

PACS: 05.70. Ln; 61.72.jd. 61.72 Qq, 62.20.fg, 81.30.30.Kf

**THE DUALISM OF THE VACANCIES NATURE IN NONEQUILIBRIUM SYSTEMS****I.N. Laptev<sup>1</sup>, O.O. Parkhomenko<sup>1,2</sup>, V.I. Tkachenko<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>*National Scientific Center “Kharkiv Institute of Physics and Technology”  
1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine*<sup>2</sup>*V.N. Karazin Kharkov National University  
4 Svobody Sq., Kharkov, 61022, Ukraine  
e-mail: [parkhomenko@kipt.kharkov.ua](mailto:parkhomenko@kipt.kharkov.ua)*

Received December 14, 2015

Based on the method of phase diagrams martensitic transformations, the analysis of conditions of occurrence of martensitic transformations (MP) at different temperatures with the participation of vacancies in pure iron. Built versus temperature MT values of the normal stress of the MP and the concentration of vacancies in a wide range of temperatures (up to 900°C). Sharp the fracture shows the change of mechanisms of accumulation of vacancies in iron, required for MP: how do point defects at temperatures below 547°C, and as the strains of the lattice in the form of free volume at higher temperatures (dualism). At the atomic level the mechanism of occurrence of vacancies during reverse martensitic transformation. The quantum-mechanical interpretation of the non-equilibrium martensitic transformations associated with localization (vacancy-point defect) – delocalization (as the longitudinal waves of elastic deformation).

**KEY WORDS:** non-equilibrium systems, martensitic transformation, stress state, vacancies, iron, quantum-mechanical interpretation

**ДУАЛІЗМ ПРИРОДИ ВАКАНСІЙ В НЕРАВНОВЕСНИХ СИСТЕМАХ****І.Н. Лаптев<sup>1</sup>, А.А. Пархоменко<sup>1,2</sup>, В.І. Ткаченко<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»  
ул. Академічеська 1, г. Харків 61108, Україна*<sup>2</sup>*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
пл. Свободи 4, г. Харків, 61022, Україна*

На основе метода фазовых диаграмм мартенситных превращений, проведен анализ условий протекания мартенситных превращений (МП) при различных температурах с участием вакансий в чистом железе. Строились зависимости температуры МП от величины нормальных напряжений МП и концентрации вакансий, в широком интервале температур (вплоть до 900°C). Резкий излом зависимости свидетельствует о смене механизмов накопления вакансий в железе, необходимых для МП: как точечных дефектов при температуре ниже 547°C, и как растяжений решетки в виде свободного объема при более высоких температурах (дуализм). На атомном уровне показан механизм возникновения вакансий при обратном мартенситном превращении. Предложена квантово-механическая интерпретация неравновесных мартенситных превращений, связанная с процессами локализации (вакансия-точечный дефект) – делокализации (продольная волна упругих деформаций).

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** неравновесные системы, мартенситные превращения, напряженное состояние, вакансии, чистое железо, квантово-механическая интерпретация

**ДУАЛІЗМ ПРИРОДИ ВАКАНСІЙ У НЕРІВНОВАЖНИХ СИСТЕМАХ****І.Н. Лаптев<sup>1</sup>, О.О. Пархоменко<sup>1,2</sup>, В.І. Ткаченко<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»  
вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*<sup>2</sup>*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
пл. Свободи 4, м. Харків, 61022, Україна*

На основі розвинутого раніше методу фазових діаграм мартенситних перетворень, проведено аналіз умов протікання мартенситних перетворень (МП) при різних температурах за участю вакансій у чистому залізі. Будувались залежності температури МП від значень нормальних напружень мартенситних перетворень та концентрації вакансій, у широкому інтервалі температур (до 900°C). Різкий перегин цієї залежності свідчить про зміну механізмів накопичення вакансій у залізі, які необхідні для МП: як точкових дефектів при температурах нижче 547°C, та як розтягнень кристалічної ґратки у вигляді вільного об'єму за більш високих температур (дуалізм). На атомному рівні показано механізм виникнення вакансій при зворотному мартенситному перетворенні. Запропоновано квантово-механічну інтерпретацію нерівноважних мартенситних перетворень, яка базується на процесах локалізації (вакансія-точковий дефект) – делокалізації (подовжна хвиля пружних деформацій).

**КЛЮЧЕВІ СЛОВА:** нерівноважні системи, мартенситні перетворення, напружений стан, вакансії, чисте залізо, квантово-механічна інтерпретація

В 1955 году А.В. Степанов высказал идею о том, что любое, даже хрупкое разрушение связано с дислокационными механизмами. В свою очередь, хорошо известны и диффузионные механизмы разрушения, например, за счет зернограничной пористости. Поэтому, принципиально важным является вопрос – могут ли реализовываться бездислокационные и бездиффузионные механизмы зарождения трещин и разрушения?

Недавно был предложен такой механизм, связанный с реализацией чисто упругих деформаций и основным видом фазовых превращений в сплавах железа – мартенситными превращениями [1]. В этом случае атомы упруго смещаются в определенных кристаллографических направлениях лишь на небольшую долю межатомных расстояний, и ни о какой пластике или диффузии речь идти не может. В этой работе было высказано предположение, что релаксация упругих напряжений в облучаемых сплавах на основе железа возможна в результате мартенситных превращений (МП), в которых объемные несоответствия образующихся фаз компенсируются выделением или поглощением вакансий. Впервые роль вакансий в МП была показана в работе [2].

Следует отметить, что, несмотря на длительную историю изучения свойств вакансий в твердом теле, она содержит множество противоречивых фактов, что связано с трудностью их непосредственного наблюдения. Так, если равновесная концентрация вакансий даже при предплавленных температурах достигает величин всего лишь порядка 0,1%, то неравновесная концентрация вакансий в реальных системах, учитывая экспоненциальную зависимость концентрации вакансий от напряжений, может быть намного выше [3].

### МЕТОД ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

В работе [1] предложен новый подход к описанию и исследованию условий образования мартенсита в железе и сплавах на его основе под влиянием температур, давлений и легирования, в том числе и вакансиями, которые могут быть внесены закалкой, деформацией или облучением. Этот подход был назван методом фазовых диаграмм мартенситных превращений (ФДМП).

В основу кристаллографии мартенситных превращений была положена схема Бейна (рис.1а). Исходя из принципа наименьшего объема фазового несоответствия, мы остановились на следующих способах деформации: в сфере (рис.1б, инварианта – расстояние  $D$  между атомами в направлении  $\langle 112 \rangle$ ), и между параллельными плоскостями (рис.1с, инварианта –  $h$  между плоскостями  $(110)$ ). Для каждой из конфигураций изменение относительного объема при превращении ( $\Delta V/V$ ) может быть вычислено как функция угла  $\varphi$ , который составляет направление  $\langle 001 \rangle$  элементарной объемно центрированной ячейки (в феррите, и аустените) с предполагаемой кристаллографической плоскостью сдвига. Этот угол в любой из конфигураций изменяется в пределах от  $35^{\circ}15'$  до  $45^{\circ}$ .

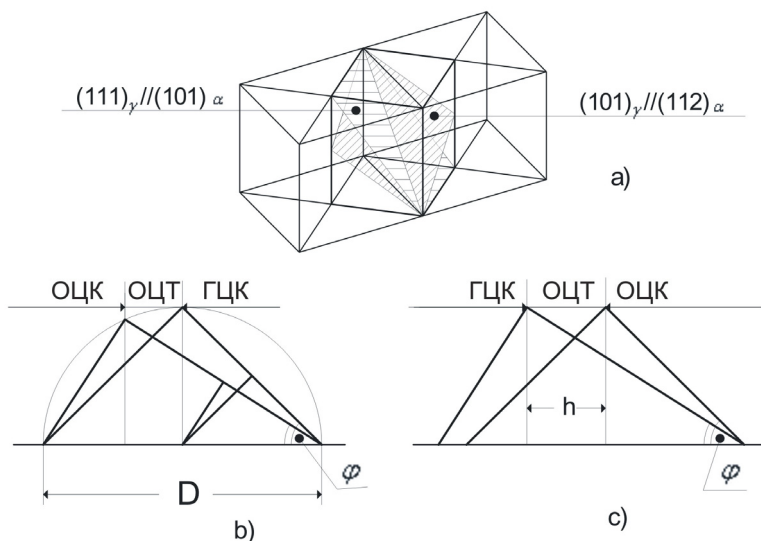


Рис. 1. Схемы деформирования кристаллических решеток в процессах фазовых ГЦК-ОЦК превращений: а) объем Бейна; б) деформация в сфере при сдвиге вдоль плоскости образования мартенсита  $(101)_{\gamma} // (112)_{\alpha}$ ; с) при сдвиге между параллельными плоскостями  $(111)_{\gamma} // (101)_{\alpha}$

Исследования геометрии полиморфных ГЦК $\rightleftharpoons$ ОЦК фазовых превращений позволили построить температурно-силовое поле и в нем диаграмму МП переходов в монокристаллах простейшей системы «железо-вакансии» (рис.2).

Диаграмма имеет вид петли гистерезиса, размещается в поле между изотермами  $50$  и  $912^{\circ}\text{C}$  в области давлений от  $0$  до  $12,5$  ГПа и является линией ГЦК $\rightleftharpoons$ ОЦК фазовых превращений в монокристаллах чистого железа, проходящих через непрерывный спектр ОЦТ состояний под действием упругих напряжений и (или) температур. Если вектор действующих упругих напряжений ( $\sigma_{\min}$ ) или любая из его составляющих ( $\sigma_n$  или  $\sigma_r$ ) по величине оказываются равными расстоянию между ветвями петли, превращение осуществляется скачком с одной ветви петли на другую. Это и есть процесс образования мартенсита. Направление и величина силового вектора однозначно связаны с основными параметрами  $P$ ,  $T$  и  $V$ , определяющими термодинамику процесса мартенситного превращения.

Петля гистерезиса фазовых ОЦК↔ГЦК превращений и принципы ее построения позволяют однозначно классифицировать любой вид мартенсита, как фазовое превращение под напряжением.

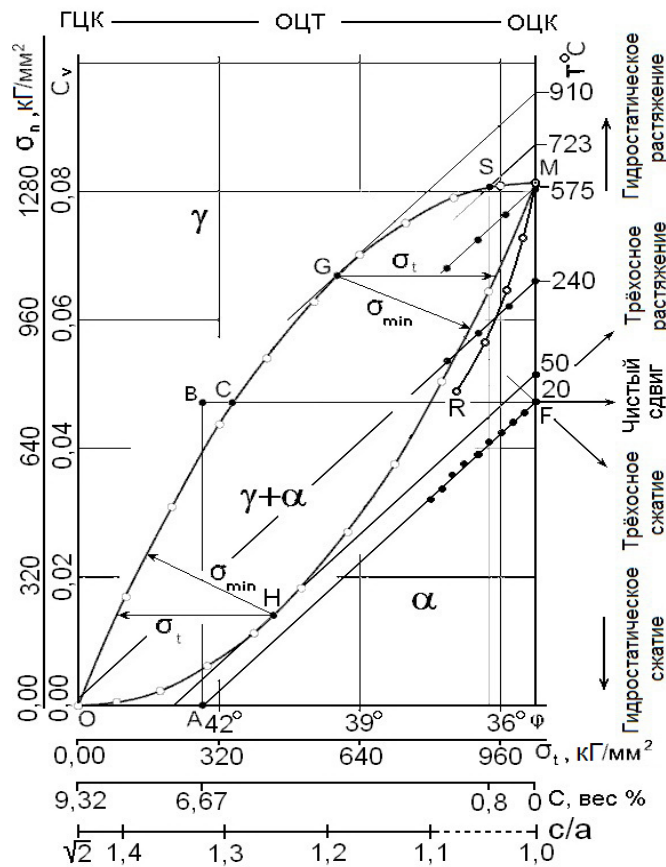


Рис.2. Диаграмма мартенситных фазовых  $\gamma \rightleftharpoons \alpha$  превращений в монокристаллах железа в полях упругих напряжений. Пояснения в тексте.

Эти напряжения должны быть упругими, поскольку процесс образования мартенсита не только бездиффузионный, но и бездислокационный. Следовательно, тензор действующих напряжений должен быть всесторонним сжимающим или растягивающим, либо напряженное состояние должно соответствовать «плоско-деформированному». В неравновесных системах рост этих напряжений должен порождать тетрагональные искажения кристаллической решетки. Степень искажений, при которых система теряет устойчивость и в ней осуществляется мартенситный переход, определяется положением энергетических экстремумов на петле гистерезиса, как точка, в которой  $dE/dx=0$  [4]. Таким образом, при любой температуре независимо от способа создания напряжений и искажений (закалка, деформация, облучение, легирование и др.), если в неравновесной системе выполняются указанные условия, то в ней реализуется мартенситный  $\gamma \rightleftharpoons \alpha$  фазовый переход.

Целью данной работы было – дальнейшее выяснение роли вакансионной подсистемы в мартенситных превращениях в чистом железе, с помощью метода фазовых диаграмм мартенситных превращений (ФДМП).

### КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ ВАКАНСИЙ

Мы представляем чистое железо в неравновесном состоянии как бинарный пересыщенный сплав «железо-вакансии». Такой сплав не может быть однородным. Градиенты температур и напряжений в естественных условиях порождают анизотропию распределения вакансий по кристаллографическим плоскостям и их концентрационные волны. Образование таких волн подчиняется теории спинодального распада твердых растворов [4].

Концентрационные волны вакансий формируют в кристаллах области сжатий и растяжений. В высокоскоростных процессах (нагрев, охлаждение, гидростатическое сжатие или растяжение) изменением концентраций вакансий за счет классических процессов их образования (механизмы Френкеля или Шоттки) можно пренебречь. Это, однако, не означает, что вакансионная подсистема остается неизменной. Простейшая схема, представленная на рис. 3, позволяет понять, как влияет внешнее воздействие на концентрацию вакансий и напряжения в волне.

Как следует из схемы (рис.3), приложенные к системе извне, например, напряжения сжатия (аналог охлаждения) снижают уровень термически равновесной концентрации вакансий. При этом, концентрационная волна (синяя синусоида) изменяет свое положение, поднимаясь над уровнем равновесия (красная синусоида). Общая концентрация вакансий в волне не меняется, но в гребне волны избыточная концентрация возрастает.

При растяжении (аналог нагревания) системы процесс развивается в обратном направлении: волна смещается вниз по отношению к термически равновесному уровню концентрации вакансий (черная синусоида), что способствует росту вакансионного недосыщения в обратном гребне волны. Таким образом, внешние напряжения действуют как насос, преобразуя вакансии из одного природного состояния в другое: при сжатии вакансии в виде точечных дефектов образуются за счет коллапса деформаций растяжения, а при растяжении точечные дефекты растворяются в кристалле, превращаясь в деформации растяжения [3].

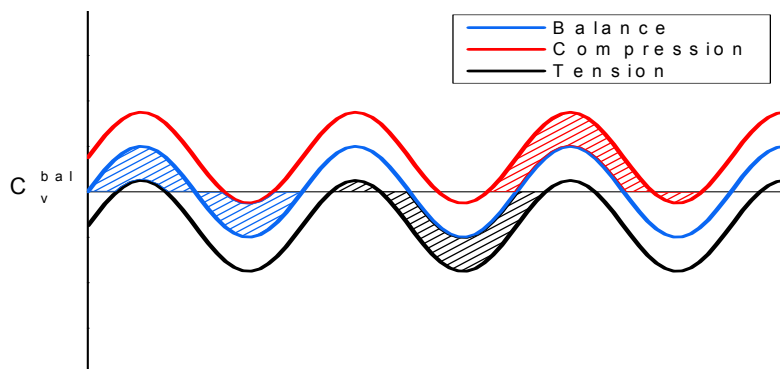


Рис.3. Схема пространственного распределения вакансий в виде концентрационной волны.  
Пояснения в тексте.

На самом деле, волны концентрационной неоднородности вакансий не синусоидальные, как это показано на рис. 3, а представляют собой плоские стоячие волны. Движение в них ограничено изменением амплитуды фононов.

Поскольку внешнее воздействие – тоже плоская волна деформаций, только движущаяся через кристалл, то схема, по сути, демонстрирует интерференцию плоских волн с увеличением или уменьшением амплитуд колебаний атомов в стоячих волнах концентрационных неоднородностей. При этом, фононы оказываются модулированными длиной этих волн и поляризованными в направлении, действующих в волне, сжимающих или растягивающих напряжений. Волны неоднородностей могут различаться и концентрацией вакансий и длиной, поэтому не удивительно, что процесс образования мартенсита обычно протекает в каком-то интервале температур или напряжений.

### АТОМНАЯ ПЕРЕСТРОЙКА РЕШЕТКИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НАПРЯЖЕНИЙ В ЖЕЛЕЗЕ

По определению, в условиях всестороннего сжатия или растяжения (что равносильно напряженному состоянию материала в плоской волне) при определенной величине тетрагональных искажений ГЦК или ОЦК кристаллической решетки, релаксация напряжений в ней возможна только мартенситным фазовым превращением. На примере обратного мартенситного превращения рассмотрим подробнее процесс атомной перестройки кристаллической решетки железа, которая показана на рис. 4.

На рисунке, в виде регулярной квадратной структуры, представлена плоскость (100) исходной (до деформации) решетки  $\alpha$ -железа с атомами в каждой точке пересечения линий. К системе извне приложены возрастающие нормальные напряжения растяжения. Эти напряжения порождают продольную волну деформаций.

Как сказано выше, интерференция продольных волн приводит к росту амплитуды растяжений в стоячей волне в направлении  $\sigma_n$ . Продольная волна, в свою очередь, создает поперечную волну и сдвиговые деформации в направлении  $\sigma_t$ . Сдвиг приводит к образованию искажений кубической решетки и образованию новой тетрагональной фазы. Поскольку ОЦТ-фаза образуется в локализованном объеме кубической матрицы, релаксация напряжений, накапливаемых кристаллом за счет сдвига в одном направлении, обеспечивается образованием двойника и сдвигом в противоположном направлении.

Именно эту тетрагонально-искаженную двойниковую структуру демонстрирует рис. 4. Образующаяся ОЦТ-фаза обладает меньшим объемом в сравнении с исходной ОЦК-фазой, поэтому сдвиг приводит к уменьшению расстояния между плоскостями образования мартенсита. С ростом числа плоскостей сдвига в пакете ОЦТ-фазы уменьшения объема суммируются, так что, в конце концов, расстояние между матрицей и мартенситной прослойкой становится равным  $2a$ . Разрыв межуатомных связей осуществляется скачком с образованием плоскости (поры или трещины), состоящей из одних вакансий и с релаксацией напряжений локализованных в месте разрушения. В идеальном случае минимальное число плоскостей сдвига достаточное

для образования, например, вакансионного диска порядка 11-12 шт. Реально толщина мартенситной прослойки всегда содержит большее число плоскостей сдвига.

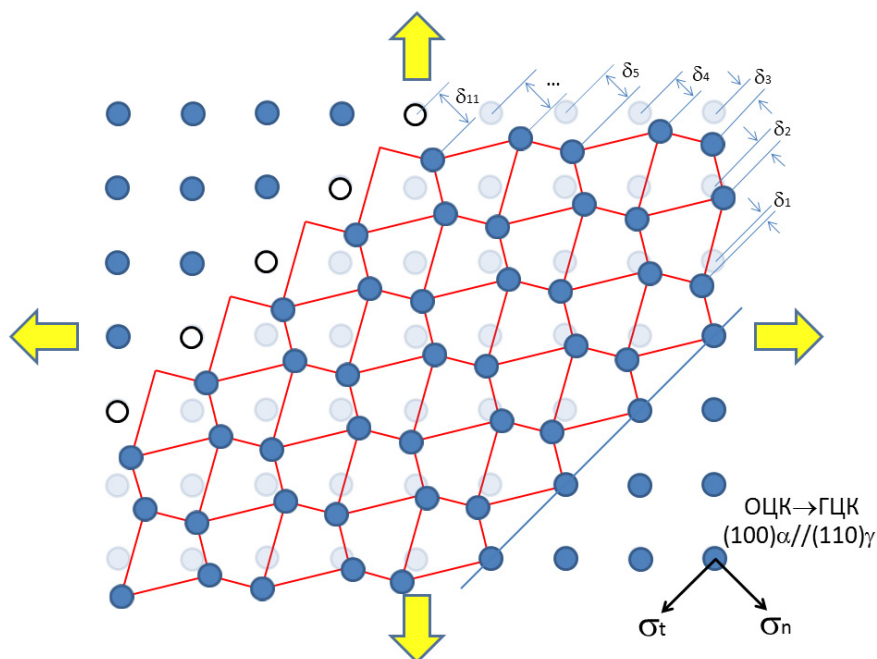


Рис. 4. Схема деформации кристаллической решетки при ОЦК-ГЦК мартенситном превращении.

Темными и серыми кружками обозначены положения атомов в исходной структуре кристалла. Темные кружки, объединенные сеткой – конечные положения атомов в структуре мартенсита. Неокрашенные кружки – вакансии, образованные за счет смещения атомов в новые положения

На рис. 4 стрелками указаны смещения атомов из узлов ОЦК решетки в ОЦТ состояние, а объемные изменения демонстрирует рост величины  $\delta$  от  $\delta_1$  до  $\delta_4$ .

Процесс образования вакансий при обратных мартенситных превращениях может быть ответственным за зарождение дислокационных петель или пор, в свою очередь оказывающих огромное влияние на изменение физико-механических свойств закаленных, облученных и др. материалов, находящихся в неравновесном состоянии.

Таким образом, мы имеем дело с процессом превращения упругой волны деформаций (в результате  $\gamma \rightleftharpoons \alpha$  фазового перехода), по сути, вакансий «размазанных» по кристаллической решетке в виде свободного объема, в вакансии, локализованные как точечные дефекты, имеющие свойства частиц (энергия, объем, концентрация и т.п.). В аксиоматике квантовой механики это соответствует так называемому процессу «локализация - делокализация», который составляет наиболее общий признак поведения всех квантовых систем, т.е. переходу волна-частица.

На то, что вакансия как квантовый объект «размазанный» по объему может существовать в кристалле при любой температуре мы указывали еще в [1].

### ЗАВИСИМОСТЬ ВЕЛИЧИН НАПРЯЖЕНИЙ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Деформации петель гистерезиса мартенситных фазовых превращений непосредственно связаны с изменениями температуры и (или) действующих нормальных напряжений ( $\sigma_n$ ) в системе «железо - вакансии». В работе при различных температурах (определяемых как температура начала мартенситного превращения -  $M_s$ ) строились петли гистерезиса. В каждой петле на ее верхней ветви определялась точка минимума потенциальной энергии системы («седловая» точка). Напряжения ( $\sigma_n$ ) необходимые для мартенситного фазового превращения измеряли как расстояние между ветвями вдоль оси Y в «седловой» точке (на петле гистерезиса рис.2 – точка G).

Исследования показали, что нормальные напряжения мартенситных превращений имеют максимум при температуре  $M_s = 547^\circ\text{C}$  (рис. 5). С изменением температуры от указанного значения, как в сторону высоких, так и в сторону низких  $M_s$ , напряжения линейно уменьшаются. Поскольку концентрация вакансий пропорциональна нормальным напряжениям, действующим в кристаллах, то и зависимость концентрации вакансий (в данном случае – вакансий пересыщения) от  $M_s$  будет иметь тот же вид.



Полученная зависимость свидетельствует о том, что вблизи 547°C структура кристаллов чистого железа имеет самые малые искажения и, как следствие, минимальные внутренние напряжения. Поэтому для мартенситных превращений при этой температуре необходима максимальная концентрация вакансий пересыщения. Структурные изменения в кристаллах провоцируют рост концентрации вакансий и тетрагональных искажений, что способствует снижению напряжений образования мартенсита и смещениям  $M_s$  в сторону высоких или низких температур.

Резкий излом зависимости представленной на диаграмме свидетельствует о смене механизмов накопления вакансий в железе. Если при температурах  $M_s < 547^\circ\text{C}$  преобладают процессы накопления вакансий в виде точечных дефектов, то при  $M_s > 547^\circ\text{C}$  вакансии стремятся раствориться в решетке и превратятся в деформации

В таблице представлены результаты обработки известных экспериментальных данных об изменении параметров кристаллических решеток аустенита и мартенсита в закаленных сталях с различным содержанием углерода [5]. Как следует из таблицы, параметры решеток обеих фаз, их объемы и тетрагональность мартенсита зависят от содержания углерода в стали, но относительное изменение объема фазового несоответствия ( $\Delta V = V_M - 0,5V_\gamma$ ) остается практически постоянным и приблизительно равным 4,2%. Из этого следует, что объем фазового несоответствия полностью определяется только вакансиями.

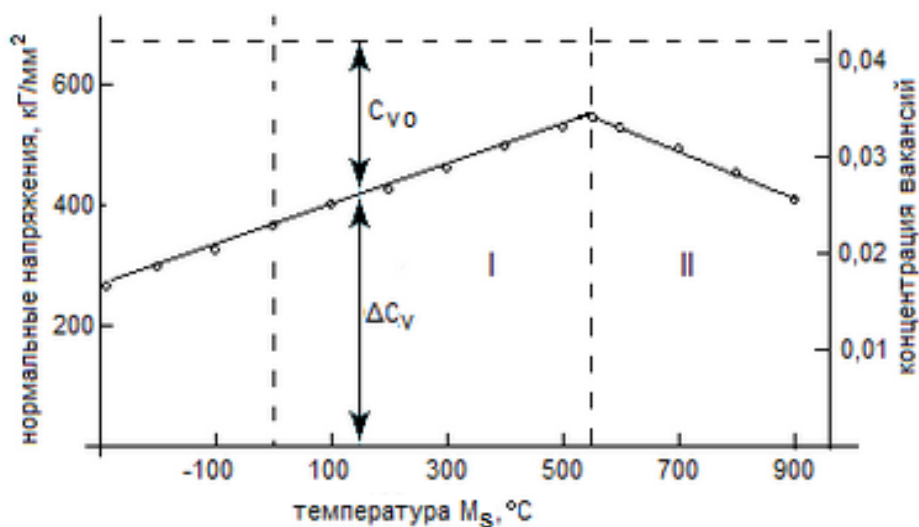


Рис.5. Зависимость концентрации вакансий от температуры начала мартенситных превращений ( $M_s$ ) в чистом железе  $C_{v0}$  – характерных для заданного структурного состояния;  $\Delta C_v$  - вакансий пересыщения, необходимых для мартенситного превращения (I- низко температурная область, II - высоко температурная область). Верхней штриховой линией обозначена предельная концентрация вакансий равная 4,2% (см. таблицу)

Таблица

Изменения параметров кристаллических решеток феррита и аустенита в зависимости от содержания углерода в железе

$C_c$ , вес. %	$a_\gamma$ , Å	$0,5V_\gamma$ , Å <sup>3</sup>	$a_M$ , Å	$c_M$ , Å	$V_M$ , Å <sup>3</sup>	c/a	$\Delta V = V_M - 0,5V_\gamma$ , Å <sup>3</sup>	$\Delta V / V_M$ , %
0,0	3,546	22,31	2,86	2,86	23,40	1	1,09	4,65
0,2	3,555	22,483	2,857	2,882	23,55	1,009	1,07	4,54
0,4	3,564	22,656	2,853	2,909	23,68	1,018	1,024	4,32
0,6	3,573	22,829	2,851	2,931	23,83	1,027	1,01	4,24
0,8	3,582	23,002	2,849	2,957	24,01	1,036	1,008	4,20
1,0	3,591	23,175	2,847	2,982	24,19	1,045	1,015	4,20
1,2	3,600	23,348	2,845	3,002	24,32	1,054	0,98	4,03
1,4	3,609	23,521	2,844	3,03	24,52	1,063	0,999	4,07
1,6	3,618	23,694	2,843	3,053	24,70	1,072	1,006	4,07
1,8	3,627	23,867	2,843	3,075	24,88	1,081	1,013	4,07
Среднее значение					24,11		1,02	4,24

Определение объема фазового несоответствия позволяет на диаграмме обозначить предельную концентрацию вакансий участвующую в мартенситных превращениях цифрой равной 4,2 об. %.

Следовательно, представленная зависимость (рис.5) в интервале температур от абсолютного нуля до 900°C, демонстрирует баланс между двумя составляющими объема фазового несоответствия или вакансиями,

накопленными кристаллом в процессе формирования структур и вакансиями необходимыми для МП превращения в каждом структурно-напряженном состоянии. Она представлена в координатах, связывающих нормальные напряжения и концентрацию вакансий (или относительное изменение объема  $\Delta V/V$ ), что позволяет вычислять удельную (внутреннюю) энергию ( $E = \sigma_n(\Delta V/V)^2$ , где  $\sigma_n \Delta V/V = P$  – гидростатическое давление, следовательно  $E = P\Delta V/V$ ), запасенную кристаллом и энергию, которую необходимо ввести извне в кристалл для того, что бы в нем реализовалось мартенситное превращение. Другими словами, диаграмма может быть представлена как баланс энергий: уже имеющейся в кристалле (запасенной в результате предварительной термообработки, облучения и т.п.) и дополнительной, требуемой для превращения.

Данные, полученные в работе [6] по распуханию чистых ОЦК-металлов в результате реакторного облучения определяют область температур в которой зарождение пор подавлено (рис.6). Заметим, что она довольно близка к области температур, где зарождение затруднено, показанной на рис.5. Эти результаты могут служить подтверждением правильности нашего подхода, и объясняется с позиций метода ФДМП высокими напряжениями необходимыми для мартенситных превращений.

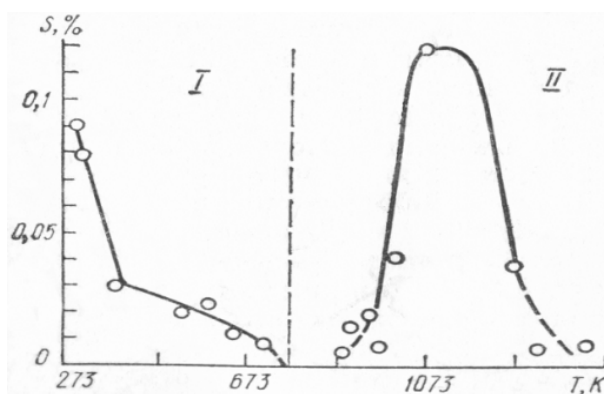


Рис.6. Объемные изменения молибдена в зависимости от температуры реакторного облучения. Доза – 1 сна.

Из этой простейшей схемы пространственного распределения вакансий следует очень важный вывод: в области температур ниже  $912^\circ\text{C}$  внешние напряжения провоцируют образование локализованных областей, давления в которых имеют знак противоположный приложенным извне. При этом оказывается, что фазовые превращения в железе протекают в полном согласии с термодинамикой. Прямое превращение в процессе закалки, вопреки действующему давлению сжатия (охлаждение), осуществляется в области кристалла, в которой действуют вакансионное пересыщение и растяжения. Фазовый переход осуществляется как способ релаксации накопившихся искажений частичным упорядочением с образованием фазы менее плотной, чем исходный аустенит.

Обратный переход при нагреве (растяжение) локализуется в области кристалла, в которой действует вакансионное недосыщение, и концентрируются сжатия. Упругие искажения, вызванные напряжениями, провоцируют фазовый переход с образованием более плотной фазы, чем исходный феррит. Образование вакансий и их комплексов в результате превращения – ответная реакция кристаллической структуры на недостаток в ней вакансий.

В области температур выше  $912^\circ\text{C}$  в кристаллах отсутствуют волны вакансионной неоднородности, а действуют только деформации растяжений или сжатий, поэтому фазовые превращения протекают в согласии с термодинамикой.

## ВЫВОДЫ

1. В рамках модели ФДМП проведен анализ условий протекания МП при различных температурах с участием вакансий в чистом железе. На атомном уровне предложена схема возникновения вакансий при обратном мартенситном превращении.
2. Несмотря на то, что параметры решеток аустенита и мартенсита, их объемы и тетрагональность мартенсита зависят от содержания углерода в стали, относительное изменение объема фазового несоответствия ( $\Delta V = V_m - 0,5V_a$ ) остается практически постоянным и приблизительно равным 4,2%. Из этого следует, что его величина полностью определяется только вакансиями.
3. Резкий излом зависимости представленной на диаграмме « $\sigma_n - C_v - M_s$ » свидетельствует о смене механизмов накопления вакансий в железе, необходимых для МП: как точечных дефектов при температуре ниже  $547^\circ\text{C}$ , и как растяжений решетки в виде свободного объема при более высоких температурах.
4. Результаты работы позволяют установить взаимосвязь между  $M_s$  и энергетическими затратами на МП в чистом железе в зависимости от его структурно-напряженного состояния.

5. Использование схемы пространственного распределения вакансий и определение роли напряжений связанных с ними, позволило показать, что фазовые превращения в железе во всех случаях протекают в полном согласии с термодинамикой.

6. Вакансии, по крайней мере, в железе способны создавать как растворы замещения, так и растворы внедрения. Если вакансии в виде точечных дефектов образуют растворы замещения, то растворяясь в решетке, они образуют растворы внедрения. Вакансии внедрения либо просто увеличивают свободный объем кристаллической решетки (как это происходит при фазовом  $\gamma \rightarrow \alpha$  превращении), либо искажают ее тетрагонально (как это происходит при образовании мартенсита).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Laptev I.N., Parhomenko A.A. Fazovye prevrascheniya i hrupkost' sistemy «zhelezo-vakansii» v poljah uprugih naprjazhenij // Uspehi fiziki metallov. – 2010. – Т.11. – Vyp.1. – S.5-50.
2. Laptev I.N., Parhomenko A.A. O vozmozhnosti obrazovaniya martensita v austenitnyh nerzhavajuwih staljah pod oblucheniem // Voprosy atomnoj nauki i tehniki. Serija: «Fizika radiacionnyh povrezhdenij i radiacionnoe materialovedenie». – 2002. – No.4(82). – S.143.
3. Laptev I.M., Parkhomenko O.O. "Paradox" of the void nucleation // East European Journal of Physics. – 2014. – No.3. – S. 113-120.
4. Khachaturian A.G. Teoriya fazovykh prevrasheniy i structura tverdych rastvorov.-M.: Nauka, 1974.-385s.
5. Guliaev A.P. Metallovedenie. – M.: Oborongiz, 1963. – 185s.
6. Brimhall A.D., Simonen E.P., Kissinger S.E. Fluence and temp dependence of swelling in irradiation molibdenum // J.N.M. – 1973. – Vol.48. – No.3. – P. 339-350.