

**РЕЛАКСАЦИЯ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ  
В ГЕТЕРОФАЗНЫХ СИСТЕМАХ  
И ЗАРОЖДЕНИЕ ФАЗ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

*А. Л. Ройтбурд*

В процессе фазовых превращений реальных твердых тел, как правило, возникают гетерофазные состояния, характеризующиеся наличием внутренних напряжений. Источником напряжений служит несовместность собственных деформаций сопрягающихся фаз на межфазных границах. Если превращение происходит с сохранением микроскопической сплошности кристаллической решетки<sup>1)</sup> во всех точках, включая межфазные поверхности, то образуется система фаз, которые обычно называют

<sup>1)</sup> Т. е. любой замкнутый контур, проведенный через узлы решетки до превращения, остается замкнутым после превращения (условие совместности полных деформаций решетки).

когерентными. Уровень внутренних напряжений в системе когерентных фаз максимален. Эти напряжения уменьшаются при нарушении сплошности фаз на межфазных границах и исчезновении когерентности<sup>1)</sup>. Относительная стабильность когерентного и некогерентного (т. е. отвечающего нарушению сплошности по всей межфазной поверхности) состояний определяется удельной площадью межфазной поверхности.

В настоящей статье мы хотим обратить внимание на некоторые ранее незамеченные термодинамические аспекты – проблемы нарушения когерентности.

1. В кристаллическом теле некогерентное состояние, по-видимому, лишь в исключительных случаях является стабильным. Действительно, релаксация внутренних напряжений может быть достигнута не только в результате исключения источников напряжений путем разрушения контакта фаз, но и за счет компенсации этих напряжений полями соответствующего распределения дефектов. В частности, полная релаксация напряжений достигается за счет образования на межфазной поверхности сетки дислокации с линейной плотностью  $\rho \sim \epsilon_0 / b$ , где  $\epsilon_0$  – скачок собственных деформаций на границе фаз;  $b$  – вектор Бюргерса дислокаций<sup>2)</sup>.

Микроискажения в ядрах дислокаций, будучи некогерентны с остальным полем напряжений, вносят аддитивный вклад в энергию системы, пропорциональный  $\sim a G b^2$  ( $G$  – модуль сдвига,  $a$  – множитель порядка единицы). Таким образом происходит, "перекачка" упругой энергии внутренних напряжений в энергию микроискажений, составляющую вместе с поверхностной энергией когерентных фаз  $\sigma_0$  эффективную поверхностную межфазную энергию  $\sigma_0 + a G b^2 \rho = \sigma_0 + a G b \epsilon_0$ . Сопоставление этой величины с поверхностной энергией некогерентных фаз ( $\sigma_n \sim G b$ ) показывает, что в типичных случаях, когда  $\epsilon_0 < 10^{-1} - 10^{-2}$  и  $\sigma_0 \ll \sigma_n$ , релаксированное состояние, при котором когерентность фаз сохраняется на значительной части межфазной границы, является более устойчивым, чем некогерентное. По-видимому, к частичному установлению когерентности должны стремиться композитные гетерофазные системы и поликристаллические агрегаты: в равновесном состоянии происходит частичная трансформация собственно поверхностной энергии фаз в энергию микро- и макроискажений.

2. Если релаксация внутренних напряжений происходит в результате образования дислокаций, свободная энергия гетерофазной системы

<sup>1)</sup> Нарушение когерентности можно рассматривать как результат проведения внутренних разрезов по межфазным границам при свободном относительном смещении берегов разрезов. Если образующаяся фаза имеет меньший удельный объем, чем исходная, то нарушение когерентности приводит к образованию межфазной "щели" и разъединению фаз, напряжения исчезают.

<sup>2)</sup> Локальное значение  $\rho$  находится из уравнения  $\vec{\epsilon}_0 \cdot \vec{n} = \rho b \vec{\tau}$ , где  $\vec{n}$  – нормаль к межфазной границе,  $\vec{\tau}$  – направление дислокационной линии.

является функционалом распределения дислокаций. Решение вариационной задачи о минимуме свободной энергии при заданных конфигурациях межфазных границ и типе дислокаций должно дать равновесную поверхностную плотность дислокаций. Для примера рассмотрим простейшую гетерофазную систему: сферическое включение радиуса  $r$  в неограниченной матрице, упругие и поверхностные свойства фаз изотропны, собственная деформация фазы включения – дилатация  $\epsilon_o^* = \epsilon_o \hat{I}$ . Релаксация напряжений, осуществляемая дислокациями с вектором Бюргера  $b$ , лежащим в межфазной поверхности; распределение дислокации описывается одним параметром  $\rho$ . Свободная энергия такой системы, отсчитываемая от состояния однородной матричной фазы, равна

$$F = [ - \Delta\mu + \beta G(\epsilon_o - b\rho)^2 ] \frac{4}{3} \pi r^3 + (\sigma_o + aGb^2\rho) 4\pi r^2, \quad (1)$$

где  $\Delta\mu$  – разность удельных свободных энергий неискаженных фаз,  $\beta$  – множитель порядка единицы ( $\beta = 4$ , если упругие свойства фаз равны). Минимум  $F(\rho)$  достигается при равновесной плотности дислокаций

$$\rho_o = \frac{\epsilon_o}{b} \left( 1 - \frac{r_K}{r} \right), \quad r_K = \frac{3}{2} \frac{a}{\beta} \frac{b}{\epsilon_o} \sim \frac{b}{\epsilon_o}. \quad (2)$$

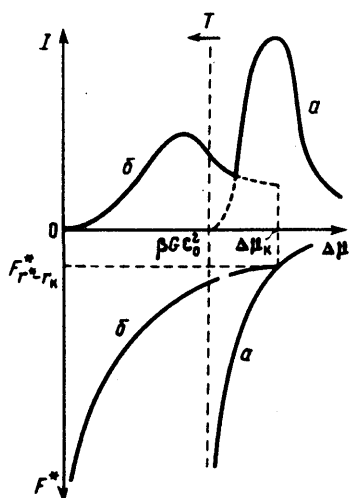
Когерентное состояние, отвечающее полному сохранению внутренних напряжений, устойчиво при  $r < r_K$ . С увеличением  $r$  растет равновесная плотность дислокаций, а также степень релаксации напряжений, асимптотически стремясь к полному снятию напряжений.

3. Изложенные соображения о равновесной степени релаксации внутренних напряжений в гетерофазной системе оказываются существенными при рассмотрении зарождения новых фаз в твердых телах. В рассматриваемой модели зарождению новой фазы отвечает прохождение системой седловой точки  $r^*, \rho^*$  на поверхности  $F(r, \rho)$  (в (1)  $\Delta\mu > 0$  и растет по мере отклонения от точки термодинамического равновесия фаз,  $r^*$  связано с  $\rho^*$  соотношением (2)). При  $r^* = r_K$  седловая точка вырождается в максимум, а энергетический барьер  $F(r^*, \rho^*)$  для зарождения релаксированной фазы переходит в барьер.  $F(r^*) = (16\pi/3) \sigma_o^3 / (\Delta\mu - \beta G\epsilon_o^2)^2$  для когерентного зарождения (рис. а)

При  $\Delta\mu < \beta G\epsilon_o^2$  образование когерентной фазы термодинамически невыгодно и возможно зарождение только релаксированной фазы; при  $\Delta\mu > \Delta\mu_K (r^* (\Delta\mu_K) \equiv r_K)$  зарождение происходит когерентно. В промежуточной области  $\beta G\epsilon_o^2 < \Delta\mu < \Delta\mu_K$  зарождение происходит по тому типу, который обеспечивает большую скорость превращения. Таким образом, на кривой зависимости скорости зарождения от  $\Delta\mu$  должны существовать две ветви, отвечающие образованию релаксированной (частично когерентной) или нерелаксированной (когерентной) фазы<sup>1)</sup>. Так как скорость зарождения пропорциональна  $\exp(-F^*/kT)$ , то при

<sup>1)</sup> Если релаксация происходит с участием более, чем одного типа дислокаций, их последовательное включение в процесс может проявиться в возникновении новых кинетических ветвей превращения.

образовании низкотемпературной фазы из высокотемпературной скорость зарождения может быть немонотонна (рис. б).



Барьер для зарождения и скорость зарождения частичнокогерентной (а) и когерентной (б) фаз

Абсолютные значения скоростей зарождения когерентной и частично когерентной фаз могут значительно отличаться. Например, при малых  $\Delta\mu$ , когда  $r^* \gg r_K$  и  $\rho^* \approx \epsilon_0/b$ ,  $F^* = (16\pi/3)(\sigma_0 + aGb\epsilon_0)^3/\Delta\mu^2$  и, если  $\sigma_0 < aGb\epsilon_0$ , скорость зарождения релаксированной фазы на несколько порядков ниже, чем скорость когерентного зарождения при равных значениях движущей силы. К отмеченному различию в величине барьеров для зарождения следует добавить различие в подвижности межфазных границ [1], что делает скорость превращения с образованием когерентной фазы существенно большей, чем для превращения с образованием релаксированной фазы. Образование когерентной или частично когерентной фазы, по-видимому, отвечает двум известным кинетическим типам превращений в однокомпонентной системе: нормальному и мартенситному [2].

Институт металловедения  
и физики металлов ЦНИИЧМ  
им. И.П.Бардина

Поступила в редакцию  
15 февраля 1972 г.

### Литература

- [1] А.Л.Ройтбурд. Письма в ЖЭТФ, 13, 95, 1971.  
[2] Г.В.Курдюмов. Проблемы металловедения и физики металлов, М., 3, 9, 1952.