lambda}$ или $A_{ij}^{\gamma\kappa}$, B_{mn} есть $B_{mn}^{\gamma\lambda}$ или $B_{mn}^{\gamma\kappa}$, u_n есть $u_{n\lambda}$ или $u_{n\kappa}$, и элементы фогтовских матриц B_{mn} выражаются через декар-

товские элементы A_{ij} в формуле (28) аналогично выражениям фогтовских деформаций u_n через декартовские деформации u_{ij} , например: $B_{14} = A_{xy}A_{xz}$, $B_{45} = (A_{yz}A_{zx} + A_{yx}A_{zz})/2$ и т. д.

Выполняя вычисления по формулам (27)–(29), получаем для матриц $\mathbf{B}^{\gamma\lambda}$ или $\mathbf{B}^{\gamma\kappa}$, описывающих преобразование деформаций от системы λ или системы κ к системе γ , такие выражения:

$$\mathbf{B}^{\gamma\lambda} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{2\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{6}} & \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6\sqrt{2}} & -\frac{1}{2\sqrt{6}} & -\frac{1}{2\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad (30)$$

$$\mathbf{B}^{\gamma\kappa} = \begin{pmatrix} \left(\frac{5}{18} - \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \left(\frac{7}{18} + \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \frac{1}{3} & \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{6}}{18}\right) & \left(\frac{\sqrt{3}}{9} - \frac{\sqrt{2}}{6}\right) & \left(\frac{\sqrt{3}}{18} - \frac{\sqrt{2}}{9}\right) \\ \frac{4}{9} & \frac{2}{9} & \frac{1}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{9} & -\frac{2\sqrt{3}}{9} & \frac{2\sqrt{2}}{9} \\ \left(\frac{5}{18} + \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \left(\frac{7}{18} - \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \frac{1}{3} & \left(-\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{6}}{18}\right) & \left(\frac{\sqrt{3}}{9} + \frac{\sqrt{2}}{6}\right) & \left(-\frac{\sqrt{3}}{18} - \frac{\sqrt{2}}{9}\right) \\ \left(-\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \left(-\frac{1}{9} + \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \frac{1}{3} & \left(-\frac{1}{6} - \frac{\sqrt{6}}{36}\right) & \left(-\frac{\sqrt{3}}{18} + \frac{\sqrt{2}}{12}\right) & \left(\frac{\sqrt{3}}{18} - \frac{\sqrt{2}}{9}\right) \\ -\frac{1}{18} & -\frac{5}{18} & \frac{1}{3} & \frac{\sqrt{6}}{18} & \frac{\sqrt{3}}{9} & \frac{2\sqrt{2}}{9} \\ \left(-\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \left(-\frac{1}{9} - \frac{\sqrt{6}}{9}\right) & \frac{1}{3} & \left(\frac{1}{6} - \frac{\sqrt{6}}{36}\right) & \left(-\frac{\sqrt{3}}{18} - \frac{\sqrt{2}}{12}\right) & \left(-\frac{\sqrt{3}}{18} - \frac{\sqrt{2}}{9}\right) \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Подставляя во второе равенство (28) значения деформаций $u_{n\lambda}$ или $u_{n\kappa} = u_{n\lambda}$ из формул (18) и значения матричных элементов $B_{mn}^{\gamma\lambda}$ или $B_{mn}^{\gamma\kappa}$ из формул (30) или (31), можно найти значения всех деформаций $u_{n\gamma}$ в обсуждаемых включениях мартенсита относительно окружающей γ -фазы. При этом для N-мартенсита получаем

$$\begin{aligned} u_{1\gamma}^N &= \frac{u}{3} - \frac{1}{6} \ln \frac{3}{2} \approx -0.058, \\ u_{2\gamma}^N &= u_{3\gamma}^N = \frac{u}{3} + \frac{1}{12} \ln \frac{3}{2} \approx 0.043, \\ u_{4\gamma}^N &= -\frac{1}{12} \ln \frac{8}{3} \approx -0.082, \\ u_{5\gamma}^N &= u_{6\gamma}^N = \frac{1}{6} \ln \frac{9}{8} \approx 0.020, \end{aligned} \quad (32)$$

а для менее симметричного KS-мартенсита имеем

$$\begin{aligned}
 u_{1\gamma}^{KS} &= \frac{u}{3} - \frac{1}{18} (\sqrt{6} + 0.5) \ln \frac{3}{2} \approx -0.057, \\
 u_{2\gamma}^{KS} &= \frac{u}{3} + \frac{1}{18} \ln \frac{3}{2} \approx 0.032, \\
 u_{3\gamma}^{KS} &= \frac{u}{3} + \frac{1}{18} (\sqrt{6} - 0.5) \ln \frac{3}{2} \approx 0.053, \\
 u_{4\gamma}^{KS} &= -\frac{1}{18} \left(\sqrt{6} \ln \frac{3}{2} + \ln \frac{128}{81} \right) \approx -0.081, \\
 u_{5\gamma}^{KS} &= \frac{11}{54} \ln 3 - \frac{17}{54} \ln 2 \approx 0.006, \\
 u_{6\gamma}^{KS} &= \frac{1}{18} \left(\sqrt{6} \ln \frac{3}{2} - \ln \frac{128}{81} \right) \approx 0.030.
 \end{aligned}
 \tag{33}$$

Численные значения в этих формулах, как и в формуле (18), соответствуют $\gamma \rightarrow \alpha$ -переходу в железе.

Соотношения (32) и (33) показывают, во-первых, что численные значения деформаций $u_{n\gamma}$ в N-мартенсите и в KS-мартенсите близки; это связано с отмечавшейся малостью угла поворота φ между системами координат κ и λ . Видно также, что эти деформации достаточно малы, составляя от одного до восьми процентов. Кроме того, мы заметим, что эти численные значения соответствуют полностью «невозмущенной» α -фазе, для которой влияние границ с окружающей γ -фазой (в частности, искажений ОЦК-структуры, связанных с наличием таких границ) пренебрежимо мало. В то же время в не слишком толстых мартенситных включениях, в частности, в тех, которые возникают в процессах зарождения и роста мартенситной фазы (и кажутся наиболее интересными для приложений), значения деформаций могут быть существенно меньшими, чем в оценках (32) и (33). Поэтому разложение ОФГЛ по степеням деформаций, использованное при выводе соотношений (24), для большинства практически интересных проблем может быть достаточно точным.

5. ОЦЕНКИ ЛОКАЛЬНЫХ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ВО ВКЛЮЧЕНИЯХ МАРТЕНСИТА В МАТРИЦЕ АУСТЕНИТА

Оценим теперь изменения локальных модулей упругости во включениях мартенсита относительно модулей упругости в γ -фазе. Для этого мы снова рассмотрим внутреннюю область включения, достаточно удаленную от границ с окружающей γ -фазой,

и найдем значения модулей упругости в этой области при их описании в системе главных осей γ -фазы, используя для численных оценок имеющиеся экспериментальные данные об упругих модулях в γ - и α -железе. Полученные результаты будут характеризовать масштаб изменений локальных модулей упругости $c_{ijkl}(s)$ в формуле (24) при полном изменении амплитуды фоновых смещений s от нуля до единицы.

Модули упругости c_{ijkl} образуют тензор четвертого ранга, компоненты которого при поворотах системы координат преобразуются как произведения четвертых степеней компонент ортов e_i . Если, по аналогии с формулой (26), определить матрицы поворота $A_{ij}^{\alpha\gamma}$ между системами главных осей γ -фазы и α -фазы соотношениями

$$e_{i\alpha} = \sum_j A_{ij}^{\alpha\gamma} e_{j\gamma}, \tag{34}$$

то, согласно рис. 1 и 2 и формулам (10), (16) и (22), матрицы $\mathbf{A}_N^{\alpha\gamma}$ и $\mathbf{A}_{KS}^{\alpha\gamma}$, описывающие переходы соответственно в N-мартенсит и в KS-мартенсит, можно компактно записать в таком виде:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_N^{\alpha\gamma} &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\xi_+ & -\frac{\xi_-}{\sqrt{2}} & -\frac{\xi_-}{\sqrt{2}} \\ \xi_- & -\frac{\xi_+}{\sqrt{2}} & -\frac{\xi_+}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{A}_{KS}^{\alpha\gamma} &= \begin{pmatrix} \eta_- & -\frac{2}{3} & \eta_+ \\ -\zeta_+ & \eta_- & -\frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & -\eta_+ & \zeta_- \end{pmatrix},
 \end{aligned}
 \tag{35}$$

где численные параметры ξ_{\pm} , η_{\pm} , и ζ_{\pm} определены так:

$$\begin{aligned}
 \xi_{\pm} &= \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \pm \frac{1}{\sqrt{6}} \right), \quad \eta_{\pm} = \left(\frac{1}{3} \pm \frac{1}{\sqrt{6}} \right), \\
 \zeta_{\pm} &= \left(\frac{1}{6} \pm \sqrt{\frac{2}{3}} \right).
 \end{aligned}
 \tag{36}$$

При этом матрицы $\mathbf{B}^{\alpha\gamma}$, определенные аналогично матрицам $\mathbf{B}^{\gamma\lambda}$ и $\mathbf{B}^{\gamma\kappa}$ в формулах (28)–(31), для переходов в N-мартенсит и в KS-мартенсит даются такими выражениями:

$$\mathbf{B}_N^{\alpha\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \xi_+^2 & \frac{\xi_-^2}{2} & \frac{\xi_-^2}{2} & \frac{\xi_-^2}{2} & \frac{1}{6\sqrt{2}} & \frac{1}{6\sqrt{2}} \\ \xi_-^2 & \frac{\xi_+^2}{2} & \frac{\xi_+^2}{2} & \frac{\xi_+^2}{2} & -\frac{1}{6\sqrt{2}} & -\frac{1}{6\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{\xi_+}{2} & -\frac{\xi_+}{2} & 0 & \frac{\xi_-}{2\sqrt{2}} & -\frac{\xi_-}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\xi_-}{2} & -\frac{\xi_-}{2} & 0 & -\frac{\xi_+}{2\sqrt{2}} & \frac{\xi_+}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (37)$$

$$\mathbf{B}_{KS}^{\alpha\gamma} = \begin{pmatrix} \eta_+^2 & \frac{4}{9} & \eta_-^2 & -\frac{2\eta_-}{3} & -\frac{1}{18} & -\frac{2\eta_+}{3} \\ \zeta_+^2 & \eta_+^2 & \frac{1}{36} & -\frac{\eta_+}{6} & \frac{\zeta_+}{6} & -\zeta_+\eta_+ \\ \frac{1}{36} & \eta_-^2 & \zeta_-^2 & -\zeta_-\eta_- & \frac{\zeta_-}{6\sqrt{2}} & -\frac{\eta_-}{6} \\ -\frac{\zeta_+}{6} & \frac{1}{18} & -\frac{\zeta_-}{6} & \theta_- & \frac{11}{36} & \theta_+ \\ \frac{\eta_+}{6} & \frac{2\eta_-}{3} & \zeta_-\eta_- & -\vartheta_- & \theta_- & -\frac{1}{36} \\ -\zeta_+\eta_+ & -\frac{2\eta_+}{3} & -\frac{\eta_-}{6} & \frac{1}{36} & -\theta_+ & \vartheta_+ \end{pmatrix}, \quad (38)$$

где в формулах (38) введены еще четыре численных параметра, θ_{\pm} и ϑ_{\pm} , определенные равенствами

$$\theta_{\pm} = \left(\frac{2}{9} \pm \frac{1}{3\sqrt{6}} \right), \quad \vartheta_{\pm} = \left(\frac{7}{36} \pm \frac{1}{3\sqrt{6}} \right). \quad (39)$$

Если обозначить значения модулей упругости в рассматриваемом включении при их описании в системах главных осей мартенситной α -фазы и окружающей γ -фазы как соответственно c_{ijkl}^{α} и c_{ijkl}^{γ} , то эти значения связаны линейными соотношениями, аналогичными равенствам (28):

$$c_{ijkl}^{\alpha\gamma} = \sum_{i',j',k',l'=1}^3 B_{ij,i'}^{\alpha\gamma} B_{kl,k'l'}^{\alpha\gamma} c_{i'j'k'l'}^{\alpha}, \quad (40)$$

где $B_{ij,i'}^{\alpha\gamma} = (A_{ii'}^{\alpha\gamma} A_{jj'}^{\alpha\gamma} + A_{ij'}^{\alpha\gamma} A_{ji'}^{\alpha\gamma})/2$, а матрицы поворота $\mathbf{A}^{\alpha\gamma}$ — те же, что в уравнениях (35). После перехода к обозначениям Фогта, аналогичного переходу от равенства (28) к (29), соотношения (40) принимают вид

$$c_{mn}^{\alpha\gamma} = \left(\sum_{m',n'=1}^3 + 2 \sum_{m'=1}^3 \sum_{n'=4}^6 + 4 \sum_{m',n'=4}^6 \right) \times D_{mn,m'n'}^{\alpha\gamma} c_{kl}^{\alpha}, \quad (41)$$

где $D_{mn,m'n'}^{\alpha\gamma} = (B_{mm'}^{\alpha\gamma} B_{nn'}^{\alpha\gamma} + B_{mn'}^{\alpha\gamma} B_{nm'}^{\alpha\gamma})/2$, и матрицы $\mathbf{B}^{\alpha\gamma}$ для переходов в N-мартенсит и в KS-мартенсит даются соответственно выражениями (37) и (38).

Заметим теперь, что в обсуждаемой ОЦК-фазе α имеются только три разных ненулевых модуля упругости: $c_{11} = c_{22} = c_{33}$, $c_{12} = c_{23} = c_{31}$ и $c_{44} = c_{55} = c_{66}$. Поэтому все модули упругости $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в соотношении (41) выражаются только через три комбинации матричных элементов $D_{mn,kl}^{\alpha\gamma}$, которые мы будем обозначать как d_{kl}^{mn} :

$$\begin{aligned} d_{11}^{mn} &= D_{mn,11}^{\alpha\gamma} + D_{mn,22}^{\alpha\gamma} + D_{mn,33}^{\alpha\gamma}, \\ d_{44}^{mn} &= D_{mn,44}^{\alpha\gamma} + D_{mn,55}^{\alpha\gamma} + D_{mn,66}^{\alpha\gamma}, \\ d_{12}^{mn} &= D_{mn,12}^{\alpha\gamma} + D_{mn,23}^{\alpha\gamma} + D_{mn,31}^{\alpha\gamma}, \end{aligned} \quad (42)$$

соотношения (41) упрощаются:

$$c_{mn}^{\alpha\gamma} = d_{11}^{mn} c_{11}^{\alpha} + 2d_{12}^{mn} c_{12}^{\alpha} + 4d_{44}^{mn} c_{44}^{\alpha}. \quad (43)$$

Алгебраические расчеты на основе формул (35)–(43) дают для ненулевых модулей упругости в N-мартенсите такие выражения:

$$\begin{aligned} c_{11}^{\alpha\gamma} &= B_{\alpha} + \frac{4}{3}c_{44}^{\alpha} - \frac{1}{3}c_{\alpha}^{\alpha}, \\ c_{22}^{\alpha\gamma} &= B_{\alpha} + \frac{4}{3}c_{44}^{\alpha} - c_{\alpha}^{\alpha}\varphi_{+}, \\ c_{33}^{\alpha\gamma} &= B_{\alpha} + \frac{4}{3}c_{44}^{\alpha} - c_{\alpha}^{\alpha}\varphi_{-}, \\ c_{12}^{\alpha\gamma} &= B_{\alpha} - \frac{2}{3}c_{44}^{\alpha} + c_{\alpha}^{\alpha}\psi_{+}, \\ c_{23}^{\alpha\gamma} &= B_{\alpha} - \frac{2}{3}c_{44}^{\alpha} + \frac{7}{12}c_{\alpha}^{\alpha}, \\ c_{31}^{\alpha\gamma} &= B_{\alpha} - \frac{2}{3}c_{44}^{\alpha} + c_{\alpha}^{\alpha}\psi_{-}, \\ c_{44}^{\alpha\gamma} &= c_{44}^{\alpha} - \frac{1}{12}c_{\alpha}^{\alpha}, \\ c_{55}^{\alpha\gamma} &= c_{44}^{\alpha} - c_{\alpha}^{\alpha}\chi_{+}, \quad c_{66}^{\alpha\gamma} = c_{44}^{\alpha} - c_{\alpha}^{\alpha}\chi_{-}, \\ c_{14}^{\alpha\gamma} &= c_{56}^{\alpha\gamma} = -\frac{1}{6}c_{\alpha}^{\alpha}, \\ c_{24}^{\alpha\gamma} &= \frac{1}{2}c_{\alpha}^{\alpha}\psi_{+}, \quad c_{34}^{\alpha\gamma} = \frac{1}{2}c_{\alpha}^{\alpha}\psi_{-}. \end{aligned} \quad (44)$$

Здесь для компактности формул вместо модулей $c_{11}^{\alpha} = c_{11}$ и $c_{12}^{\alpha} = c_{12}$ используются модуль сжатия $B = (c_{11} + 2c_{12})/3$ и «анизотропный» модуль сдвига c_{α} , равный разности модулей поперечного и продольного сдвигов: $c_{\alpha} = c_{44} - c'$, где $c' = (c_{11} - c_{12})/2$, и введены численные параметры

$$\begin{aligned} \varphi_{\pm} &= \left(\frac{3}{4} \pm \frac{\sqrt{2}}{3} \right), \quad \psi_{\pm} = \left(\frac{1}{6} \pm \frac{\sqrt{2}}{3} \right), \\ \chi_{\pm} &= \left(\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{2}{3}} \right), \end{aligned} \quad (45)$$

с такими значениями:

$$\begin{aligned} \varphi_{+} &\approx 1.22, \quad \varphi_{-} \approx 0.28, \quad \psi_{+} \approx 0.64, \\ \psi_{-} &\approx -0.30, \quad \chi_{+} \approx 0.97, \quad \chi_{-} \approx -0.03. \end{aligned} \quad (46)$$

Формулы (44) отражают, в частности, тот факт, что симметрия кристалла вдоль рассматриваемого пути превращения $\gamma \rightarrow \alpha_N$ остается моноклинной, поэтому во включениях N-мартенсита в γ -фазе отличны от нуля только тринадцать модулей упругости c_{mn} (см., например, [15]), входящих в соотношение (44).

Для KS-мартенсита выражения для этих тринадцати модулей упругости имеют тот же вид (44), что

для N-мартенсита, только в выражениях (45) для параметров φ_{\pm} , ψ_{\pm} и χ_{\pm} каждый множитель $\sqrt{2}$ нужно заменить на $5\sqrt{6}/9$. Численно это соответствует замене множителя 1.41 на 1.36, т.е. изменения составляют менее 4%. Кроме того, в KS-мартенсите отличны от нуля еще восемь модулей упругости (которые в N-мартенсите равны нулю), поскольку вдоль пути превращения $\gamma \rightarrow \alpha_{KS}$ кристалл имеет самую низкую, триклинную симметрию с 21 ненулевым модулем упругости [15]. Каждый из этих «дополнительных» восьми модулей пропорционален анизотропному модулю сдвига c_{α}^{α} с численно малым коэффициентом пропорциональности:

$$\begin{aligned} c_{15}^{\alpha\gamma} &= c_{16}^{\alpha\gamma} = c_{\alpha}^{\alpha}\sqrt{6}/27 \approx 0.09c_{\alpha}^{\alpha}, \\ c_{26}^{\alpha\gamma} &= c_{35}^{\alpha\gamma} = -c_{\alpha}^{\alpha}\sqrt{6}/18 \approx -0.14c_{\alpha}^{\alpha}, \\ c_{25}^{\alpha\gamma} &= c_{36}^{\alpha\gamma} = c_{45}^{\alpha\gamma} = c_{46}^{\alpha\gamma} = c_{\alpha}^{\alpha}\sqrt{6}/54 \approx 0.05c_{\alpha}^{\alpha}. \end{aligned} \quad (47)$$

Для оценок масштаба изменений модулей $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в мартенсите, описываемых формулами (44) и (47), относительно модулей c_{mn}^{γ} в чистой γ -фазе можно воспользоваться имеющимися экспериментальными данными о модулях упругости в α - и γ -железе [16, 17]. Некоторые из этих данных приводятся в табл. 2. При этом мы учитываем, что модули упругости в α -железе (особенно «мягкий» модуль c') существенно меняются с температурой [16], и того же можно ждать и для γ -железа. В связи с этим сравнение модулей $c_{mn}^{\alpha\gamma}$, c_{mn}^{α} и c_{mn}^{γ} желательнее проводить при возможно более близких температурах, например, вблизи температуры $\gamma \rightarrow \alpha$ -перехода в железе, равной $T^{\gamma\alpha} = 1184$ К. Поэтому для модулей c_{mn}^{α} мы приводим значения, соответствующие максимальной температуре опытов [16], $T = 1093$ К, и полученные при ультразвуковых измерениях (более точных, чем нейтронные). В то же время для модулей c_{mn}^{γ} нам известны только данные при $T = 1428$ К, полученные методом рассеяния нейтронов [17], которые и приведены в табл. 2.

Подстановка в формулы (44) и (47) значений c_{mn}^{α} из табл. 2 позволяет оценить модули упругости $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в мартенситных включениях для железа. Получающиеся при этом значения $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в N-мартенсите и в KS-мартенсите для тринадцати модулей, указанных в формулах (44), даются, соответственно, во второй и третьей строках табл. 3, а для восьми модулей, описываемых формулами (47) и отличных от нуля только в KS-мартенсите, эти значения приведены в пятой строке табл. 3.

Обсудим результаты, даваемые соотношениями (44) и (47) и табл. 2 и 3. Прежде всего, формулы (44) и (47) иллюстрируют тот очевидный факт,

Таблица 2. Экспериментальные значения модулей упругости для железа (в Мбар)

	c_{11}	c_{12}	c_{44}	B	c'	c_a
α -Fe, 1093 K [16]	1.54	1.22	1.00	1.33	0.16	0.84
γ -Fe, 1428 K [17]	1.54	1.22	0.77	1.33	0.16	0.51

Таблица 3. Значения модулей упругости $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в формулах (44) и (47) (в Мбар) при использовании экспериментальных значений c_{mn}^α для железа из табл. 2

Фаза	$c_{11}^{\alpha\gamma}$	$c_{22}^{\alpha\gamma}$	$c_{33}^{\alpha\gamma}$	$c_{12}^{\alpha\gamma}$	$c_{23}^{\alpha\gamma}$	$c_{31}^{\alpha\gamma}$	$c_{44}^{\alpha\gamma}$	$c_{55}^{\alpha\gamma}$	$c_{66}^{\alpha\gamma}$	$c_{14}^{\alpha\gamma}$	$c_{56}^{\alpha\gamma}$	$c_{24}^{\alpha\gamma}$	$c_{34}^{\alpha\gamma}$
α_N	2.38	1.64	2.43	1.20	1.15	0.41	0.93	0.18	0.98	-0.14	-0.14	0.27	-0.13
α_{KS}	2.38	1.65	2.41	1.18	1.15	0.42	0.93	0.20	0.96	-0.14	-0.14	0.26	-0.12

Фаза	$c_{15}^{\alpha\gamma}$	$c_{16}^{\alpha\gamma}$	$c_{26}^{\alpha\gamma}$	$c_{35}^{\alpha\gamma}$	$c_{25}^{\alpha\gamma}$	$c_{36}^{\alpha\gamma}$	$c_{45}^{\alpha\gamma}$	$c_{46}^{\alpha\gamma}$
α_{KS}	0.08	0.08	-0.11	-0.11	0.04	0.04	0.04	0.04

что все изменения модулей упругости $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ относительно c_{mn}^α при обсуждаемых поворотах системы координат связаны только с анизотропией упругих свойств, в то время как при $c_a = 0$ мы имели бы $c_{mn}^{\alpha\gamma} = c_{mn}^\alpha$. Однако в реальных металлах кристаллическая анизотропия обычно значительна (для железа это иллюстрируется в табл. 2), и значения $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ существенно отличаются от c_{mn}^α .

Обсудим теперь различия между значениями модулей упругости c_{mn}^γ в γ -фазе, даваемыми в нижней строке табл. 2, и значениями $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ из табл. 3. Эти различия могут характеризовать пространственные изменения локальных модулей упругости от их значений в области вдали от включения до значений во «внутренней» части включения. При этом так же, как в аналогичных оценках локальных деформаций $u_{n\gamma}$ в формулах (32) и (33), использованные оценки $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ могут заметно завышать реальный масштаб обсуждаемых изменений модулей упругости вследствие неучитываемого влияния границ с окружающей γ -фазой. При использовании фононно-деформационной модели (25) эти изменения характеризуют также зависимость локальных модулей упругости $c_{mn}(s)$ в мартенситном включении от амплитуды фононных смещений s при изменении этой амплитуды от $s \approx 0$ вдали от включения до $s \approx 1$ внутри включения.

Сравнивая значения $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ и c_{mn}^γ в табл. 3 и 2, мы видим, что модули c_{11} и c_{33} во включении примерно в 1.5 раза больше, а модули c_{31} и c_{55} — в 3–3.5 раз меньше, чем в γ -фазе. Отличия остальных модулей $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ от c_{mn}^γ (т. е. от их значений вдали от включе-

ния) кажутся достаточно малыми. Это может указывать на относительно слабую зависимость большинства локальных модулей упругости $c_{mn}(s)$ в формуле (25) от амплитуды фононных смещений s . При этом значения $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в табл. 3, как отмечено выше, соответствуют, видимо, максимальным отличиям модулей упругости от их значений в γ -фазе. Естественно также ожидать, что зависимости $c_{mn}(s)$ при изменении s от нуля до единицы являются плавными и монотонными. Тогда можно предположить, что простые линейные интерполяции

$$c_{mn}(s) = c_{mn}^\gamma + s(c_{mn}^{\alpha\gamma} - c_{mn}^\gamma) \tag{48}$$

будут достаточно хорошо описывать эти зависимости, по крайней мере, для слабоменяющихся модулей упругости. Интерполяция (48) может быть также достаточной и для описания модулей $c_{11}(s)$ и $c_{33}(s)$, поскольку при их полном возрастании на 50 %, отмеченном выше, возможная нелинейность в зависимостях от s вряд ли существенна. Для резко убывающих модулей c_{31} и c_{55} точность простой интерполяции (48) может быть невысокой. Однако в физические характеристики упругих эффектов эти модули, как правило, входят в комбинации с другими модулями, для которых интерполяция (48) должна быть адекватной. Так, например значения модуля всестороннего сжатия

$$B = \frac{1}{9}[c_{11} + c_{22} + c_{33} + 2(c_{12} + c_{23} + c_{31})] \tag{49}$$

(который при поворотах системы координат не меняется) в α - и γ -фазах железа, согласно табл. 2, очень

близки, хотя четыре из шести слагаемых $c_{mn}^{\alpha\gamma}$ в сумме (49) для мартенсита, как отмечено выше, существенно отличаются от аналогичных слагаемых c_{mn}^{γ} в γ -фазе. Поэтому можно предположить, что использование простой интерполяции (48) может быть достаточным для описания большинства упругих эффектов, связанных с мартенситными включениями.

Аналогичная интерполяция может быть построена и для оценок функций $\sigma_{ij}(s)$ в формуле (25). Поскольку локальные деформации u_{ij} внутри включения, как отмечалось, малы, можно предположить, что и значения локальных напряжений σ_{ij} здесь можно оценивать с помощью линейной теории упругости, полагая

$$\sigma_{ij}^{\alpha\gamma} = \sum_{kl} c_{ikjl}^{\alpha\gamma} u_{kl}^{\gamma}, \quad (50)$$

где u_{kl}^{γ} — значения деформаций внутри включения, даваемые (в обозначениях Фогта) равенствами (32) и (33). Тогда при промежуточных значениях s между нулем и единицей значения $\sigma_{ij}(s)$ можно оценивать с помощью линейной интерполяции, аналогичной (48):

$$\sigma_{ij}(s) = s\sigma_{ij}^{\alpha\gamma}, \quad (51)$$

где $\sigma_{ij}^{\alpha\gamma} = \sigma_{ij}(s=1)$ определено равенством (50).

Формулы (48) и (51) дают интерполяционные оценки для «деформационного» вклада, т. е. для двух последних слагаемых в плотности свободной энергии (24). Возможность аналогичных оценок «фононного» вклада $f_0(s)$ в формуле (24) обсуждалась в работе [11]. Как описано в работе [11], в этом фононном вкладе необходимо учитывать существенно нелинейный, имеющий два минимума, характер функции $f_0(s)$, и если использовать для $f_0(s)$ простейшую возможную интерполяцию полиномом пятой степени с коэффициентами, оцениваемыми из экспериментальных данных о спектрах оптических фононов, то для рассмотренного в работе [11] случая перехода между ОЦК- и ГПУ-фазами в железе получается разумное согласие с имеющимся расчетом *ab initio* [6]. Аналогичную интерполяцию функции $f_0(s)$ можно строить и для перехода $\gamma \rightarrow \alpha$, обсуждаемого в настоящей работе.

Таким образом, в отсутствие оценок *ab initio* или расчетов функций $f_0(s)$, $\sigma_{ij}(s)$ и $c_{mn}(s)$ в плотности свободной энергии (24), эти функции можно приближенно описывать с помощью рассмотренных выше интерполяций. Однако точность таких интерполяций может быть оценена только с помощью последовательных расчетов *ab initio*.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение перечислим основные результаты данной работы. Развивается метод теоретического описания мартенситных фазовых переходов между ГЦК- и ОЦК-структурами с использованием обобщенных функционалов Гинзбурга–Ландау [9, 11]. В этом методе превращение $\gamma \rightarrow \alpha$ описывается с помощью нескольких слабонеоднородных параметров превращения: фононного параметра, описывающего относительные скольжения плотноупакованных плоскостей, и деформаций ГЦК-решетки в области мартенситного включения. Указано несколько реалистических путей фононного превращения γ -фазы в промежуточную структуру λ , близкую к ОЦК-структуре. Показано, что дальнейший переход $\lambda \rightarrow \alpha$, завершающий превращение $\gamma \rightarrow \alpha$, может осуществляться путем относительно малых деформаций решетки. Даны явные выражения для этих деформаций, как для перехода в мартенсит с ориентационными соотношениями Нишиямы, так и для перехода в мартенсит с ориентационными соотношениями Курдюмова–Закса. Предложены общие выражения для фононных и деформационных вкладов в ОФГЛ, которые могут использоваться при расчетах *ab initio* этих вкладов. Подробно обсуждаются также возможности феноменологических оценок ОФГЛ на основе интерполяций имеющихся экспериментальных данных о фононных спектрах, параметрах решеток и модулях упругости в γ - и α -фазах. Полученные результаты могут использоваться для построения как *ab initio*, так и феноменологических выражений для ОФГЛ, пригодных для изучения структуры и эволюции мартенситных включений в γ -фазе, в частности, процессов зарождения и роста таких включений.

Авторы глубоко благодарны Ю. Н. Горностыреву и П. А. Коржавому за многочисленные полезные обсуждения, а также ИТЦ «Аусферр», Магнитогорск, за инициирование и поддержку этой работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-02-00563); в рамках программы поддержки ведущих научных школ РФ (гранты НШ-3004.2008.2, НШ-7235.2010.2) и программы развития научного потенциала высшей школы РФ (грант № 2.1.1/4540).

ЛИТЕРАТУРА

1. М. Е. Блантер, *Фазовые превращения при термической обработке стали*, ГНТИ Чер. Цвет. Мет., Москва (1962), гл. 4.

2. Г. В. Курдюмов, Л. М. Утевский, Р. И. Энтин, *Преобразования в железе и стали*, Наука, Москва (1977), Гл. 3.
3. P.-A. Lindgard and O. G. Mouritsen, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2458 (1986).
4. G. L. Krasko and G. B. Olson, *Phys. Rev. B* **40**, 11536 (1989).
5. B. N. Harmon, in: *Statics and Dynamics of Alloy Phase Transformations*, Vol. 319 of NATO ASI Series B: Physics, ed. by A. Gonis and P. E. A. Turchi, Plenum, New York (1994), p. 421.
6. M. Ekman, B. Sadigh, K. Einarsson, and P. Blaha, *Phys. Rev. B* **58**, 5296 (1998).
7. T. Suzuki, M. Shimono, and S. Kajiwara, *Mater. Sci. Eng. A* **312**, 104 (2001).
8. V. I. Levitas and D. L. Preston, *Phys. Rev. B* **66**, 134206 (2002).
9. M.-X. Zhang and P. M. Kelly, *Progr. Mater. Sci.* **54**, 1101 (2009).
10. S. V. Okatov, A. R. Kuznetsov, Yu. N. Gornostyrev, V. N. Urtsev, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **79**, 094111 (2009).
11. В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов, *ЖЭТФ* **136**, 722 (2009).
12. I. R. Pankratov and V. G. Vaks, *Phys. Rev. B* **68**, 134208 (2003).
13. В. Г. Вакс, А. Ю. Строев, *ЖЭТФ* **134**, 113 (2008).
14. В. Г. Вакс, К. Ю. Хромов, *ЖЭТФ* **133**, 571 (2008).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965), § 10.
16. S. K. Satija, R. P. Comes, and G. Shirane, *Phys. Rev. B* **32**, 3309 (1985).
17. J. Zaretsky and C. Stassis, *Phys. Rev. B* **35**, 4500 (1987).