

**POSSIBLE MECHANISM HETEROGENEOUS LAYERED STRUCTURES
FORMATION DURING GROWTH OF MARTENSITE CRYSTALS**

Nadezhda Mikhailovna Kashchenko^{1, 2a}, *Elena Alexandrovna Korznikova*^{2, 3},
Mikhail Petrovich Kashchenko^{1, 4}, *Vera Gennadievna Chashchina*^{1, 4}

¹ Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Mira St., 19, 620002, Yekaterinburg, Russia

² Ufa University of Science and Technology, 32 Zaki Validi str., 450076, Ufa, Russia

³ Polytechnic Institute (branch) of the North-Eastern Federal University. M.K. Ammosova in Mirny, st. Tikhonova, 5/1, 678170, Mirny, Russia

⁴ Ural State Forest Engineering University, 37 Sibirsky Trakt St., 620100, Yekaterinburg, Russia

^a nad.kashchenko@yandex.ru

ABSTRACT

The main features of iron-based γ - α MTs are briefly described, including macroscopic morphological features and supersonic (relative to longitudinal waves) crystal growth rate. The key provisions of the dynamic theory of martensitic transformations are listed. It is noted that the idea of a quasi-equilibrium nucleus in the dynamic theory is replaced by the concept of an initial excited state arising in the elastic field of a dislocation nucleation center and generating a wave process that controls the formation of martensitic crystal growth. It is essential that the controlling wave process inherits and transfers the deformation created in the region of localization of the initial excited state. It is shown, using the example of crystals of surface martensite with habits close to $\{112\}$, that the growth of crystal faces within the framework of the dynamic theory can be interpreted as the formation of thin layers parallel to the faces and the resulting layers can directly contact the faces of the original crystal or be separated by the layers representing distorted residual austenite or martensite, generally distinguished by the choice of the main axis of Bain deformation and probably orientation relationships. Thus, inhomogeneous structures can be observed in the peripheral regions of martensite crystals. Clarification of the specifics of such inhomogeneities requires separate studies.

KEYWORDS

Martensitic transformations; dynamic theory; surface martensite; facet growth; heterogeneous layered structures.

**ВОЗМОЖНЫЙ МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ
НЕОДНОРОДНЫХ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР ПРИ ПОДРАСТАНИИ
КРИСТАЛЛОВ МАРТЕНСИТА**

Надежда Михайловна Кащенко^{1, 2a}, *Елена Александровна Корзникова*^{2, 3},
Михаил Петрович Кащенко^{1, 4}, *Вера Геннадиевна Чащина*^{1, 4}

¹ Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, 620002, Екатеринбург, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия

³ Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Россия

⁴ Уральский государственный лесотехнический университет, ул. Сибирский тракт, 37, 620100, Екатеринбург, Россия

^a nad.kashenko@yandex.ru

АННОТАЦИЯ

Кратко излагаются основные особенности γ - α МП на основе железа, включающие макроскопические морфологические признаки и сверхзвуковую (по отношению к продольным волнам) скорость роста кристаллов. Перечисляются ключевые положения динамической теории мартенситных превращений. Отмечается, что представление о квазиравновесном зародыше в динамической теории заменяется концепцией начального возбужденного состояния, возникающего в упругом поле дислокационного центра зарождения и порождающего волновой процесс, управляющий формированием роста мартенситного кристалла. Существенно, что управляющий волновой процесс наследует и переносит деформацию, создаваемую в области локализации начального возбужденного состояния. Показано на примере кристаллов поверхностного мартенсита с габитусами близкими $\{112\}$, что подрастание граней кристалла в рамках динамической теории можно интерпретировать, как формирование тонких слоев, параллельных граням, причем образующиеся слои могут непосредственно контактировать с гранями исходного кристалла, либо разделяться прослойками, представляющими собой искаженный остаточный аустенит, либо мартенсит, в общем случае отличающихся выбором главной оси бейновской деформации и, вероятно, ориентационными соотношениями. Таким образом, в периферических областях мартенситных кристаллов могут наблюдаться неоднородные структуры. Выяснение специфики подобных неоднородностей требует отдельных исследований.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Мартенситные превращения; динамическая теория; поверхностный мартенсит; подрастание граней; неоднородные слоистые структуры.

Введение

Как известно [1–3], мартенситные кристаллы характеризуются набором взаимно-однозначно соответствующих макроскопических морфологических признаков, а именно: ориентация габитусной плоскости, направление и величина макросдвига и межфазные ориентационные соотношения (ОС). Применительно к сплавам на основе железа классическое мартенситное превращение (МП), представляющее собой переход из γ (ГЦК) в α (ОЦК- или ОЦТ-) фазу, начинается при температурах M_s значительно ниже температуры равновесия фаз T_0 . Измерение ско-

рости роста кристаллов мартенсита (α -фазы) [4–7] свидетельствует о сверхзвуковой (по отношению к продольным волнам) скорости формирования мартенситных кристаллов. Однозначная связь морфологических признаков свидетельствует о существовании динамического механизма, обеспечивающего кооперативность превращения, являющуюся важнейшим отличием МП от превращений «нормального» типа, при которых граница раздела фаз может преодолеваться за счет диффузии отдельных атомов. Одновременная трактовка широкого спектра особенностей формирования мартенсита была достиг-

нута только после развития динамической теории МП (см., например, [8–13]). Особо просто и наглядно в динамической теории интерпретируется образование габитусной плоскости как следствие перемещения линии пересечения пары фронтов волновых пучков квазипродольных (либо продольных) относительно длинноволновых l -волн. В динамической теории вместо представлений о существовании квазиравновесных зародышей новой фазы вводится понятие начального возбужденного состояния (НВС), возникающего в определенных локальных областях упругих полей дислокаций. Такие области удовлетворяют условию: $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$, $\varepsilon_3 \approx 0$, где ε_i – собственные числа симметричного тензора деформации дислокационного центра зарождения (ДЦЗ). НВС имеет форму вытянутого прямоугольного параллелепипеда, ребра которого в простейшем случае коллинеарны собственным векторам ξ_i симметричного тензора деформации $\hat{\varepsilon}$, причем длинная ось параллелепипеда направлена вдоль ξ_3 . При температурах $\approx M_s$ атомы в объеме НВС совершают скачок к новым положениям равновесия, при этом выделяется энергия преимущественно в форме колебаний вблизи новых положений равновесия, порождающих пару волновых пучков квазипродольного типа с ориентацией волновых векторов, близкими ξ_1 и ξ_2 .

Легко показать, что ориентация нормали N_w к габитусной плоскости в приближении продольных l -волн задается соотношением:

$$N_w \parallel |n_2 \pm a_{21} n_1|,$$

$$n_1 = \frac{v_1}{v_1}, n_2 = \frac{v_2}{v_2}, |n_{1,2}| = 1, \quad (1)$$

$$a_{21} = \frac{v_2}{v_1} \approx \sqrt{|\varepsilon_1| |\varepsilon_2|^{-1}}$$

где v_1, v_2 – скорости квазипродольных l -волн.

Подчеркнем, что в определение N_w , как и других морфологических признаков, входит

параметр a , зависящий только от упругих модулей исходной фазы (аустенита), поскольку на фронте распространения управляющего волнового процесса (УВП) атомы еще не достигают новых устойчивых положений и, следовательно, упругих модулей второй фазы не существует. Таким образом, отыскание габитуса N_w базируется на расчете упругих полей определенных ДЦЗ и требует знания упругих модулей исходной фазы.

Как правило, определение морфологических признаков выполняется с использованием монокристаллических образцов аустенита либо крупных зерен. Для основного объема крупных мартенситных кристаллов ОС обычно соответствуют соотношениям Гренингера-Трояно [14], однако часто указывают отклонения от идеализированных ОС Курдюмова-Закса или Нишиямы [1]. С появлением методики EBSD выяснилось, что определение ОС возможно даже в случае очень мелких кристаллов, когда определение габитусных плоскостей и макросдвига затруднены. Причем, согласно [15], в образце сплава с фиксированным составом могут наблюдаться одновременно несколько типов ОС. Например, к уже упоминавшимся ОС добавляется ОС Питча.

Цель данной работы – показать, что в рамках динамической теории на стадии подрастания граней первоначально возникшего кристалла возможно появление неоднородности в ОС. В качестве примера обсуждается подрастание граней кристалла поверхностного мартенсита, габитус которого близок к (112) (кристаллографические обозначения относятся к базису исходной γ -фазы).

1. Общая информация о формировании кристаллов поверхностного мартенсита

Кристаллы поверхностного мартенсита при γ - α МП возникают в прилегающей к поверхности образца области, как правило, после электролитической полировки поверхности при температурах на 30 – 50° выше температуры M_s для МП в объеме образца.

Морфологические и кинетические особенности формирования кристаллов ПМ достаточно подробно освещены в [16]. В [17, 18] (см. также [19] применительно к описанию ансамблей кристаллов с габитусами $\{557\}$, $\{112\}$) проанализированы упругие поля предполагаемых ДЦЗ для кристаллов ПМ. Установлено, что основную роль при быстром возникновении на первом этапе кристаллов ПМ речного типа играют прямолинейные сегменты ДЦЗ с габитусами, близкими $\{112\}$, ориентированные вдоль $\langle 1 -1 0 \rangle$ при векторах Бюргера смешанного или краевого типа.

Показано также, что медленный боковой рост можно интерпретировать, как следствие возникновения НВС* в упругом поле дислокационной петли (ДЦЗ*), обрамляющей плоскость габитуса и характеризуемую вектором Бюргера \mathbf{b}^* , коллинеарным направлению макросдвига кристалла, быстро возникающему на первом этапе МП.

Сравнительно медленное (при визуальной фиксации) подрастание трактуется, как серия быстрых скачков, разделяемых паузами, длительность которых по порядкам величины превышает время одного скачка.

2. Формирование неоднородных слоистых структур на периферии мартенситных кристаллов

Для понимания механизма формирования неоднородных ОС на периферии кристалла ПМ в процессе подрастания граней полезно напомнить механизм образования тонкой двойниковой структуры в рамках динамической теории (подробно этот вопрос освещен в [8]). На рис. 1, взятом из [8], отражен процесс периодического воспроизводства начального возбужденного состояния, порождающего пару относительно коротковолновых s-волн (бегущих с равными по модулю скоростями $v_{1,2s}$ вдоль ортогональных осей симметрии 4-го порядка), движение линии пресечения фронтов которых задает гра-

ницу раздела (110) между основной и двойниковой компонентами тонкой двойниковой структуры.

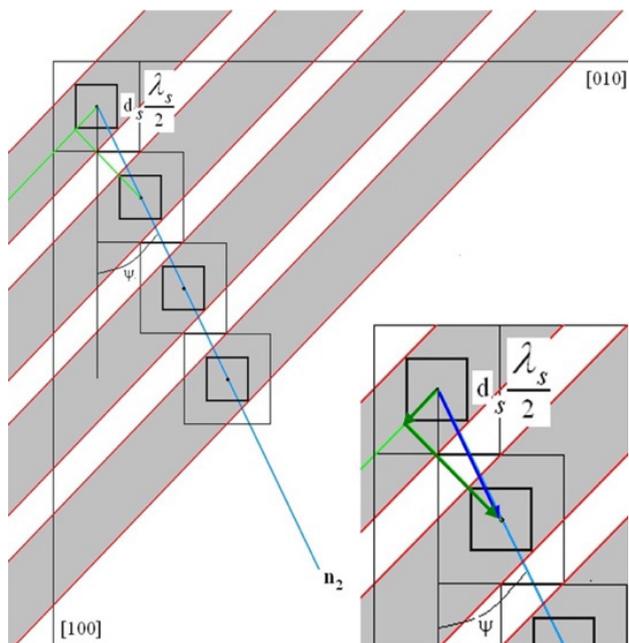


Рис. 1. Схема формирования регулярной двойниковой структуры: уровень пороговых деформаций, $|\varepsilon| \ll 1$ (приведен также увеличенный фрагмент)

Fig. 1. The scheme of formation of a regular twin structure: the level of threshold deformations, $|\varepsilon| \ll 1$ (an enlarged fragment is also shown)

Существенно, что растущая в $[1 -1 0]$ -направлении со скоростью $v_{tw} = v_{1,2s} \sqrt{2}$ основная «тонкопластинчатая компонента способна непрерывно излучать суперпозиционные волновые пучки в $[1 1 0]$ -направлении (подобно тому, как это постулируется в принципе Гюйгенса)». Используя эту идею, можно ожидать трех различных вариантов формирования слоев мартенсита, параллельных габитусной плоскости. Эти варианты изображены на рис. 2, где представлен идеализированный вариант кристалла ПМ в форме прямоугольного параллелепипеда: одна из граней – габитусная плоскость, параллельна $(1 1 2)$, вторая грань параллельна $(1 1 -1)$, а третья грань, ортогональная к ним, параллельна $(1 -1 0)$.

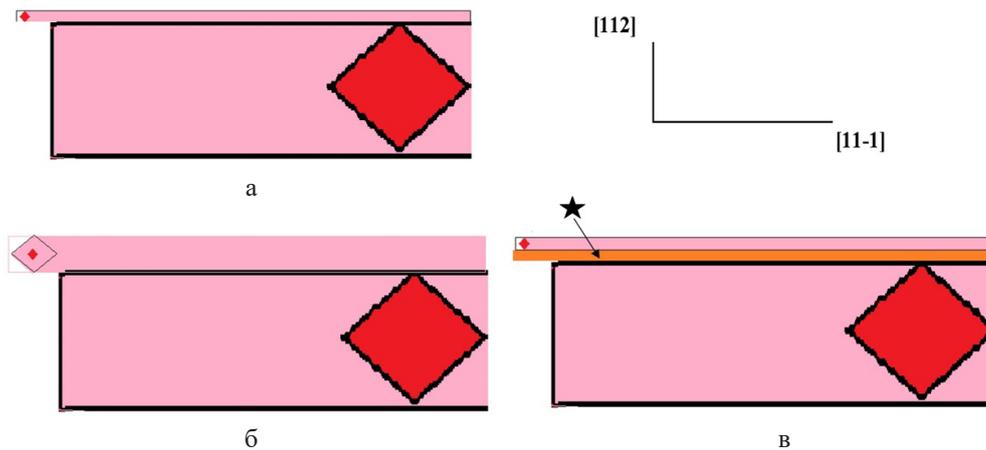


Рис. 2. Три варианта формирования слоев мартенсита, параллельных габитусной плоскости (112)

Fig. 2. Three variants of formation of martensite layers parallel to the habitus plane (112)

Во всех случаях крупный квадрат соответствует сечению НВС, возникающего в упругом поле исходного ДЦЗ и приводящего к образованию первоначального кристалла. Соответственно, маленький квадрат относится к НВС*, возникающему в упругом поле ДЦЗ* в форме прямоугольной петли с сегментами $\Lambda_1 \parallel [1 \ -1 \ 0]$ и $\Lambda_2 \parallel [1 \ 1 \ -1]$. Случай (а) соответствует прилеганию возникающего тонкого слоя непосредственно к габитусной плоскости первоначального кристалла. Случай (б) демонстрирует возможность прилегания слоя большей толщины за счет пространственного масштабирования НВС*, впервые предложенного в [20]. Случай (в) демонстрирует возможность формирования тонкого слоя, параллельного габитусной плоскости, но отделенного некоторой прослойкой, (отмеченной символом ★), которая может соответствовать либо прослойке искаженного аустенита, либо прослойке мартенсита, ориентационные соотношения которого в общем случае необязательно совпадают с ОС первоначального кристалла.

На рис. 3 приводится вариант подрастания грани (1 1 -1) первоначального кристалла ПМ, демонстрирующий возможность существования чередующихся тонких слоев мартенсита в общем случае разных ориентировок либо мартенсита и искаженного аустенита.

Уместно напомнить, что в случае формирования основной компоненты двойниковой структуры (см. рис. 1) более тонкая прослойка могла относиться не только к дополнительной компоненте двойника, но и к искаженной прослойке аустенита. Особенность формирования тонкой двойниковой структуры связана с идентичностью пары s-волн, бегущих вдоль осей симметрии 4-го порядка. При этом снятие вырождения между двумя возможными ориентировками внутренних двойниковых границ в пользу границы (1 -1 0) на рис. 1 обусловлено действием l-волны, несущей деформацию сжатия и выделяющей в качестве главной оси бейновской деформации ось [1 0 0] (на рис. 1 направлению \mathbf{n}_{2l} соответствует проекция скорости этой l-волны на плоскость (0 0 1). В вариантах, представленных на рис. 2 и рис. 3, направления волновых пучков, управляющих формированием слоев, параллельных граням первоначального кристалла ПМ, различны. Кроме того, огранка реального исходного кристалла близка, но не совпадает с приведенным выше идеализированным случаем. Волновые пучки, порождающие слои, параллельные граням, имеют волновые векторы, отклоняющиеся от плоскости симметрии (1 -1 0), и поэтому вопрос о снятии вырождения по возможным ориентациям границ раздела и, соответственно, отбору главных осей деформации Бейна, не возникает.

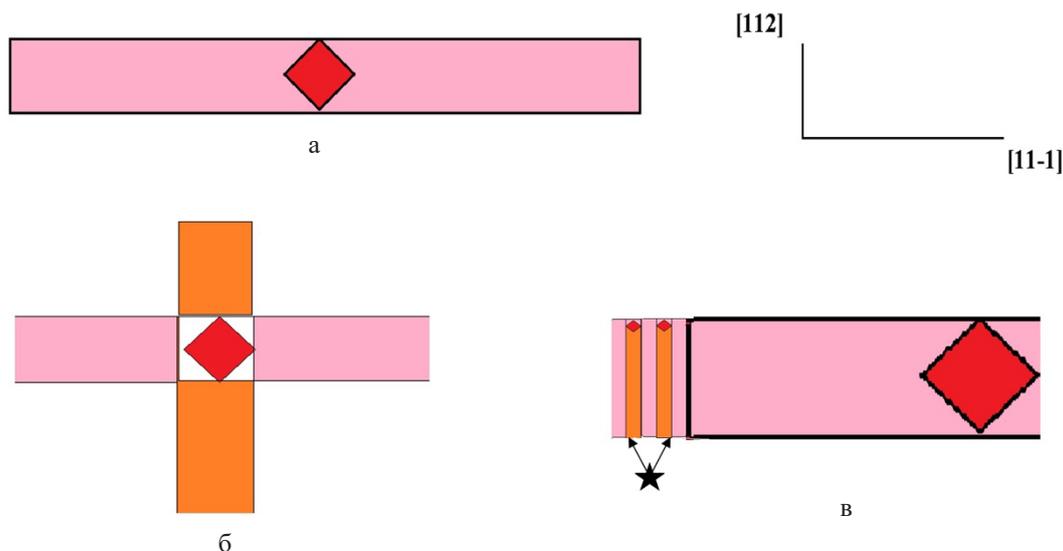


Рис. 3. Формирование слоев мартенсита, параллельных грани $(1\ 1\ -1)$:
a – демонстрация возникновения сечения исходного кристалла с габитусом $(1\ 1\ 2)$; *б* – демонстрация формирования двух слоев с ортогональными габитусами при наличии единственного НВС; *в* – демонстрация возможности образования неоднородной структуры слоев, параллельных грани $(1\ 1\ -1)$ кристалла ПМ

Fig. 3. Formation of martensite layers parallel to the face $(1\ 1\ -1)$:
a – demonstration of the appearance of a cross-section of the initial crystal with a habitus $(1\ 1\ 2)$; *б* – demonstration of the formation of two layers with orthogonal habituses in the presence of a single HC; *в* – is a demonstration of the possibility of forming an inhomogeneous structure of layers parallel to the face $(1\ 1\ -1)$ of a PM crystal

Заключение

Проведенное рассмотрение демонстрирует возможность описания неоднородных слоистых структур на периферии подрастающих мартенситных кристаллов. В рамках динамической теории возникающие слои, параллельные граням кристалла, можно трактовать как следствие возникновения начальных возбужденных состояний (НВС) в полях дислокационных петель, обрамляющих грани исходного кристалла. В частности, подобная неоднородность может приводить к различиям в ориентационных соотношениях чередующихся слоев. Таким образом, в периферических областях мартенситных кристаллов могут наблюдаться неоднородные структуры. Выяснение специфики подобных неоднородностей требует отдельных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. G.V. Kurdjumov, L.M. Utevsky, R.I. Entin, Transformations in iron and steel, Moscow: Nauka, 1977,

238 p. (in Russian) [Курдюмов Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. И. Превращение в железе и стали. М.: Наука, 1977. 236 с.]

2. M.L. Bernstein, V.A. Zaimovsky, L.M. Kaputkina. Thermomechanical processing of steel, Moscow: Metallurgy, 1983, 480 p. (in Russian) [Бернштейн М.Л. Термомеханическая обработка стали/ М.Л. Бернштейн, В.А. Займовский, Л.М. Капуткина. М.: Металлургия, 1983. 480 с.]

3. V.M. Schastlivtsev, Yu.V. Kaletina, E.A. Fokina, Martensitic transformation in a magnetic field Ekaterinburg: Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 2007. 322 p. (in Russian) [Счастливцев В.М., Калетина Ю.В., Фокина Е.А. Мартенситное превращение в магнитном поле. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322 с.]

4. Bunshah R.P., Mehl R.F. Rate of propagation of martensite. // Trans. AIME, 197, 1251-1258 (1953).

5. Lokshin F.L. Rate of martensitic transformation Nauchnie Dokladi Visshei Shkoli, Moscow: Metallurgiya. 2 205-208 (1958). (in Russian) [Локшин Ф.Л. Скорость мартенситного превращения // Научные доклады высшей школы. М.: Металлургия. 2 205-208 (1958)]

6. Lokshin F.L. Dynamic Theory of Martensitic Transformation Proceedings of Novocherkassk Polytechnic Institute. 771(85) 150 p. (1957). [Локшин

Ф.Л. Динамическая теория мартенситного превращения // Тр. Новочеркас. политехн. ин-та. 771/85 150 с. (1957)].

7. Yu.I. Meshcheryakov, M.P. Kashchenko, V.B. Vasilkov, S.A. Atroshenko, On the supersonic propagation of martensitic transformation fronts, *Tech. Phys. Lett.* 19 (1993) 75 – 78. (in Russian) [Мещеряков Ю.И., Кащенко М.П., Васильков В.Б., Атрошенко С.А. О сверхзвуковом распространении фронтов мартенситных превращений, инициированных ударным нагружением // Письма в ЖТФ. 19(2) 75-78(1993)].

8. M.P. Kashchenko, Wave Model of Martensite during γ - α Transformation in Iron Based Alloys. 2nd Edition, corrected and improved Moscow– Izhevsk: NITS “Regular and Chaotic Dynamics”, Izhevsk Institute of Computer Science, 2010, 280 P. (in Russian) [Кащенко М.П. Волновая модель роста мартенсита при γ – α превращении в сплавах на основе железа, изд. 2-е, испр. и дополн. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. 280 с].

9. M. P. Kashchenko, Dynamic model of formation of twinned martensite crystals during γ - α transformation in iron alloys Ekaterinburg: Ural State Forest Engineering University, 2009. – 97 p. [Кащенко, М. П. Динамическая модель формирования двойникованных мартенситных кристаллов при γ - α превращении в сплавах железа / М. П. Кащенко; Федеральное агентство по образованию, Уральский государственный лесотехнический университет. – Екатеринбург: Уральский государственный лесотехнический университет, 2009. – 97 с.]

10. M. P. Kashchenko, Dynamic theory of γ - α martensitic transformation in iron alloys and solution of the problem of critical grain size Moscow-Izhevsk, 2010. 133 p. [Кащенко М. П. Динамическая теория γ - α мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна Москва-Ижевск, 2010. 133 с.].

11. Kashchenko M.P., Chashchina V.G. Dynamic model of supersonic martensitic crystal growth// *Phys.-Usp.* 54, 331–349 (2011). DOI: 10.3367/UFNe.0181.201104a.0345.

12. Kashchenko M.P., Chashchina V.G. Formation of martensitic crystals in the limiting case of supersonic growth speed// *LoM*, 1, 7–14(2011). DOI: 10.22226/2410-3535-2011-1-7-14.

13. N. M. Kashchenko, M. P. Kashchenko, Wave control of martensite crystal growth, in: Collection of

articles based on the results of the Sixth Professorial Forum (Moscow, Russia 14 – 16 November 2023), Vol. 2, All-Russian public organization «Russian Professorial Assembly», Moscow, Russia, 2023, 281–288. (in Russian) [Н. М. Кащенко, М. П. Кащенко, Волновое управление ростом мартенситного кристалла // Наука и образование как основа развития России. Кадры для инновационной экономики: Сборник статей по итогам Шестого Профессорского форума 14–16 ноября 2023 г. Том 2, Москва, 14–16 ноября 2023 года. – Москва: Общероссийская общественная организация «Российское профессорское собрание», 2023. – С. 281-288].

14. Greninger, A. B., Troiano, A. R. The mechanism of martensite formation // *Metal. Trans.*, 185, 590–598 (1949).

15. Cayron, C. One-step model of the face-centred-cubic to body-centred-cubic martensitic transformation // *Acta Cryst.*, 69, 498-509 (2013).

16. Klostermann, J. A., 1969. The Nucleation and Growth of Slow-Growing Martensite in Fe-30% Ni // The Mechanism of Phase Transformations in Crystalline Solids, in: Proceedings of an International Symposium organized by the Institute of Metals and held in the University of Manchester from 3 to 5 July 1968. The Institute of Metals, London, 143-151 (1969).

17. Kashchenko N.M. Dynamic Growth Mechanism of Crystal Faces of Surface Martensite with Habit Planes in Proximity to $\{112\}$ // *Russ Phys J*, 67, 946–950 (2024). DOI: 10.1007/s11182-024-03201-5.

18. Kashchenko N. M. Dislocation Nucleation Centers of Surface Martensite Formation with Habit Planes in the Vicinity of $\{12\ 14\ 17\}$ // *Russ Phys J*, 66 (12), 1295-1298 (2024). DOI: 10.1007/s11182-023-03075-z.

19. Kashchenko N. M., Korznikova E. A., Kashchenko M. P., Chashchina V. G. Dynamic theory of martensite formation in the form of a crystals stack Fundamental Problems of Modern Materials Science. 21(4), 488-496 (2024). (in Russian) [Кащенко Н. М., Корзникова Е. А., Кащенко М. П., Чашчина В. Г. Динамическая теория формирования мартенсита в виде стопы кристаллов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 21(4), 488-496 (2024). DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.009.

20. Kashchenko M. P., Kashchenko N. M., Chashchina V. G. Dynamic Model of Spatial Scaling of the Initial Excited State upon Reconstructive Martensitic Transformations // *The Physics of Metals and Metallography*, 122 (9), 834-840 (2021). DOI: 10.1134/S0031918X21090052.