

Н. М. В л а с о в (Подольск, РОНЦ МГОУ). **Фазовые превращения в окрестности структурных дефектов с разной сингулярностью.**

Фазовые превращения в окрестности структурных дефектов обусловлены их взаимодействием с примесными атомами. Потенциал взаимодействия (энергия связи) атома примеси с полем напряжений структурного несовершенства определяется известным соотношением [1]

$$V = -\frac{\sigma_{ll}}{3} \delta v,$$

где σ_{ll} — первый инвариант тензора напряжений структурного дефекта, δv — изменение объема кристалла при размещении атома примеси. Для $\sigma_{ll} > 0$ (положительная дилатация) и $\delta v > 0$ (атом примеси увеличивает параметр кристаллической решетки) потенциал V принимает отрицательное значение. Это соответствует притяжению примесного атома к области растягивающих напряжений и его вытеснению из области напряжений сжатия. Если концентрация атомов примеси в окрестности структурного дефекта превышает предел растворимости при данной температуре, то образуются зародыши новой фазы. Их дальнейший рост осуществляется диффузионным подводом атомов примеси. На перемещающейся межфазной границе концентрация атомов примеси меняется скачкообразно: $C = C_p$ для новой фазы и $C = C_1$ в окружающей матрице ($C_p > C_1$, $C_1 < C_0$, где C_0 — исходная концентрация атомов примеси).

Кинетика роста зародыша новой фазы в окрестности структурных дефектов с разной сингулярностью определяется из решения следующей задачи [2]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} &= \Delta C + \frac{\nabla(C\nabla V)}{kT}, \\ C(R_1, t) &= C_p \quad (0 < t \leq \infty), \quad C(r, 0) = C_0 \quad (r \geq R_0), \\ C(R, t) &= C_0 \quad (0 < t \leq \infty), \\ (C_p - C_1) \frac{dR_1}{dt} &= D \left(\frac{\partial C}{\partial r} + \frac{C}{kT} \nabla V \right) r = R_1, \end{aligned} \tag{1}$$

где D — коэффициент диффузии атомов примеси, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, R_0 — радиус зародыша новой фазы, $2R$ — среднее расстояние между структурными дефектами, R_1 — текущий радиус новой фазы. Скорость перемещения границы новой фазы находится из уравнения массового баланса на межфазной границе.

Физический смысл начального и граничных условий задачи (1) очевиден. В начальный момент времени концентрация атомов примеси в окрестности зародыша новой фазы постоянна и равна среднему значению C_0 . Такая же концентрация атомов примеси поддерживается и при $r = R$. Физически это означает, что по мере роста новой фазы на границу $r = R$ поступают атомы примеси от соседних структурных дефектов с дилатацией противоположного знака. На межфазной границе сохраняется постоянная концентрация атомов примеси. Это означает, что межфазная граница мгновенно поглощает атомы примеси и далее происходит фазовое превращение.

Решение уравнения диффузии задачи (1) для разных потенциалов V представляет определенные математические трудности. Однако для исследования начальной стадии фазового превращения можно не учитывать градиент концентрации атомов примеси, а ограничиться только градиентом потенциала V . Такой подход неоднократно использовался для разных структурных несовершенств [3]. В уравнении диффузии не учитывается слагаемое ΔC , что приводит к дифференциальному уравнению первого порядка для определения примесных агрегаций. В предлагаемой работе, представленной данным докладом, начальная стадия фазового превращения достаточно

просто находится из уравнения массового баланса задачи (2) без решения уравнения диффузии.

Исследована начальная стадия кинетики фазовых превращений в окрестности структурных дефектов с разной сингулярностью. Для краевой дислокации имеем $V \sim r^{-1}$ (без учета угловой зависимости). Это приводит к следующей временной зависимости поперечного сечения новой фазы: $\sim (Dt)^{2/3}$. Для вершины микротрещины получим $V \sim r^{-1/2}$ (без учета угловой зависимости), что дает следующую начальную стадию кинетики фазового превращения: $\sim (Dt)^{4/5}$. Для клиновой дисклинации с логарифмической сингулярностью изменение поперечного сечения новой фазы подчиняется закону $\sim (Dt)$. И, наконец, для стереодисклинации с логарифмической сингулярностью объем новой фазы изменяется по закону $\sim (Dt)^{3/2}$. Учет угловой зависимости уменьшает область фазового превращения вследствие увеличения пути миграции атомов примеси.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985, 351 с.
2. *Власов Н. М., Зазноба В. А.* Фазовые превращения в окрестности тройных стыков специальных границ зерен. — Доклады РАН, 1998, т. 363, № 4, с. 472–474.
3. *Chou Y. T., Wu R. S., Wei R. P.* Time-dependent Flow of Solute Atoms near a Crack Tip. — Scripta Metallurgica, 1978, v. 12, p. 249–254.