

Дальний порядок в дислокационной структуре кристаллов мартенсита

Long-Range Order in the Dislocation Structure of Martensite Crystals

Сатдарова Ф.Ф.

Кафедра металловедения и физики прочности, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва
e-mail: 2636674@infoline.su

Satdarova F.F.

Department of Metallurgy and Physics of Strength, National Research Technological University "MISiS", Moscow
e-mail: 2636674@infoline.su

Аннотация

Оптимальное оценивание дифракционных наблюдений над объектом достоверно обнаруживает периодичность в дислокационной структуре мартенситного превращения как проявление его волновой природы. Период по нормали к плоскостям скольжения соизмерим с радиусом петель дислокаций в кристаллах. Измеренная степень одномерного дальнего порядка в размещении петель близка к верхнему пределу, равному единице. Теория металлов подсказывает, что наблюдаемая структура порождена квантовыми колебаниями решетки, реализующими скачкообразный фазовый переход. Есть простое объяснение: после резкого падения температуры избыточная энергия электронов проводимости заставляет кристалл моментально расширяться с преобразованием трансляционной симметрии. Внутрикристаллические сдвиги, порожденные электрон-фононными взаимодействиями, вслед запуская волновой процесс образования тонких мартенситных пластин в окружающей матрице, наблюдаемых в металлографии. На основе углубленного анализа дислокационной структуры кристаллов мартенсита выдвинута физически обоснованная концепция, в которой мартенситное превращение есть макроскопическое квантовое явление, связанное со свойствами симметрии кристаллической системы в металлах.

Ключевые слова: система петель дислокаций, упорядочение по параллельным плоскостям скольжения, релаксационные колебания кристаллической решетки, квантовая природа мартенситного превращения.

Abstract

Optimal estimation of the diffraction observations over the object reliably detects periodicity in the dislocation structure of martensitic transformation as an exhibition of its wave nature. The period along normal to the slip planes is comparable with the radius of dislocation loops in crystals. The measured degree of one-dimensional long-range order in the arrangement of the loops is close to the upper limit equal to unity. Subject to the theory of metals, the observed structure could be generated by quantum lattice vibrations, which actuate a jump-like phase transition. A simple explanation exists: after a sharp fall in temperature, the excess energy of conduction electrons causes the crystal to expand instantly with the transformation of translational symmetry. Internal shifts of the crystal lattice caused by electron-phonon interactions concurrently trigger the wave process of formation of thin martensitic plates in the surrounding matrix, which are observed in metallography. Based on an in-depth analysis of the dislocation structure of martensite crystals, a physically founded concept is advanced in which the martensitic transformation is a macroscopic quantum phenomenon connected with the symmetry properties of a crystal system in metals.

Keywords: system of dislocation loops, ordering by parallel slip planes, relaxation vibrations of crystal lattice, quantum nature of martensitic transformation.

Введение

Теория дифракции для кристаллов, реальная структура которых моделируется системой петель дислокаций, применима ко всему пространству структур: беспорядок (хаотическая сетка), ближний порядок (случайные скопления), дальний порядок (регулярное размещение) [1].

Основные положения теории в основе метода исследования дислокационной структуры сильно искаженных кристаллов даны в статье [2].

Анализ системы дислокаций, возникающей в кристаллах при мартенситном превращении, раскрывает его природу.

Высокая концентрация мелких петель дислокаций (средний радиус петель меньше 25 периодов решетки) свидетельствует о том, что превращение совершают микроскопические сдвиги, совместно преобразующие симметрию кристаллов [2].

С обнаружением сильного дальнего порядка в системе дислокаций становится понятно, что микроскопические сдвиги порождены релаксационными колебаниями решетки кристаллов в момент нарушения состояния равновесия.

Наблюдаемость дальнего порядка в дислокационной структуре кристаллов вообще существенно ограничена. Доступна информация об одномерном дальнем порядке в системе мелких петель дислокаций, имеющаяся в начальных гармониках дифракционной линии с большими индексами отражения $\{HKL\}$.

Измерение параметров порядка в дислокационной структуре кристаллов созданным методом показано на примере тетрагонального мартенсита углеродистой стали.

1. Идентификация упорядоченной системы дислокаций в кристаллах

1.1. Дифракционное отображение одномерного порядка в размещении дислокационных петель

Уравнение дифракционной теории для деформированных кристаллов включает усреднение по большому статистическому ансамблю случайных систем дислокаций со всеми возможными значениями параметров, описывающих систему, – при заданных макроскопических параметрах: плотность дефектов в кристалле, масштаб корреляции и степень порядка в их размещении [1].

1. Общий вид уравнения дифракции для реальной структуры кристаллов. Пусть в системе дислокаций есть корреляция и дальний порядок в размещении петель по нормали к плоскостям скольжения \mathbf{n}^α ($\alpha = 1, \dots, p$). Тип петель α определен системой скольжения, число которых p . Доля всех упорядоченных петель со случайными радиусами ξ от их общего количества в кристалле есть степень порядка $\bar{\eta}$.

В уравнении гармоник дифракционной линии появится периодическая составляющая [1]:

$$\begin{cases} A_k \cong e^{-\langle T(k/\varpi) \rangle} & (k=1, 2, \dots), \\ T = T_0 + (1 - \bar{\eta})T_1 + T_2(\bar{\eta}). \end{cases}$$

Здесь T_0 соответствует беспорядочному распределению дефектов, T_1 учитывает корреляцию, T_2 отражает дальний порядок. Угловые скобки обозначают усреднение по статистическому ансамблю систем дислокаций. Наблюдаемая доля теоретического интервала в дифракционном пространстве – ϖ .

При расчете периодической составляющей $T_2(\bar{\eta})$ проводится суммирование по базисным векторам обратной решетки упорядоченных дефектов $\mathbf{g} = \left(\frac{2\pi}{\ell}\right)\mathbf{j}$, где ℓ – период основных трансляций, \mathbf{j} – единичные векторы в направлениях трансляции. Слагаемые имеют

множитель $\left(\frac{a}{\ell}\right)^3$, который учитывает число ячеек обратной решетки упорядоченных дефектов в единице объема обратного пространства кристалла с периодом решетки a .

Предполагается, что распределение размеров петель ξ и распределение периодов порядка ℓ в статистическом ансамбле систем дислокаций взаимно независимы и для всех петель одинаковы.

2. Обратная решетка упорядочения петель по нормали к плоскостям скольжения. В модели упорядоченного размещения петель по параллельным плоскостям скольжения для каждого типа петель α есть только один вектор трансляции $\mathbf{j} \parallel \mathbf{n}^\alpha$ ($\alpha = 1, \dots, p$).

Одномерную обратную решетку упорядоченных дислокаций в кристалле конечных размеров Ξ можно представить как периодический волновой пакет с ограниченным спектром. В обратном пространстве появятся пики с интервалом $\langle 1/\ell \rangle$ и шириной $\Delta \square (1/\Xi)$ [3]. Угловые скобки обозначают ожидаемые значения параметров в статистическом ансамбле систем дислокаций одинаковые для петель всех типов α .

При усреднении периодической компоненты $T_2(\bar{\eta})$ ожидаемое значение функции случайной величины $1/\ell$, вероятность отклонения которой от центра распределения $\langle 1/\ell \rangle$ быстро убывает, вычисляется с использованием разложения до второго центрального момента [4]:

$$\langle (1/\ell)^3 \rangle \approx \overline{(1/\ell)^3} \left[1 + 3 \left(\sigma_{1/\ell} / \overline{(1/\ell)} \right)^2 \right], \quad \sigma_{1/\ell} / \overline{(1/\ell)} \leq 0.1.$$

Здесь $\sigma_{1/\ell}^2$ – дисперсия неизвестного закона распределения для $1/\ell$.

Учтено, что в области ограничений теории период неоднородности искажений кристалла гораздо меньше его размеров Ξ ($\xi < \ell < 0.1 \Xi$), а ожидаемое $\langle \ell \rangle$ в ансамбле совпадает со средним $\bar{\ell}$ по объему кристалла (согласно эргодической гипотезе [5]).

3. Ограничения наблюдаемости дальнего порядка в системе дислокаций. Состояние порядка в дислокационной структуре кристаллов наблюдаемо, если в дифракционном пространстве существует область, где измеримы параметры, входящие в модель объекта.

Приближенное дифракционное уравнение, допускающее измерение параметров порядка, получим при следующем допущении в периодической составляющей $T_2(\eta)$ [1]:

$$\frac{2\pi}{\ell} (\mathbf{jR}) \square 1, \quad |\mathbf{R}| = \frac{a(k/\varpi)}{Q_{HKL}}, \quad Q_{HKL} = \sqrt{H^2 + K^2 + L^2}.$$

Отсюда следует, что параметры дальнего порядка в системе дислокаций в принципе измеримы по начальным гармоникам дифракционной линии, т.е. при k близких к нулю, с большим интервалом измерения по ϖ и большими индексами отражения в $Q_{\{HKL\}}$.

1.2. Модель дифракционных наблюдений для оптимального оценивания параметров объекта

При ограниченном количестве надежной информации в данных наблюдений выделим в векторе параметров объекта основные параметры, оценки которых требуется найти, остальные параметры будут лишь ограничиваться в области допустимых значений.

1. Уравнение модели наилучшей по точности измерения основных параметров. Общее уравнение гармоник дифракционной линии преобразовано в модель наблюдений, позволяющую измерять вместе с плотностью дислокаций также и параметры порядка в распределении петель по плоскостям скольжения:

$$\left. \begin{aligned} A_k &\cong f_k(\Theta) \quad (k < k_{\text{lim}}), \\ f_k(\Theta) &= \exp \left[-t e^{\theta_0} - x_k e^{\theta_1} - y_k e^{\theta_2} (\theta_2 e^{\theta_3}) \right], \\ t &= -C_0 Q_{HKL}^2, \\ x_k &= C_1 Q_{HKL} (k/\mathfrak{a}), \quad y_k = 1/4 C_2 (k/\mathfrak{a})^2; \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$\Theta = \begin{Bmatrix} \Phi \\ \theta \end{Bmatrix}, \quad \theta = \begin{Bmatrix} \theta_1 = \ln \left[\bar{c} (\bar{\xi}/a) \right] \\ \theta_2 = \bar{\eta} \\ \theta_3 = \ln \left[(\bar{\xi}/\ell)^3 W \right] \end{Bmatrix}, \quad \Phi = \begin{Bmatrix} \varphi_0 = \ln \left[\bar{c} (\bar{\xi}/a)^2 J_\xi (\mu/a) \nu (1-\bar{\eta}) \right] \\ \varphi_1 = \ln \left[\bar{c} (\bar{\xi}/a)^2 J_\xi (1+\nu(1-\bar{\eta})) \right] \end{Bmatrix},$$

$$W = J_\xi^6 J_\ell; \quad J_\xi = \left[1 + (\sigma_\xi / \bar{\xi})^2 \right], \quad J_\ell = \left[1 + 3 \left(\sigma_{\nu/\ell} / (\bar{\nu}/\ell) \right)^2 \right].$$

Область определения модели наблюдений, в пределах которой действительна аппроксимация уравнения дифракционной теории, ограничена порядком гармоник k_{lim} .

Численные значения участвующих в уравнении кристаллогеометрических коэффициентов зависят от типа решетки и семейства скольжения [2]. В частности, для $\langle 111 \rangle \{110\}$ ОЦК: $C_0 = 16.278295$, $C_1 = 8.769899$, $C_2 = 5.411616$.

В модели дифракционных наблюдений (1) вектор параметров Θ имеет две составляющие: θ – определяемые параметры объекта; Φ – остальные параметры системы дислокаций, моделирующей объект, которые играют вспомогательную роль при оптимизации.

В обе компоненты θ и Φ оцениваемого вектора Θ вошли средняя концентрация петель \bar{c} и их средний радиус $\bar{\xi}$. Вектор параметров случайной системы петель дислокаций содержит еще и параметры объемной и нормальной корреляции (ν, μ) [1], а также коэффициенты вариации размеров петель $\sigma_\xi / \bar{\xi}$ и обратного периода порядка $\sigma_{\nu/\ell} / (\bar{\nu}/\ell)$. Все они попали во вспомогательную компоненту Φ .

2. Проверка применимости модели наблюдений по оценкам линейной регрессии. Для кристаллов с мелкими петлями дислокаций в области всех ограничений модели (1) может оказаться минимально необходимое число гармоник, поэтому положим $k_{\text{lim}} = 3$.

Приведем модель (1) к уравнению аппроксимации наблюдений $Y_k = -\ln A_k$. С учетом требования устойчивости к выборочным колебаниям данных построим уравнение регрессии для начальных гармоник $\{A_k\}$ ($k < k_{\text{lim}}$), исключив квадратичный по k член, который здесь незначим:

$$Y_k \cong h_0 z_{k0} + h_1 z_{k1} \quad (z_{k0} \equiv t, \quad z_{k1} \equiv x_k).$$

По выборке данных объема n вычислим взвешенную (с весом $w_k = (\sigma_{A_k}^2 / A_k^2)^{-1}$, где $\sigma_{A_k}^2$ – дисперсия измеренных A_k) сумму квадратов отклонений от уравнения регрессии – U . Если минимальное по остаточным отклонениям $U^* > (2n-2)/(1-P)$, то применимость модели (1) отвергается с достоверностью не менее P [6].

Если уравнение регрессии хорошо аппроксимирует данные, коэффициенты (h_0, h_1) положительны и статистически значимы, то модель наблюдений применима для оценивания вектора параметров Θ .

Наилучшие по точности и стабильности оценки коэффициентов регрессии дают начальные приближения для вспомогательной компоненты Φ вектора Θ .

1.3. Метод статистического оценивания модели дифракционных наблюдений

Различные приближения теории по-разному искажают вычисленные начальные гармоники A_k относительно истинных гармоник \hat{A}_k . Можно предположить, что в реальности на существенно ограниченном интервале ($1 \leq k \leq k_{\text{lim}}$) систематические искажения прогнозируемых гармоник A_k близки к равномерным.

1. Целевая функция максимума правдоподобия выборки данных. Допустим, что квадраты отклонений от истинных гармоник \hat{A}_k , которые складываются из ошибок данных и погрешностей модели, пропорциональны дисперсии измерений σ_k^2 с примерно постоянным неизвестным множителем ζ . Переопределим задачу как оценивание по выборке данных $\{\mathbf{A}_r\}$ ($r = 1, \dots, n$) с ковариационной матрицей

$$\zeta \mathbf{V}_A = \zeta \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sigma_{k_{\text{lim}}}^2 \end{bmatrix}.$$

При нормальном распределении выборки с ковариационной матрицей пропорциональной неизвестному множителю метод максимального правдоподобия приводит к следующей целевой функции оптимизации модели [6]:

$$\left. \begin{aligned} L(\Theta) &= \frac{nm}{2} \log \sum_{r=1}^n \sum_{k=1}^m |\varepsilon_{k,r}(\Theta)|^2 / \sigma_k^2, \\ \varepsilon_{k,r}(\Theta) &= A_{k,r} - f_k(\Theta). \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Здесь n – объем выборки исходных данных; $m = k_{\text{lim}}$ – размерность ограниченного вектора наблюдений $\{A_k\}$.

2. Оптимизирующая последовательность в допустимой области параметров. Матрица вторых производных целевой функции – \mathbf{H} и вектор градиента – \mathbf{g} рассчитываются совместно с коэффициентом ζ , выполняющим настройку модели в процессе приближения к точке оптимума Θ^* [6]:

$$\Theta^{i+1} = \Theta^i - \mathbf{H}^{-1} \mathbf{g} \quad (i = 0, 1, \dots),$$

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{H} &= 2 \sum_{r=1}^n \sum_{k=1}^m (\partial f_k / \partial \Theta)^\top w_k (\partial f_k / \partial \Theta), \\ \mathbf{g} &= -2 \sum_{r=1}^n \sum_{k=1}^m (\partial f_k / \partial \Theta)^\top w_k \varepsilon_{k,r}(\Theta), \\ w_k(\zeta) &= \frac{nm}{2\sigma_k^2} \left[\sum_{r=1}^n \sum_{k=1}^m |\varepsilon_{k,r}(\Theta)|^2 / \sigma_k^2 \right]^{-1} \quad (1 \leq k \leq m). \end{aligned} \right.$$

Поиск оптимума ведется в области допустимых значений параметров модели объекта однозначно связанных с вектором θ :

$$\left\{ \begin{aligned} 10^8 &< \rho_{\text{д}} = \bar{c}(\bar{\xi}/a)(2\pi/a^2) < 10^{12} \text{ см}^{-2}, \\ 0 &< \bar{\eta} < 1, \quad 0.1 < \overline{(\xi/\ell)} < 1, \\ 0 &< \sigma_{\bar{\xi}}/\bar{\xi} < 0.3, \quad 0 < \sigma_{\bar{\eta}}/\overline{(1/\ell)} < 0.1. \end{aligned} \right.$$

Сюда включены сведения из теории о том, что дифракционная линия выявляема, когда период упорядоченного размещения петель находится в интервале $\bar{\xi} < \bar{\ell} < 0.1\Xi$ – в предположении слабо неоднородного поля искажений в кристалле размера Ξ [1].

Чтобы оставаться в пределах допустимой области, двигаясь из случайной стартовой точки Θ_0 , введем преобразование параметров:

$$\theta_q = \frac{1}{2} \left[\underline{\theta}_q + \overline{\theta}_q \right] + \frac{1}{2} \left[\overline{\theta}_q - \underline{\theta}_q \right] \sin \omega_q \quad (q = 1, 2, 3).$$

Служебный вектор параметров ω может меняться в неограниченных пределах.

Для стартовой точки Φ_0 выберем случайные величины из интервалов отклонений от коэффициентов регрессии: $h_0 \pm \sigma_{h_0}$, $h_1 \pm \sigma_{h_1}$.

Имея хорошее начальное приближение, можно оптимизировать Φ без ограничений: целевая функция (2) начнет расти раньше, чем шаг, регулируемый коэффициентом $0 < \gamma^{(i)} \leq 1$ ($i = 0, 1, \dots$) [6], окажется у границы допустимой области: $e^{\theta_0} > 0$, $e^{\theta_1} > 0$.

3. Статистические выводы по результатам оптимизации. При достижении точки оптимума Θ^* требуется проверить, что модель соответствует данным и что оценки параметров модели статистически значимы.

Критерий проверки остаточных отклонений данных от прогнозов модели включает поправку на смещение:

$$\eta = (n - (l + 1)/m)^{-1} \sum_{r=1}^n \sum_{k=1}^m \left| \varepsilon_{k,r}(\Theta^*) \right|^2 / \sigma_k^2.$$

Так как в $(n \times m)$ уравнениях модели имеется $(l + 1)$ подгоночных коэффициентов (l – размерность вектора оцениваемых параметров Θ), минимально необходимый объем выборки данных $n > (l + 1)/m$.

Модель будет отвергнута как не соответствующая данным с достоверностью не менее P , если $\eta > m/(1 - P)$ [6].

При хорошем согласии модели с данными наблюдений матрица $\mathbf{H}^{-1}(\Theta^*)$ приближается к ковариационной матрице параметров \mathbf{V}_Θ [6] пригодной для проверки статистической значимости и некоррелированности оценок в векторе Θ^* . Приемлемые оценки считаются измеренными значениями параметров модели объекта.

Проводя вычислительные эксперименты со случайным выбором допустимой стартовой точки Θ_0 , получим достаточную выборку измерений, чтобы построить доверительные интервалы для плотности дислокаций $\rho_d = e^{\theta_1} \cdot \frac{2\pi}{a^2}$ и степени порядка $\bar{\eta} = \theta_2$, а также нижнюю доверительную границу для периода порядка, поскольку $\overline{(\xi/\ell)} < e^{\theta_3/3}$.

Самокорректирующиеся по выборке измеренных значений параметров приближенные доверительные интервалы строятся методом, описанным в [1].

1.4. Проверка точности оценок параметров с помощью имитационных экспериментов

Выбрана лучшая по наблюдаемости дальнего порядка в ОЦК-кристаллах дифракционная линия $\{112\}$ в интервале, составляющем от теоретического периода долю $\alpha = 0.2$. Основные параметры модельного кристалла приведены в табл. 1.

Измеренные значения гармоник дифракционной линии – A_k моделируются независимыми нормально распределенными случайными величинами с теоретически рассчитанным математическим ожиданием \hat{A}_k и с одинаковым стандартным отклонением $\sigma = 0.01$. При генерировании данных для модельных кристаллов с использованием точных уравнений дифракции [1] усреднение по ансамблю систем дислокаций проводится методом Монте–

Карло. Для имитационных испытаний генерирована выборка наименьшего возможного в реальном эксперименте объема: $n = 4$.

В табл. 1 представлены результаты измерения параметров модельных кристаллов по начальным гармоникам дифракционной линии ($k_{lim} = 3$). Приведены средние доверительные интервалы для определяемых параметров, построенные по 60-ти независимым случайным выборкам объемом 60, извлекаемым из совокупной выборки 900 измеренных значений вектора Θ^* .

Состояния порядка в дислокационных структурах модельных кристаллов различимы, несмотря на смещения оценок. Только нижние доверительные границы периода порядка из-за смещений перекрываются, когда $\bar{\ell} > 2 \bar{\xi}$.

1.5. Замечания об идентифицируемости системы дислокаций с упорядочением

Метод определения дальнего порядка лучше подходит для реальных кристаллов. Для них отклонения прогнозов модели (1) относительно истинных начальных гармоник дифракционной линии становятся более равномерными.

При малых k/α погрешность аппроксимации точного дифракционного уравнения, построенного по модели объекта, меньше. Но там сильнее сказываются погрешности самой модели объекта с приближенным описанием поля смещений создаваемого петлями дислокаций в кристалле.

При расщепленных дислокациях погрешности модели объекта становятся

Таблица 1

Оценки параметров системы петель дислокаций с дальним порядком по данным имитационных экспериментов

Модельный кристалл	Заданные параметры порядка	Приближенные 90%-ые доверительные интервалы оценок	
		Плотность дислокаций, $\bar{\rho}_d$, см ⁻²	Степень порядка, $\bar{\eta}$
ОЦК (Fe)	$\bar{\eta} = 0.2, \bar{\ell} = 3 \bar{\xi}$	$[1.5; 2.2] \cdot 10^{11}$	$[0.22; 0.36]$
$\langle 111 \rangle \{112\}$	$\bar{\eta} = 0.5, \bar{\ell} = 2 \bar{\xi}$	$[1.7; 2.6] \cdot 10^{11}$	$[0.45; 0.61]$
$\rho_d = 10^{11}$ см ⁻²	$\bar{\eta} = 0.8, \bar{\ell} = \bar{\xi}$	$[2.5; 4.1] \cdot 10^{11}$	$[0.71; 0.82]$
$\bar{\xi}/a = 25$	— “ —	$[1.0; 1.4] \cdot 10^{11*}$	—

* Оценка плотности дислокаций в пренебрежении дальним порядком по старшим гармоникам дифракционной линии $\{110\}$ ($\alpha = 0.1$).

неприемлемыми для расчета начальных гармоник дифракционной линии.

В практическом примере мартенсита высокоуглеродистой легированной стали влияние расщепления двойникоующих дислокаций настолько значительное, что регрессионный анализ данных отвергает модель наблюдений (1). Кривая регрессии показывает, что с появлением микродвойников гармоники составляющих мультиплета $\{112\}$ при $k < 3$ ($\alpha = 0.22$) круто снижаются, далее убывание гармоник замедленное, как в модельных кристаллах с большим периодом дальнего порядка ($\bar{\ell} / \bar{\xi} > 3$).

Параметрическая идентификация дальнего порядка в дислокационной структуре мартенситных кристаллов с микродвойниками не осуществима.

В методе идентификации системы петель дислокаций по старшим гармоникам дифракционной линии, описанном в [1], эффекты дальнего порядка, если они значимы, добавляются к систематическим погрешностям модели наблюдений, и идентификация адаптируется к ним, что подтверждает оценка плотности дислокаций в табл. 1.

2. Система дислокаций в тетрагональных кристаллах мартенсита стали

1. Модель дифракционных наблюдений для тетрагональных кристаллов. При тетрагональной решетке кристаллов с внедренными атомами углерода преобразуются независимые переменные уравнения модели (1):

$$\left. \begin{cases} t = -\frac{c}{a} [C_0 + \Delta C_0] Q_{HKL}^2, & \Delta C_0 = 12.4r + 7.75r^2, \\ x_k = \frac{c}{a} [C_1 + \Delta C_1] Q_{HKL} (k/\alpha), & \Delta C_1 = 1.26r, \\ y_k = \frac{1}{4} \frac{c}{a} [C_2 + \Delta C_2] (k/\alpha)^2, & \Delta C_2 = 5.20r; \end{cases} \right\} \begin{cases} Q_{HKL} = \sqrt{H^2 + K^2 + \left(\frac{a}{c}\right)^2 L^2}, \\ \alpha = \left(\frac{a}{a_0}\right) \alpha(a_0), \\ 0 < r = \left(\frac{c}{a}\right) - 1 < 0.09. \end{cases}$$

Здесь $\left(\frac{c}{a}\right)$ – степень тетрагональности, a_0 – период кубической решетки кристаллов.

Численные значения кристаллогеометрических коэффициентов для ОЦК–кристаллов приведены выше. (Для еще одного семейства скольжения $\langle 111 \rangle \{112\}$ $C_1 = 9.493694$, $\Delta C_1 = 2.12r$.)

С появлением тетрагональности кристаллов измеренная плотность дислокаций $\rho_d = e^{\theta_1} \cdot \frac{2\pi}{a} \left(\frac{a}{c}\right)$, где θ_1 – компонента вектора параметров Θ в модели наблюдений (1).

2. Параметры модели объекта, измеримые в различных областях дифракционного пространства. В работе [2] представлен метод оптимального оценивания гармоник приближенной формы линий, образующих дифракционный мультиплет, когда решетка кристаллов тетрагональная.

Старшие гармоники выявленных составляющих мультиплета $\{110\}$ позволяют измерить плотность дислокаций $\bar{\rho}_d$ и определить верхнюю доверительную границу среднего радиуса петель $\bar{\xi}$ [2].

Из начальных гармоник составляющих мультиплета $\{112\}$ вместе со средней плотностью дислокаций $\bar{\rho}_d$ оценивается степень порядка $\bar{\eta}$ и определяется нижняя доверительная граница периода порядка $\bar{\ell} / \bar{\xi}$.

3. Полученная информация из данных дифракционных наблюдений над объектом. Оптимальный дифракционный эксперимент для структурного анализа описан в [1]. Параметры рентгеновской съемки опытного образца стали с концентрацией углерода около 1.0 вес. % те же, что в [2].

Рис 1. показывает рассеяние измеренных гармоник профиля линий в дифракционном мультиплете $\{112\}$ ($\alpha = 0.18$). Объем выборки $n = 20$. Гармоники $\{A_k\}$ ($k \leq 6$) статистически значимы с достоверностью 99.9 % по оценкам истинной дисперсии $\sigma_{A_k}^2$ [1]. Кривая регрессии на рис. 1 отмечает интервал наблюдаемости дальнего порядка в системе дислокаций.

**Дальний порядок в дислокационной структуре мартенситного превращения
углеродистой стали**

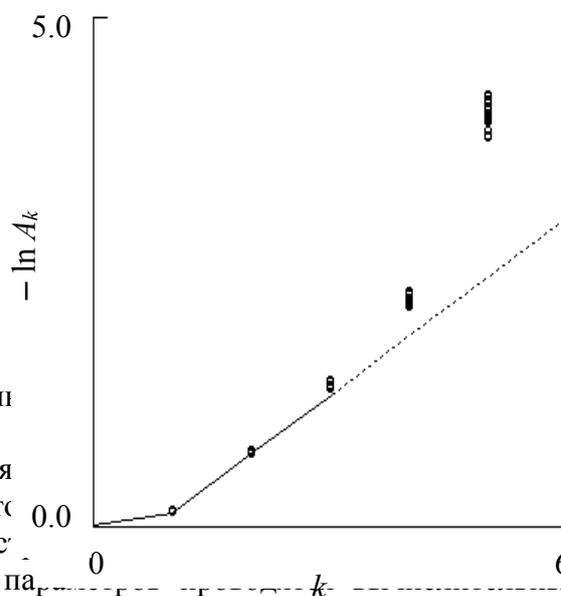


Рис. 1. Рассея

При имеющихся образцах углеродистой стали в дислокационной структуре

Для измерения параметров k эксперименты на модели (1), представляющие собой поиск оптимума целевой функции (2) из случайных стартовых точек равномерно распределенных в допустимой области пространства параметров объекта.

На рис. 2 представлено распределение измеренных значений степени порядка в размещении петель дислокаций по параллельным плоскостям скольжения. Объем накопленной выборки данных 9×10^3 .

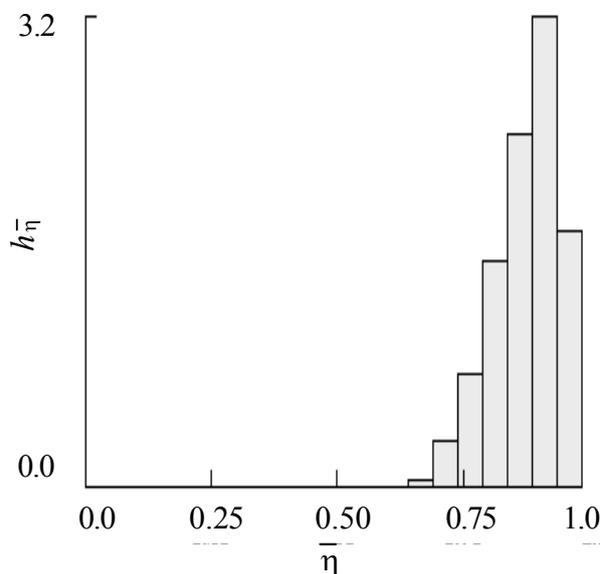


Рис. 2. Выборочно

В табл. 2 приведены построенные по выборке измеренные

ни порядка в дислокационной структуре этой стали для измеряемых параметров, извлекаемым из совокупной

Измеряемый параметр	Приближенный 90%-ый доверительный интервал оценок	Наиболее правдоподобные оценки по максимумам гистограмм
Плотность дислокаций, $\bar{\rho}_d$	$[0.7; 0.8] \times 10^{12}$	$[0.6; 0.7] \times 10^{12*}$
Степень порядка, $\bar{\eta}$	$[0.88; 0.91]$	$[0.85; 0.88]^*$

* Оценки по начальным гармоникам составляющих мультиплета $\{110\}$.

Оценка плотности дислокаций соответствует ожидаемой по анализу старших гармоник дифракционного мультиплета $\{110\}$ [2].

Начальные гармоники составляющих мультиплета $\{110\}$, измеренного в большом интервале ($\alpha = 0.23$) на образце с двойной закалкой, где доля остаточного аустенита понизилась до $\sim 4\%$, выдали близкие интервальные оценки параметров порядка; наиболее правдоподобные оценки те же, что из данных анализа мультиплета $\{112\}$ (табл. 2).

С достоверностью не менее 9% нижняя доверительная граница периода порядка в системе петель дислокаций $\bar{\ell}/\bar{\xi} \gtrsim 1$. Оценка подтверждается при анализе начальных гармоник составляющих мультиплета $\{110\}$.

4. Допустимость выявленного дальнего порядка в дислокационной структуре кристаллов мартенсита. Появление дальнего порядка по нормали к плоскостям скольжения, содержащим скопления петель дислокаций, становится понятным в континуальном приближении – при рассмотрении волны колебаний упругой среды. Согласно уравнению движения упругой среды в направлении распространения упругой волны происходят сжатия и растяжения, а в плоскости перпендикулярной к этому направлению смещения сдвиговые ($\text{div } \mathbf{u} = 0, \text{rot } \mathbf{u} \neq 0$, где \mathbf{u} – вектор поперечных смещений, сопровождающихся «вращениями»), именно как в плоскостях скольжения в кристалле [7].

Заключение

В кристаллах мартенсита выявилась периодическая дислокационная структура, рождающая образ застывшей волны колебаний решетки.

Известен процесс испускания длинноволновых фононов (квантов колебаний решетки) «горячими» электронами при низкотемпературной релаксации системы [8].

Если наблюдаемый период порядка ℓ соизмерим с длиной волны фононов, то петли дислокаций сопоставимого с ней радиуса $\xi \sim \ell$ гасят зародившие их фононы [9].

Возникает представление о квантовом фазовом превращении, связанном с преобразованием симметрии кристаллов. И оно может быть проверено экспериментально.

От внезапного теплового возмущения в электронной системе кристалла происходят квантовые переходы между энергетическими уровнями. Возбужденные ими фононы двигают решетку к устойчивому состоянию и исчезают. В равновесии поверхности равной энергии электронов, построенные в обратном пространстве кристалла, должны обладать полной симметрией решетки [10].

(При внедренных атомах углерода в решетке кристалла существует высокая вероятность также локальных электрон-фононных взаимодействий [11].)

Внешнее магнитное поле смещает разрешенные условиями симметрии энергетические состояния электронов [12], значит, оно должно влиять на мартенситное превращение во всех металлах.

Теория квантового мартенситного превращения, к которой привел анализ системы дислокаций возникающей в кристаллах, в принципе допускает экспериментальную проверку известным методом [13].

Примечания

Анализ данных наблюдений и оценивание параметров объекта осуществлены с использованием обновленной системы автоматизации дифракционных исследований, служащей дополнением к монографии [1].

Изготовление опытных образцов и оптимальные по надежности получаемой информации дифрактометрические эксперименты выполнены высококвалифицированным специалистом Козловым Дмитрием Александровичем.

Литература

1. *Satdarova F.F.* Diffraction Analysis of Deformed Metals: Theory, Methods, Programs. San Francisco: Academus Publishing. 2019. 219 p.
2. *Сатдарова Ф.Ф.* Дислокационная структура мартенситного превращения углеродистой стали // *Физика металлов и металловедение*. – 2016. – Т. 117. – № 4. – С. 369–377.
3. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. – Москва: Наука, 1974. 832 с.
4. *Яноши Л.* Теория и практика обработки результатов измерений: Пер. с англ. Клепикова Н.П. – Москва: Мир, 1968. – 462 с.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: В 10 т. Т. 5: Статистическая физика. Часть 1; 3-е изд., доп. – Москва: Наука, 1976. – 583 с.
6. *Бард Й.* Нелинейное оценивание параметров: Пер. с англ. /Под ред. Горского В.Г. – Москва: Статистика, 1979. – 349 с.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: В 10 т. Т. 7: Теория упругости; 3-е изд., исправл. и доп. – Москва: Наука, 1965. – 204 с.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: В 10 т. Т. 10: Физическая кинетика. – Москва: Наука, 1979. – 528 с.
9. *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах: Пер. с англ. /Под ред. Инденбома В.Л. – Москва: Мир, 1985. – 352 с.
10. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике: В 2 т. Пер. с англ. /Под ред. Желудева И.С. и Славнова Д.А. – Москва: Мир, – 1983. – Т. 2. – 416 с.
11. *Рейх К. В., Эйдельман Е. Д.* Электрон-фононное взаимодействие в локальной области. *Физика твердого тела*. – 2011. – Т. 53. – Вып. 8. – С. 1618–1620.
12. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела: Пер. с англ. /Под ред. Бонч-Бруевича В.Л. Москва: Мир, 1966. – 416 с.
13. *Счастливец В.М., Мирзаев Д.А., Калетина Ю.В., Фокина Е.А.* Природа влияния магнитных полей на температуру начала мартенситного превращения в сплавах железа. *Физика твердого тела*. – 2016. – Т. 58. – Вып. 2. – С. 327–335.