

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.91

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.009

**ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МАРТЕНСИТА В ВИДЕ СТОПЫ  
КРИСТАЛЛОВ ОДИНАКОВОЙ ОРИЕНТИРОВКИ****Надежда Михайловна Кашенко<sup>1</sup>, Елена Александровна Корзникова<sup>2</sup>,  
Михаил Петрович Кашенко<sup>3†</sup>, Вера Геннадиевна Чашина<sup>4</sup>**<sup>1, 3, 4</sup> Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 2, 620002, Екатеринбург, Россия<sup>2</sup> Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия<sup>2</sup> Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Россия<sup>3, 4</sup> Уральский государственный лесотехнический университет, ул. Сибирский тракт, 37, 620100, Екатеринбург, Россия<sup>1</sup> nad.kashenko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2362-5567><sup>2</sup> elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849><sup>3</sup> mpk46@mail.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-2611-2858><sup>4</sup> vera.chashina.77@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7480-2562>

**Аннотация.** Динамическая теория спонтанного (при охлаждении)  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения используется для описания формирования стопы кристаллов пакетного мартенсита. Рост мартенситного кристалла начинается с образования начального возбужденного состояния (НВС) в упругом поле дислокационного центра зарождения (ДЦЗ). НВС порождает управляющий волновой процесс (УВП), несущий пороговую деформацию. В состав УВП входят относительно длинноволновые  $\ell$ - и относительно коротковолновые  $s$ -волны, действующие согласованно и стимулирующие трехмерную деформацию бейновского типа. Пара  $\ell$ -волн задает ориентацию габитусной плоскости (ГП). Пакетный мартенсит состоит из кристаллов реечной формы с ГП из семейства близкого к  $\{557\}$ . Рассматриваются упругие поля ДЦЗ в форме прямоугольных петель. Показано, что к снятию вырождения при записи габитуса ведет использование стандартных векторов Бюргера  $\mathbf{b}$  смешанной ориентации относительно сегментов  $\langle 110 \rangle$  ДЦЗ. Приведен анализ упругого поля ДЦЗ\*-дислокационной петли, обрамляющей ГП возникшего кристалла мартенсита реечного типа; в качестве направления эффективного вектора Бюргера  $\mathbf{b}^*$  используется направление макросдвига. Показано, что ДЦЗ\* создает условия для воспроизводства кристаллов с одинаковыми ориентировками по эстафетному сценарию в форме стопы определенной пространственной конфигурации. Проведено обсуждение результатов, сделан вывод о возможной инициации образования не только кристаллов с ГП типа  $\{557\}$ , но и  $\{112\}$ , которые типичны для поверхностного мартенсита.

**Ключевые слова:** динамическая теория, мартенситное превращение, мартенсит охлаждения, дислокационные центры зарождения, начальное возбужденное состояние, управляющий волновой процесс, габитусная плоскость, бейновская деформация, пакетный мартенсит, стопа кристаллов, поверхностный мартенсит.

**Благодарности:** Авторы признательны Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за поддержку при выполнении государственного задания Уфимского университета науки и технологий (№075-03-2024-123/1) молодежной исследовательской лаборатории «Металлы и сплавы в условиях экстремальных воздействий».

**Для цитирования:** Кашенко Н.М., Корзникова Е.А., Кашенко М.П., Чашина В.Г. Динамическая теория формирования мартенсита в виде стопы кристаллов одинаковой ориентировки // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 4. С. 488–496. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.009.

Original article

**DYNAMIC THEORY OF MARTENSITE FORMATION IN THE FORM OF A STACK OF CRYSTALS OF THE SAME ORIENTATION****Nadezhda M. Kashchenko<sup>1</sup>, Elena A. Korznikova<sup>2</sup>, Mikhail P. Kashchenko<sup>3†</sup>, Vera G. Chashchina<sup>4</sup>**<sup>1,3,4</sup> Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, 19 Mira St., Yekaterinburg, 620002, Russia<sup>2</sup> Ufa University of Science and Technology, Zaki Validi St., 32, Ufa, 450076, Russia<sup>2</sup> Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University named after M. K. Ammosov, Tihonov Str., 5/1, Mirny, 678170, Russia<sup>3,4</sup> Ural State Forest Engineering University, 37 Sybirskiy Tract St., Yekaterinburg, 620100, Russia<sup>1</sup> nad.kashchenko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2362-5567><sup>2</sup> elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849><sup>3</sup> mpk46@mail.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-2611-2858><sup>4</sup> vera.chashina.77@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7480-2562>

**Abstract.** The dynamic theory of spontaneous (on cooling)  $\gamma$ - $\alpha$  martensitic transformation is used to describe the formation of a stack of packet martensite crystals. The growth of a martensite crystal begins with the formation of an initial excited state (IES) in the elastic field of a dislocation nucleation center (DNC). The IES generates a control wave process (CWP) that carries a threshold deformation. The composition of the CWP includes relatively long-wave  $\ell$ - and relatively short-wave s-waves acting in a coordinated manner and stimulating three-dimensional deformation of the Bain type. A pair of  $\ell$ -waves specifies the orientation of the habit plane (HP). The packet martensite consists of lath-shaped crystals with HPs from the family close to  $\{557\}$ . Elastic fields of the DNC in the form of rectangular loops are considered. It is shown that the use of standard Burgers vectors  $\mathbf{b}$  of mixed orientation relative to the  $\langle 110 \rangle$  segments of the DNC leads to the removal of degeneracy in recording the habit. The elastic fields of the DNC\*, a dislocation loop framing the HP of the formed crystal of lath-shaped martensite, are analyzed; the direction of the effective Burgers vector  $\mathbf{b}^*$  is used as the direction of the macroshear. It is shown that the DNC\* creates conditions for the reproduction of crystals with the same orientations according to the relay scenario in the form of a stack of a certain spatial configuration. The results are discussed, and a conclusion is made about the possible initiation of the formation of not only crystals with HPs of the  $\{557\}$  type, but also  $\{112\}$ , which are typical of surface martensite.

**Keywords:** dynamic theory, martensitic transformation, cooling martensite, dislocation nucleation centers, initial excited state, control wave process, habit plane, Bain deformation, packet martensite, stack of crystals, surface martensite.

**Acknowledgements:** For EAK the work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the state assignment to the Ufa University of Science and Technology (No. 075-03-2024-123/1) for the Youth Research Laboratory «Metals and Alloys Under Extreme Conditions».

**For citation:** Kashchenko, N. M., Korznikova, E. A., Kashchenko, M. P. & Chashchina, V. G. (2024). Dynamic theory of martensite formation in the form of a stack of crystals of the same orientation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(4), 488–496. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.009.

**Введение**

Классический вариант реализации мартенситного превращения (МП) относится к  $\gamma$ - $\alpha$  перестройке в сплавах на основе железа [1]. МП протекает кооперативно (бездиффузионно) в процессе охлаждения. Кооперативность МП отражается в наличии однозначно связанных между собой морфологических признаков, являющихся своеобразной «визитной карточкой» МП. Для отдельного кристалла – это характерная ориентация габитусной плоскости (ГП), межфазные ориентационные соотношения (ОС) и макросдвиг. Характерным кинетическим при-

знаком является высокая скорость роста кристаллов, что позволяет связать формирование кристалла с управляющим волновым процессом (УВП) и построить динамическую теорию МП (см., например, [2-6]). При этом вместо квазиравновесного зародыша, как некоторой обособленной дефектами области исходной фазы (аустенита), вводится понятие начального возбужденного состояния (НВС). НВС – это область в упругих полях дислокационных центров зарождения (ДЦЗ), в которой аустенит, переохлажденный ниже температуры фазового равновесия  $T_0$ , теряет устойчивость. Атомы в области НВС скачкообразно смещаются, а вы-

деление энергии в виде колебаний атомов порождает УВП. НВС имеет форму прямоугольного параллелепипеда, построенного на собственных векторах тензора деформации упругого поля ДЦЗ. Поперечный размер НВС

$$d \sim 0,1R, \quad (1)$$

где  $R$  – расстояние от ближайшего прямолинейного сегмента ДЦЗ. В состав УВП входит пара относительно длинноволновых смещений ( $\ell$ -волны), отвечающих за формирование габитусов кристаллов, а также пара относительно коротковолновых смещений ( $s$ -волны), отвечающих за формирование тонкой структуры двойников превращения и действующих согласованно с  $\ell$ -волнами. УВП переносит пороговую деформацию, достаточную для преодоления межфазного барьера в аустените, сохраняющем метастабильную устойчивость при температуре  $M_s$  начала МП.

В динамической теории ГП «заметается» линией пересечения фронтов  $\ell$ -волн уже на стадии пороговой деформации. Особо просто и наглядно нормали  $\mathbf{N}$  к габитусным плоскостям находятся в приближении продольных волн, когда скорости  $v_{1,2}$  (и соответствующие волновые векторы)  $\ell$ -волн коллинеарны собственным векторам  $\xi_1$  и  $\xi_2$  тензора деформации упругого поля ДЦЗ:

$$\mathbf{N} \parallel \mathbf{n}_2 \pm \alpha \mathbf{n}_1, \quad |\mathbf{n}_{1,2}|=1, \quad \alpha = v_2/v_1, \quad (2)$$

$$\mathbf{n}_1 = \xi_1, \quad \mathbf{n}_2 = \xi_2, \quad (3)$$

где  $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$  – единичные волновые нормали пары  $\ell$ -волн. Рассмотрение более общего случая квазипродольных волн также не вызывает затруднений. Понимание основных особенностей образования отдельного кристалла позволяет ставить вопрос о формировании ансамблей кристаллов мартенсита.

Во-первых, вполне ожидаемо возникновение ансамблей кристаллов при наличии ансамблей дефектов. Простейший пример – тройные узлы и, соответственно, триады кристаллов [7]. Достаточно типично образование кристаллов вблизи границ зерен, субзерен и двойников отжига, что вполне естественно, учитывая дислокационное строение подобных границ. Отметим наблюдавшийся синхронный запуск и распространение пачки параллельных кристаллов при действии импульсного магнитного поля [8], получающего естественную интерпретацию в рамках динамической теории [9].

Во-вторых, очевидно, что сам возникший кристалл представляет собой дефект и, в принципе, способен инициировать образование новых кристаллов. Конкретизация этого утвер-

ждения может идти, как минимум, по двум направлениям. С одной стороны, сопоставлением упругому полю возникшего кристалла упругого поля некоторого ДЦЗ1\*, способного инициировать новые НВС1\*, а значит, и рождение новых кристаллов. С другой стороны, возникший кристалл может инициировать образование в аустените новых ДЦЗ2\* и соответственно НВС2\*. При этом ясно, что инициация имевшихся источников дислокаций будет порождать ДЦЗ2\* с традиционными для аустенита ориентациями векторов Бюргерса. Однако, из-за того, что рождение кристалла мартенсита сопровождается макросдвигом, возможно формирование ДЦЗ2\* с нетипичными векторами Бюргерса, возникающими при взаимодействии макросдвига с дислокациями, имеющими традиционные наборы векторов Бюргерса в исходном аустените. Анализ наблюдаемых распределений ориентаций габитусов и направлений макросдвига мартенсита деформации в присутствии мартенсита напряжений [10, 11] хорошо согласуется с последним сценарием.

В [12, 13] показано, что подрастание граней первоначально возникшего кристалла, включая боковой рост, может инициироваться ДЦЗ1\*, представляющими собой дислокационные петли, обрамляющие грани кристалла с эффективными векторами Бюргерса  $\mathbf{b}^*$ , коллинеарными направлению макросдвига  $\mathbf{S}$ .

Цель данной работы – обсудить, на основе представлений [12, 13], формирование кристаллов одной ориентировки на примере кристаллов пакетного мартенсита с габитусами, близкими к семейству {557} (здесь и далее используется кристаллографический базис аустенита).

### Краткая информация о пакетном мартенсита

Термин «пакетный мартенсит», насколько известно авторам, введен и использован в [14, 15] применительно к кристаллам шести ориентировок, габитусы которых составляют наименьшие углы с одной из четырех плотноупакованных плоскостей семейства {111}. Именно эта плоскость входит в межфазное ориентационное соотношение. Соответственно, полному набору из 24 ориентировок сопоставляется 4 пакета. Библиография, позволяющая более подробно судить о строении пакетного мартенсита, имеется в [3, 16]. Однозначная связь между морфологическими признаками указывает на то, что записи габитуса с парой равных индексов соответствует пара габитусов с близкими по величине (но не равными) индексами,

причем оба заметно отличаются от третьего индекса. Поэтому в дальнейшем используется обозначение 5\* для большего по величине из пары близких индексов, так что упрощенной записи (557) в действительности соответствует

$$(557) \rightarrow (5^*57), (55^*7). \quad (4)$$

Форма кристаллов близка к реечной. Ясно, что полное число ориентировок пакета может быть представлено лишь при наличии достаточного объема аустенита. Поэтому в локальных областях фиксируется и меньшее, чем 6, число ориентировок. В предельном случае – одна ориентировка. В [7] набор кристаллов одной ориентировки, расположенных друг над другом, для краткости назван стопой. Формирование такой стопы в [7] интерпретировалось как следствие подрастания края экстраплоскости с линией, коллинеарной линии дислокации [1-10], выполняющей функции ДЦЗ (см. рис.1).

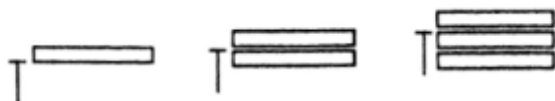


Рис.1. Формирование стопы кристаллов пакетного мартенсита

Fig.1. Formation of a stack of crystals of packet martensite

Следует отметить, что выполненный в [7] анализ относился к упругому полю ДЦЗ в виде прямолинейной дислокации. Ясно, что такой подход вполне оправдан, если прямолинейный сегмент  $\Lambda_1 \parallel [1-10]$  дислокационной линии ограничен дефектами (например, границами зерен), либо существенно удален от остальных сегментов. Было показано, что сегменты  $\Lambda_1 \parallel \langle 1-10 \rangle$  при векторах Бюргерса  $\mathbf{b} \parallel \langle 01-1 \rangle$  смешанных (60-градусных) ориентаций по отношению к  $\Lambda_1$  приводят, при учете (2) и (3), к ясной трактовке снятия вырождения (4) при описании габитуса. Найдем, к какой конфигурации стопы кристаллов приводит упругое поле ДЦЗ1\* при эстафетном механизме возникновения кристаллов.

### Выбор ДЦЗ1\* и анализ его упругого поля

Чтобы найти ориентацию  $\mathbf{b}^*$ , рассмотрим вначале пример ДЦЗ в виде прямоугольной скользящей петли с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} \parallel [01-1]$ , сегментами  $\Lambda_1 \parallel [1-10]$  и  $\Lambda_2 \parallel [11-2]$ , имеющие длины (в единицах параметра решетки  $a$ )  $L_1=7000$  и  $L_2=10000$ . Заметим, мы выбрали исходную петлю с размером  $L_2 > L_1$ , чтобы, в соответствие с предыдущими расчетами, при

образовании НВС основную роль играл один из сегментов  $\Lambda_1$ . При расчете использовалась цилиндрическая система координат (см. рис.2).

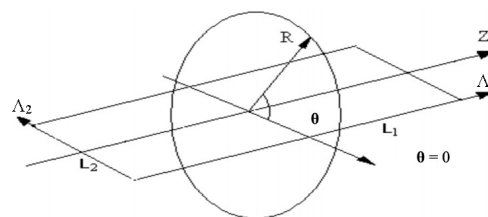


Рис.2. Параметры цилиндрической системы координат с привязкой к дислокационной петле:  $\Lambda_1, \Lambda_2$  – направления сегментов петли, ось Z коллинеарна сегменту  $\Lambda_1$ , угол  $\theta$  отсчитывается от плоскости петли

Fig.2. Parameters of the cylindrical coordinate system with reference to the dislocation loop:  $\Lambda_1, \Lambda_2$  – directions of the loop segments, the Z axis is collinear to the segment  $\Lambda_1$ , the angle  $\theta$  is measured from the plane of the loop

В качестве модельного использовался набор упругих модулей (в единицах ТПа) из [17] для Fe–30%Ni при 673 К:

$$C_L=0,2508, C_{44}=0,1034, C'=0,0271. \quad (5)$$

На рисунке 3 представлены в удобном для восприятия масштабе результаты расчета упругого поля данного ДЦЗ.

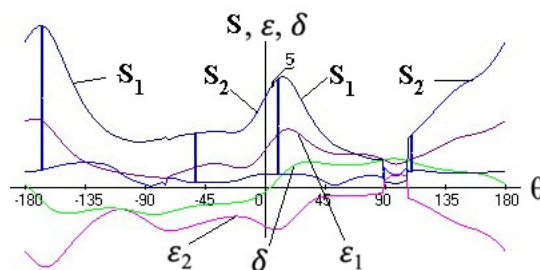


Рис.3. Зависимость от угла  $\theta$  величины сдвига S, деформаций  $\epsilon_{1,2}$  и относительного изменения объема  $\delta$ , при  $Z=0, R=1200$  (начало отсчета – центр сегмента  $\Lambda_1$ , вертикальные линии разделяют области доминирования сдвигов  $S_1$  либо  $S_2$ , параметры ДЦЗ указаны в тексте)

Fig.3. Dependence of the magnitude of the shift S, strains  $\epsilon_{1,2}$  and the relative change in volume  $\delta$  on the angle  $\theta$ , at  $Z=0, R=1200$  (the reference point is the center of the segment  $\Lambda_1$ , the vertical lines separate the areas of dominance of the shifts  $S_1$  or  $S_2$ , the parameters of the DNC are indicated in the text)

МП ( $\gamma$ - $\alpha$ ) протекает с увеличением  $\delta$ , этому условию соответствует отбор габитуса, близкого к (5\*57) в интервале углов  $5,1^\circ \leq \theta \leq 5,5^\circ$  в

окрестности максимума сдвига  $S_2$ . В таблице 1 приведен ряд данных для  $\theta=5,3^\circ$ .

**Таблица 1.** Ориентации  $N_2, \xi_i, S_2$  для  $\theta = 5,3^\circ$

**Table 1.** Orientations of  $N_2, \xi_i, S_2$  for  $\theta = 5.3^\circ$

$N_2$	[0,50998 0,49498 0,70350]
$\xi_1$	[-0,14333 0,02511 -0,98935]
$\xi_2$	[0,61416 0,78616 -0,06902]
$\xi_3$	[0,77606 -0,61752 -0,12811]
$S_2$	[0,35269 0,53337 -0,76885]

Заметим, что  $S_2$  не лежит в плоскости габитуса и отклоняется от направления [11-2] на  $\approx 8,3^\circ$ .

Полагаем далее для простоты, что плоскость петли ДЦЗ1\* в форме прямоугольника параллельна (557), пренебрегая различием пары близких индексов. Сегмент  $\Lambda_1^* \parallel \xi_3$ , а

$$\Lambda_2^* \parallel [N, \Lambda_1^*], \quad (6)$$

$[N, \Lambda_1^*]$  – векторное произведение  $N \parallel [557]$  и  $\Lambda_1^*$ . Тогда из (6) получаем

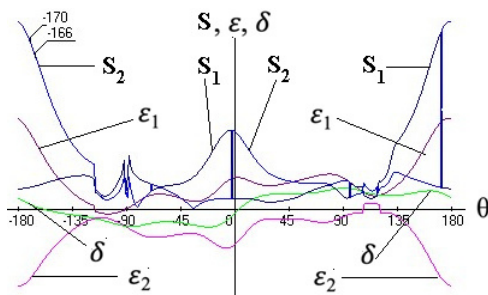
$$\Lambda_2^* \parallel [3,682097 \ 6,07297 \ -6,96790].$$

Для  $b^*$  имеем:

$$b^* \parallel S_2 \parallel [0,35269 \ 0,53337 \ -0,76885]. \quad (7)$$

Поскольку кристаллы пакетного мартенсита имеют вид реек, длины  $L_2^*$  сегментов  $\Lambda_2^*$  в ДЦЗ1\* выберем меньше, чем  $L_1^*$ :  $L_1^*=7000$ ,  $L_2^*=3000$ .

На рисунке 4 представлены в удобном для восприятия масштабе результаты расчета упругого поля данного ДЦЗ\*.



**Рис.4.** Зависимость от угла  $\theta$  величины сдвига  $S$ , деформаций  $\varepsilon_{1,2}$  и относительного изменения объема  $\delta$ , при  $Z = 0, R = 1200$  (начало отсчета – центр сегмента  $\Lambda_1$ , вертикальные линии разделяют области доминирования сдвигов  $S_1$  либо  $S_2$ , параметры ДЦЗ\* указаны в тексте)

**Fig.4.** Dependence of the magnitude of the shift  $S$ , strains  $\varepsilon_{1,2}$  and the relative change in volume  $\delta$  on the angle  $\theta$ , at  $Z = 0, R = 1200$  (the reference point is the center of the segment  $\Lambda_1$ , the vertical lines separate the areas of dominance of the shifts  $S_1$  or  $S_2$ , the parameters of the DNC\* are indicated in the text)

Анализ упругого поля позволяет отдать предпочтение данным в интервале  $-170^\circ \leq \theta \leq -166^\circ$  (для  $\theta = -168^\circ$  см. Табл.2).

**Таблица 2.** Ориентации  $N_2^*, \xi_i^*, S_2^*$  для  $\theta = -168^\circ$

**Table 2.** Orientations of  $N_2^*, \xi_i^*, S_2^*$  for  $\theta = -168^\circ$

$N_2^*$	[0,49185 0,50774 0,70730]
$\xi_1^*$	[-0,10817 0,013665 -0,99404]
$\xi_2^*$	[0,63345 0,76969 -0,07951]
$\xi_3^*$	[0,76619 -0,63827 -0,07402]
$S_2^*$	[0,35878 0,52672 -0,77061]

Сравнение данных таблиц показывает их близость. Например, угол  $\phi$  между  $\xi_3^*$  и  $\xi_3 \approx 3,41^\circ$ . Причем угол между  $\xi_3^*$  и [1-10] ( $\approx 6,73^\circ$ ) меньше угла между  $\xi_3$  и [1-10] ( $\approx 9,80^\circ$ ). Угол между  $S_2^*$  и  $S_2 \approx 0,53^\circ$ , а между  $S_2^*$  и [11-2]  $\approx 5,853^\circ$ .

Напомним, что при обходе дислокационной петли вектор Бюргера не изменяется, однако направление второго сегмента  $\Lambda_1$ , как и  $\Lambda_1^*$ , изменится на  $-\Lambda_1$ . В результате зависимости на рисунке 3 и рисунке 4 примут «зеркальный» вид, и, соответственно, изменится знак  $\theta$  для отбираемых ориентаций (например,  $\theta = 168^\circ$  вместо  $-168^\circ$ ). Таким образом, ДЦЗ1\* осуществляет отбор направлений  $\theta$  в окрестностях углов  $\approx \pm(168^\circ)$ . Последующие аналогичные действия подтверждают сохранение указанного отбора. Поэтому имеются условия для реализации эстафетного формирования стопы кристаллов с габитусами одной и той же ориентировки из семейства {55\*7}. Однако, в условиях отбора отсутствуют углы  $\theta$  из окрестностей углов вблизи  $\pm 90^\circ$ , поэтому возникающая стопа не будет подобна варианту на рисунке 2.

На рисунке 5 представлена эстафетная схема формирования стопы, для случая, когда ширина рейки в направлении  $\Lambda_2^*$  примерно в 3 раза больше ее толщины. Наибольший размер рейки соответствует величине сегмента  $\Lambda_1^*$ . Согласование с условием (1) оказывается возможным при учете пространственного масштабирования поперечного размера НВС и НВС\* [18, 19]. На рисунке 5 это масштабирование отражено парами квадратиков, причем толщину кристалла задает диагональ квадратика большего размера, а величину  $R$  – расстояние от ребра кристалла (сегмента  $\Lambda_1^*$ ) до центра меньшего квадратика, размер которого задает поперечный размер НВС до пространственного масштабирования.

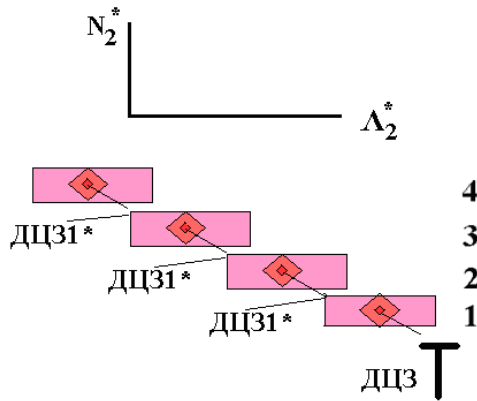


Рис.5. Схема эстафетного образования стопы реечных кристаллов одинаковой ориентировки при малых аустенитных прослойках между кристаллами

Fig.5. Scheme of relay formation of a stack of lath crystals of the same orientation with small austenite layers between the crystals

**Обсуждение результатов**

После введение понятия вырожденной двойниковой структуры [20], стало ясно, что реечные кристаллы с габитусами {5\*57} описываются аналогично полностью двойникованным кристаллам, только вместо более тонких двойниковых компонент возникают дислокационные петли [21]. Таким образом, возникающие дислокации совершенно естественно именовать дислокациями превращения. Следовательно, УВП инициирует трехмерную деформацию Бейна и при формировании реечных кристаллов. Поэтому удобное правило, позволяющее судить о главных осях деформации по записи габитуса [3], распространяется и на реечный мартенсит. А именно: позиции наибольшего индекса соответствует позиция единицы при записи направления <001> общей оси растяжения для основной и двойниковой компонент, а главной оси сжатия соответствует позиция среднего по величине индекса. Например, кристаллу с габитусом (5\*57) соответствует ось растяжения [001] и главная ось сжатия [100].

Хотя формально при векторах Бюргерса, имеющих краевую ориентацию по отношению к  $\Lambda_1 \parallel [1-10]$  (например,  $\mathbf{b}_1 \parallel [110]$  или  $\mathbf{b}_2 \parallel [11-2]$ ), пары индексов габитуса, векторов  $\xi_i$  и  $\mathbf{S}$  будут иметь совпадающие (либо отличающиеся знаком) значения, в реальных условиях формирование НВС (а затем и НВС\*) происходит с отклонениями от идеальных ориентаций  $\mathbf{b}$  и  $\Lambda_1$ . Эти отклонения приведут к снятию вырождения по морфологическим признакам, что и наблюдается. Однако, отличия в парах индексов могут оказаться меньше, чем

при рассмотрении векторов Бюргерса смешанной ориентации. Приведем данные расчета для той же, что и ранее, петли ДЦЗ, но при использовании вместо  $\mathbf{b} \parallel [01-1]$  вектора  $\mathbf{b}_2 \parallel [11-2]$ . При этом наилучший отбор соответствует  $\theta=173^\circ$ .

Таблица 3. Ориентации  $N_2, \xi_i, S_2$  для  $\theta=173^\circ$

Table 3. Orientations of  $N_2, \xi_i, S_2$  for  $\theta=173^\circ$

$N_2$	[0,50318	0,50318	0,70257]
$\xi_1$	[-0,06478	-0,06478	-0,99579]
$\xi_2$	[0,70413	0,70413	-0,09161]
$\xi_3$	[0,70711	-0,70711	0,00000]
$S_2$	[0,43667	0,43667	-0,78654]

Из данных таблицы 3 ясно, что  $\xi_3 \parallel \Lambda_1 \parallel [1-10]$ , угол между  $N_2$  и  $[557] \approx 0,23^\circ$ , угол между  $S_2$  и  $[11-2] \approx 2,87^\circ$ . Тогда ДЦЗ1\* будет иметь  $\mathbf{b}^* \parallel S_2$  и сегменты  $\Lambda_1^* \parallel [1-10]$ ,  $\Lambda_2^* \parallel [77-10]$ . График угловой зависимости упругих характеристик такой дислокационной петли в целом близок к рисунку 4.

Дополнительно отметим, что в окрестности максимума деформации растяжения в направлении, близком к ортогональному к плоскости петли ДЦЗ\*(при  $\theta \approx 82^\circ$ ), реализуются условия для инициации образования кристаллов с габитусами (11-2). Напомним, именно к семейству {112} близки габитусы поверхностного мартенсита. Так что ДЦЗ1\* могут стимулировать и возникновение поверхностного мартенсита, обеспечивая симбиоз кристаллов пакетного мартенсита в объеме образца с кристаллами в приповерхностной области. Разумеется, этот интересный вопрос заслуживает отдельного рассмотрения.

Следует иметь в виду, что попытки [16] абсолютизировать ориентации {557}, интерпретируя их как приближение к точным иррациональным вариантам  $\{11\sqrt{2}\}$  не имеют, на наш взгляд, серьезных оснований, поскольку базируются на чисто кристаллогеометрическом подходе, не учитывающем реальные физические процессы. Аналогичное замечание касается и трактовки габитусов, близких к {225} как приближения к иррациональной записи  $\{11\sqrt{6}\}$ . Отбор габитусов в конечном итоге диктуется упругими полями ДЦЗ в области локализации НВС. Используемый нами набор упругих модулей неплохо моделирует наблюдаемые ориентации габитусов, которым отвечают углы в окрестностях экстремумов сдвигов и деформаций. Поскольку значения упругих модулей меняются при изменении состава сплавов, то изменяются и ориентации векторов  $\xi_i$  и  $\mathbf{S}$ , как и



отношение скоростей  $\alpha$ . Следовательно, меняется и ориентация габитуса. Очевидно, что неоднородно и упругое поле ДЦЗ, поэтому изменение координат локализации НВС также сказывается на ориентировках габитусов. Металловедам хорошо известно, что указываемые приближенно индексы габитусов относятся к некоторой усредненной позиции, а не к единственно выделенной. В [3] показано, что изменение параметра  $\alpha$  позволяет естественно описать смену габитусов {557} на {225}, а снятие вырождения (4) происходит при выходе волновых векторов пары  $\ell$ -волн из плоскости (1-10).

В то же время межфазные ОС демонстрируют устойчивость, что также вполне естественно, поскольку одна из плотноупакованных плоскостей семейства {111} аустенита, входящая в ОС, перестраивается в наиболее плотную из плоскостей мартенсита, образуя с ней малый (или даже нулевой) угол. Ясно, что и направления упаковок атомов в такой плоскости аустенита отклоняются на небольшие углы от соответственных направлений в мартенсите. Традиционно анализируют отклонения наблюдаемых ОС от предельных (идеальных) вариантов ОС Курдюмова-Закса и Нишиямы, отличающихся поворотом на  $\approx 5^\circ$ . Как установили Гренингер и Трояно, реально наблюдаются промежуточные ОС. Достаточно подробно этот вопрос обсуждается в [5, 22], где, однако, еще не излагалась интерпретация физической природы дислокаций превращения. Подчеркнем еще раз, ГП устанавливается сразу при распространении УВП, несущего пороговую деформацию, тогда как ОС реализуются после достижения финишных значений деформации. В кристаллографическом подходе, где ГП интерпретируется как конечный продукт предшествующих комбинаций деформаций, причинно-следственные связи инвертируются.

### Заключение

1. Выполненный анализ показал, что в динамической теории МП образование стопы кристаллов пакетного мартенсита возможно за счет эстафетной реакции нового типа. При этом функции ДЦЗ\* выполняют дислокационные петли, обрамляющие габитусные плоскости возникающих реечных кристаллов, причем направления эффективных векторов Бюргерса задаются макросдвигами.

2. Упругое поле ДЦЗ\* способно инициировать также формирование кристаллов поверхностного мартенсита. Это создает условия для реализации симбиоза кристаллов пакетного

мартенсита (с габитусами близкими {557}) в объеме образца с кристаллами поверхностного мартенсита (с габитусами близкими {112}).

### Список литературы

1. Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977. 238 с.
2. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Основные принципы динамической теории реконструктивных мартенситных превращений // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2006. Т. 3, № 4. С. 67–70.
3. Кащенко М.П. Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. 280 с.
4. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая модель сверхзвукового роста мартенситных кристаллов // УФН. 2011. Т. 181, № 4. С. 345–364.
5. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при  $\gamma$ - $\alpha$  превращениях в сплавах железа. Екатеринбург: УГЛТУ, 2009. 98 с.
6. Kashchenko M.P., Kashchenko N.M., Chashchina V.G. Dynamic options for forming transformation twins // Materials Today: Proceedings. 2017. V. 4. № 3. P. 4605–4610.
7. Верещагин В.П., Кащенко М.П., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Идентификация дефектов, необходимых для реализации многокристалльных группировок пакетного мартенсита // ФММ. 1994. Т. 77, № 4. С. 173–174.
8. Счастливцев В.М., Калетина Ю.В., Фокина Е.А. Мартенситное превращение в магнитном поле. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322 с.
9. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая интерпретация формирования параллельных тонкопластинчатых кристаллов мартенсита в сильных магнитных полях // МИТОМ. 2014. № 7. С. 3–7.
10. Кащенко М.П., Семеновых А.Г., Чащина В.Г. Кристонный механизм формирования  $\alpha'$  мартенсита деформации в присутствии мартенсита напряжения // Вопросы материаловедения. 2002. № 1. С. 253–259.
11. Кащенко М.П., Чащина В.Г., Семеновых А.Г. Кристонная модель формирования  $\alpha'$  мартенсита деформации в сплавах на основе железа // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6, № 3. С. 95–122.

12. Kashchenko N.M. Dynamic Growth Mechanism of Crystal Faces of Surface Martensite with Habit Planes in Proximity to  $\{112\}$  // Russian Physics Journal. 2024. N 7. P. 946–950.

13. Кащенко Н.М., Кащенко М.П., Чашина В.Г. Динамическая теория формирования граней кристалла при мартенситных превращениях, включая поперечный рост кристаллов. Глава 32. В кн. Актуальные проблемы прочности. Минск: ИВЦ Минфина, 2024. С. 418–430.

14. Счастливцев В.М. Структурные особенности мартенсита в конструкционных сталях // ФММ. 1972. Т. 33, № 2. С. 326–334.

15. Счастливцев В.М., Копцева Н.В., Артемова Т.В. Электронномикроскопическое исследование структуры мартенсита в малоуглеродистых сплавах железа // ФММ. 1976. Т. 41, № 6. С. 1251–1260.

16. Cayron C., Baur A., Logé R. Crystallography of low-alloy martensitic steels:  $\{557\}$  habit planes of the blocks and selfaccommodation in the packets. 2016. <https://www.researchgate.net/publication/303970025>.

17. Haush G., Warlimont H. Single crystalline elastic constants of ferromagnetic face centered cubic Fe–Ni invar alloys // Acta. Met., 1973. V. 21, N 4. P. 401–414.

18. Кащенко М.П., Кащенко Н.М., Чашина В.Г. Динамическая модель пространственного масштабирования начального возбужденного состояния при реконструктивных мартенситных превращениях // ФММ. 2021. Т. 122, № 9. С. 895–901.

19. Кащенко М.П., Семеновых А.Г., Нефедов А.В., Кащенко Н.М., Чашина В.Г. Динамическая модель нанокристаллической реализации  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения при повышенном значении объемного эффекта // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 1. С. 25–31.

20. Kashchenko M.P., Kashchenko N.M., Chashchina V.G. The formation of martensite crystals with a degenerate structure of transformation twins // Letters on materials. 2018. V. 8, N 4. P. 429–434.

21. Кащенко М.П., Кащенко Н.М., Чашина В.Г. Вырожденная структура двойников превращения и оценка плотности дислокаций мартенситных кристаллов // ФТТ. 2019. Т. 61, № 12. С. 2274–2279.

22. Кащенко М.П., Летучев В.В., Коновалов С.В., Яблонская Т.Н. Модель формирования пакетного мартенсита // ФММ. 1997. Т. 83, № 3. С. 43–52.

### Информация об авторах

Н. М. Кащенко – ассистент кафедры высшей математики Института фундаментального образования Уральского федерального университета.

Е. А. Корзникова – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Уфимского университета науки и технологий.

М. П. Кащенко – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики Уральского государственного лесотехнического университета; профессор кафедры высшей математики Института фундаментального образования Уральского федерального университета.

В. Г. Чашина – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики Института фундаментального образования Уральского федерального университета, профессор кафедры общей физики Уральского государственного лесотехнического университета.

### References

1. Kurdyumov, G. V., Utevskiy, L. M. & Entin, R. I. (1977). Prevrashcheniya v zheleze i stali. M.: Nauka. P. 238. (In Russ.).

2. Kashchenko, M. P. & Chashchina, V. G. (2006). Osnovnyye printsiipy dinamicheskoy teorii rekonstruktivnykh martensitnykh prevrashcheniy. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 3(4), 67–70. (In Russ.).

3. Kashchenko, M. P. (2010). Volnovaya model' rosta martensita pri  $\gamma$ - $\alpha$  prevrashchenii v splavakh na osnove zheleza. Izhevsk: NITS «Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika», Izhevskiy institut komp'yuternykh issledovaniy. P. 280 c. (In Russ.).

4. Kashchenko, M. P. & Chashchina, V. G. (2011). Dinamicheskaya model' sverkhzvukovogo rosta martensitnykh kristallov. UFN, 181(4), 345–364. (In Russ.).

5. Kashchenko, M. P. & Chashchina, V. G. (2009). Dinamicheskaya model' formirovaniya dvoynikovannykh martensitnykh kristallov pri  $\gamma$ - $\alpha$  prevrashcheniyakh v splavakh zheleza. Ekaterinburg: UGLTU. P. 98. (In Russ.).

6. Kashchenko, M. P., Kashchenko, N. M. & Chashchina, V. G. (2017). Dynamic options for forming transformation twins. *Materials Today: Proceedings*, 4(3), 4605–4610.

7. Vereshchagin, V. P., Kashchenko, M. P., Konovalov, S. V. & Yablonskaya, T. N. (1994). Identifikatsiya defektov, neobkhodimyykh dlya



realizatsii mnogokristal'nykh gruppировок paketnogo martensita. *FMM*, 77(4), 173–174. (In Russ.).

8. Schastlivtsev, V. M., Kaletina, Yu. V. & Fokina, E. A. (2007). Martensitnoye prevrashcheniye v magnitnom pole. Ekaterinburg: UrO RAN. P. 322. (In Russ.).

9. Kashchenko, M. P. & Chashchina, V. G. (2014). Dinamicheskaya interpretatsiya formirovaniya parallel'nykh tonkoplastinchatykh kristallov martensita v sil'nykh magnitnykh polyakh. *MiTOM*, (7), 3–7. (In Russ.).

10. Kashchenko, M. P., Semenovyykh, A. G. & Chashchina, V. G. (2002). Kristonnyy mekhanizm formirovaniya  $\alpha'$  martensita deformatsii v prisutstvii martensita napryazheniya. *Voprosy materialovedeniya*, (1), 253–259. (In Russ.).

11. Kashchenko, M. P., Chashchina, V. G. & Semenovyykh, A. G. (2003). Kristonnaya model' formirovaniya  $\alpha'$  martensita deformatsii v splavakh na osnove zheleza. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 6(3), 95–122. (In Russ.).

12. Kashchenko, N. M. (2024). Dynamic Growth Mechanism of Crystal Faces of Surface Martensite with Habit Planes in Proximity to  $\{112\}$ . *Russian Physics Journal*, (7), 946–950.

13. Kashchenko, N. M., Kashchenko, M. P. & Chashchina, V. G. (2024). Dinamicheskaya teoriya formirovaniya graney kristalla pri martensitnykh prevrashcheniyakh, vklyuchaya poperechnyy rost kristallov. Glava 32. V kn. Aktual'nyye problemy prochnosti. Minsk: IVTS Minfina. P. 418–430. (In Russ.).

14. Schastlivtsev, V. M. (1972). Strukturnyye osobennosti martensita v konstruktsionnykh stalyakh. *FMM*, 33(2), 26–334. (In Russ.).

15. Schastlivtsev, V. M., Koptseva, N. V. & Artemova T. V. (1976). Elektronnomikroskopicheskoye issledovaniye struktury martensita v malouglerodistykh splavakh zheleza. *FMM*, 41(6), 1251–1260. (In Russ.).

16. Cayron, C., Baur, A. & Logé, R. (2016). Crystallography of low-alloy martensitic steels:  $\{557\}$  habit planes of the blocks and self-accommodation in the packets. <https://www.researchgate.net/publication/303970025>.

17. Haush, G. & Warlimont, H. (1973). Single crystalline elastic constants of ferromagnetic face centered cubic Fe–Ni invar alloys. *Acta. Met.*, 21(4), 401–414.

18. Kashchenko, M. P., Kashchenko, N. M. & Chashchina, V. G. (2021). Dinamicheskaya model' prostranstvennogo masshtabirovaniya nachal'nogo vzbuzhdennogo sostoyaniya pri rekonstruktivnykh martensitnykh prevrashcheniyakh. *FMM*, 122(9), 895–901. (In Russ.).

19. Kashchenko, M. P., Semenovyykh, A. G., Nefedov, A. V., Kashchenko, N. M. & Chashchina, V. G. (2022). Dinamicheskaya model' nanokristallicheskoj realizatsii  $\gamma$ – $\alpha$  martensitnogo prevrashcheniya pri povyshennom znachenii ob'yemnogo effekt. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 19(1), 25–31. (In Russ.).

20. Kashchenko, M. P., Kashchenko, N. M. & Chashchina, V. G. (2018). The formation of martensite crystals with a degenerate structure of transformation twins. *Letters on materials*, 8(4), 429–434.

21. Kashchenko, M. P., Kashchenko, N. M. & Chashchina, V. G. (2019). Vyrozhdannaya struktura dvoynikov prevrashcheniya i otsenka plotnosti dislokatsiy martensitnykh kristallov. *FTT*, 61(12), 2274–2279. (In Russ.).

22. Kashchenko, M. P., Letuchev, V. V., Konovalov, S. V. & Yablonskaya, T. N. (1997). Model' obrazovaniya paketnogo martensita. *FMM*, 83(3), 43–52. (In Russ.).

### Information about the authors

N. M. Kashchenko – Assistant of the Department of Higher Mathematics of the Ural Federal University.

E. A. Korznikova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Laboratory of «Metals and Alloys under Extreme Impacts», Ufa University of Science and Technology.

M. P. Kashchenko – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Physics of the Ural State Forestry University; Professor of the Department of Higher Mathematics of the Ural Federal University.

V. G. Chashchina – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Higher Mathematics of the Ural Federal University; Professor of the Department of Physics of the Ural State Forestry University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 03.09.2024; одобрена после рецензирования 14.10.2024; принята к публикации 02.12.2024.

The article was received by the editorial board on 03 Sept. 2024; approved after reviewing 14 Oct. 2024; accepted for publication 02 Dec. 2024.