

**МЕХАНИЗМ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ,  
ОБУСЛОВЛЕННЫЙ НЕРАВНОВЕСНОСТЬЮ  
ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЫ**

*М.П.Кашенко, Р.И.Мици*

Мартенситные превращения, протекающие при конечных скоростях изменения температуры, предлагается рассматривать как следствие индуцированного излучения электронами акустических фононов. Проанализированы условия генерации фононов при переходах электронов между состояниями с максимальной инверсной населенностью.

В сталях, во многих переходных металлах и их сплавах реализуется мартенситное превращение (МП) – бездиффузионный процесс перестройки решетки. Типичной является ситуация, когда охлаждение поверхности образца (закалка) при прямом МП или нагрев при обратном МП ведутся с конечными скоростями.

Металл (для простоты считаем его парамагнитным) – есть неравновесная система взаимодействующих электронов и фононов. Степень неравновесности определяется градиентом локальной температуры –  $\nabla T(\mathbf{r}, t)$ , в общем случае зависящим как от радиуса вектора  $\mathbf{r}$ , так и от времени  $t$ . Полагая зонное описание справедливым, обозначим  $f_{j\mathbf{p}}$  неравновесную функцию распределения электронов в состоянии  $(j\mathbf{p})$ , где  $j$  – номер зоны,  $\mathbf{p}$  – квазиимпульс электрона с энергией  $\epsilon_{j\mathbf{p}}$ . При  $\nabla T \neq 0$  имеются электронные состояния с инверсной населенностью, причем максимальная инверсная населенность реализуется между состояниями электронов с антипараллельными квазиимпульсами  $\mathbf{p}' \uparrow \mathbf{p}$  направленными вдоль и против  $\nabla T$ . Это иллюстрирует рис. 1, на котором приведены равновесная  $f_{\mathbf{p}}^{\circ}$  и неравновесная  $f_{\mathbf{p}}$  функции (см. § 3.1 в [1]):

$$f_{\mathbf{p}}^{\circ} = \left\{ \exp \left[ \frac{\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{kT} \right] + 1 \right\}^{-1}, \quad f_{\mathbf{p}} - f_{\mathbf{p}}^{\circ} \approx \frac{\partial f_{\mathbf{p}}^{\circ}}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}}} \frac{(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}{T} \vec{\Lambda}_{\mathbf{p}} \vec{\nabla} T, \quad (1)$$

где  $\mu$  – уровень Ферми,  $\vec{\Lambda}_{\mathbf{p}}$  – векторная длина свободного пробега электрона с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$ . Из стандартного кинетического уравнения для фоновой функции распределения (см. § 1.1, § 1.14 в [1]) следует, что переходы электронов между состояниями  $(i\mathbf{p}')$  и  $(j\mathbf{p})$  с инверсной населенностью приводят к генерации продольных акустических фононов с энергией  $h\nu_{\mathbf{q}}$ , если

$$f_{i\mathbf{p}'} - f_{j\mathbf{p}} > 0 \quad (2)$$

и выполняются законы сохранения

$$\epsilon_{i\mathbf{p}'} - \epsilon_{j\mathbf{p}} - h\nu_{\mathbf{q}} = 0, \quad \mathbf{p}' - \mathbf{p} - \mathbf{q} = 0, \mathbf{Q}, \quad (3)$$

где равенство нулю или вектору обратной решетки  $\mathbf{Q}$  отвечает нормальному процессу рассеяния  $N$  или процессу переброса  $V$ .

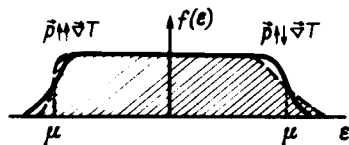


Рис. 1. Функции распределения электронов  $f_{\mathbf{p}}^{\circ}$  при  $\nabla T = 0$  (сплошная линия) и  $f_{\mathbf{p}}$  при  $\nabla T \neq 0$  (пунктирная линия)

Из рисунка видно, что переходы электронов над и под уровнем Ферми ( $\epsilon_{\mathbf{p}'} > \mu$  и  $\epsilon_{\mathbf{p}'} < \mu$ ) могут приводить к генерации фононов с квазиимпульсами  $\mathbf{q}$  соответственно против и вдоль  $\vec{\nabla} T$ . Однако осуществление генерации, связанное с требованием совместности условий (2) и (3), при реальных значениях  $\nabla T$  возможно не при произвольном положении уровня Ферми. Полагая  $h\nu_{\mathbf{q}} (kT)^{-1} \ll 1$ , что для частот  $\nu_{\mathbf{q}} \ll$

$\leq 10^{10}$  и выполняется вплоть до  $T = 5^\circ$ , условие генерации (2) с учетом (1) и (3) представим в виде

$$2|\vec{\Lambda}\vec{\nabla}T|T^{-1} - \tau_{\Pi} > 0, \quad \tau_{\Pi} = h\nu_q(|\epsilon_p \rho - \mu|)^{-1}(1 + |\vec{\Lambda}\vec{\nabla}T|T^{-1}), \quad (4)$$

где  $\vec{\Lambda} = \vec{\Lambda}_p \approx -\vec{\Lambda}_p$ . Оценим диапазон генерируемых частот. Полагая  $|\epsilon_p \rho - \mu| \approx kT$ ,  $T = 300^\circ$ ,  $\Lambda = 10^{-6}$  см,  $\nabla T = 10^6$  град·см<sup>-1</sup> (большие скорости изменения температуры), из (4) имеем  $0 < \nu_q < 10^{10}$  иц. Значит даже при больших  $\nabla T$  максимальной из частот  $\nu_q$  соответствует волновое число  $q$  на два — три порядка меньше  $q_{max}$  на границе 1 зоны Бриллюэна ( $\nu_q^{max} \approx 10^{12} \div 10^{13}$  иц). Тогда из закона сохранения импульса следует, что генерация фононов при переходах электронов между состояниями  $p \downarrow \downarrow \nabla T$ ,  $p \uparrow \uparrow \nabla T$  возможна как за счет  $N$  так и  $V$  процессов, если уровень Ферми лежит вблизи дна или потолка электронной зоны. Обе из этих возможностей легко реализуются в переходных металлах и их сплавах (что объясняет типичность МП в них) при  $d \rightarrow d$  (или  $f \rightarrow f$  для редких земель) переходах электронов, поскольку  $d$  (или  $f$ ) зоны узкие и уровень Ферми их пересекает. Участие  $s \rightarrow s$  и  $d \rightarrow s$  ( $f \rightarrow s$ ) переходов в генерации фононов менее типично и наиболее вероятно для тех направлений в обратном пространстве, где  $s$  зона узка. Эти переходы могут быть только  $V$  типа (дно  $s$  зоны всегда существенно ниже  $\mu$ ) и связаны с анизотропией энергетического спектра  $s$  электронов.

Таким образом, МП можно рассматривать как следствие генерации фононов в процессе неравновесного изменения температуры исходной фазы. Переход в режим генерации по аналогии с излучением лазера интерпретируется согласно Хакену (см. приложение к [2]), как фазовый переход второго рода для поля излучения, связанный с появлением отличных от нуля амплитуд волн смещений. МП, протекающее, как правило, с ярко выраженными признаками перехода первого рода, реализуется при достижении этими амплитудами за некоторое пороговое время после начала охлаждения или нагрева пороговых значений (условие термодинамической неустойчивости фазы, испытывающей МП, считается выполненным [3]).

Авторы выражают благодарность Ю.А.Изюмову и В.Е.Найшу за обсуждение работы.

Уральский  
политехнический институт  
им. С.М.Кирова

Поступила в редакцию  
24 июня 1977 г.  
После переработки  
2 августа 1977 г.

### Литература

- [1] Б.М.Могилевский, А.Ф.Чудновский. Теплопроводность полупроводников. М., изд. Наука, 1972, § 1.1, § 1.14, § 3.1.
- [2] М.Лэкс. Флуктуации и когерентные явления. М., изд. Мир, 1974, стр. 277.
- [3] М.П.Кашенко, Р.И.Мишч. ФТТ, 19, 329, 1977.