

Mesomechanics of $fcc \rightarrow hcp$ Martensitic Transformation in Fe-Mn-Si-Cr-N Shape Memory Alloys*

Jianfeng Wan[#], Shipu Chen

School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai

Email: [#]jfw@sjtu.edu.cn

Received: Jan. 24th, 2013; revised: Feb. 4th, 2013; accepted: Feb. 17th, 2013

Abstract: Based on the Eshelby's micro-elastic theory, we calculated the elastic strain energy of single variant and multi-variants as well as the interaction energy between two variants in Fe-Mn-Si based shape memory alloys. The influence of N on the mesomechanics of martensitic transformation was studied. The results of theoretical calculations show that N increases the strain energy of phase transition as the resistance term. The strain energy of single variant is much bigger than the critical driving force of $fcc-hcp$ transition and much more than that of multi-variants, which is the main reason that it is difficult to get the thermal-induced single variant in Fe-Mn-Si based alloys. The elastic strain energy of multi-variants is greatly dependent on the probability of shear (p) and decreases with decreasing p . The calculation related to the shape factor (ξ) reveals that the thin plate of martensite has a small strain energy compared with the other lens-like martensite. The interaction energy between two martensites reduces quickly with their distance at first and changes slowly when their distance exceeds some critical value.

Keywords: Mesomechanics; $fcc-hcp$ Martensitic Transformation; Elastic Strain Energy; Fe-Mn-Si-Cr-N Shape Memory Alloy

Fe-Mn-Si-Cr-N 形状记忆合金中 $fcc \rightarrow hcp$ 相变的细观力学*

万见峰[#], 陈世朴

上海交通大学材料与科学工程学院, 上海

Email: [#]jfw@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2013年1月24日; 修回日期: 2013年2月4日; 录用日期: 2013年2月17日

摘要: 本文利用 Eshelby 弹性夹杂理论, 针对 Fe-Mn-Si-Cr-N 形状记忆合金中的马氏体单变体、多变体的弹性应变能以及平行马氏体之间的交互作用进行了理论计算, 并比较了间隙原子 N 对相变细观力学的影响。计算结果表明: N 合金化增加了马氏体的应变能, 表明马氏体正相变的阻力增加; 单变体的应变能远远大于相变的临界驱动力, 同时比多变体的应变能大许多, 所以热诱发马氏体相变中难以观察到单变体; 多变体的应变能与层错切变几率(p)有密切关系, p 减小, 多变体的应变能降低; 基于形状因子(ξ)的弹性应变能计算显示片状马氏体的应变能最小; 而平行马氏体之间的交互作用能与间距相关, 在间距增加的开始, 这种交互作用减小得快, 随后趋于缓和。

关键词: 细观力学; $fcc-hcp$ 马氏体相变; 弹性应变能; Fe-Mn-Si-Cr-N 形状记忆合金

1. 引言

弹性应变能是影响马氏体长大过程的一个重要因素, 它在一定程度上决定了马氏体的最终形态, 甚至会影响到相变的形核长大机制, 如自协调。徐祖耀认为^[1], 在低层错能合金中, $fcc \rightarrow hcp$ 的临界相变

*资助信息: 国家自然科学基金(51171112, 50571066)和教育部留学人员归国启动基金资助。

[#]通讯作者。

驱动力可以表示为 $\Delta G_{Ch} = A \cdot \gamma + B$ ，其中 B 与应变能相近。这表明应变能尽管小，但仍然不能忽略。Fe-Mn-Si 基合金属于这类低层错能合金，然而目前还没有真正地估计出其中的相变应变能。在合金的热诱发相变过程中，自协调形成马氏体带^[2]，以减小相变的应变能，这和层错与层错、马氏体与马氏体之间的交互作用有密切的关系，以往仅仅停留在定性的解释上，还没有一个定量的结果。层错在这类合金的相变中起着重要的作用，对它的能量计算是目前的一个研究热点，众多学者考虑的是它的化学自由能部分^[3,4]，但其中也包含应变能^[5]。如果层错能比较高，而应变能所占比例低，则忽略应变能部分不会带来太大的误差。而 Ferreira 等^[5]在计算 Fe-Cr-Ni 合金的层错能时，根据两个不全位错的相互作用，得到层错的应变能为 4 mJ/m^2 (约 53 J/mol)，在层错能中所占比例最高可达到 40%，但确切的的比例还不清楚。本文从细观力学的角度对这些问题做一个系统的分析，以有助于对 $fcc \rightarrow hcp$ 相变过程的认识和了解。以此为基础，结合本文的 Fe-Mn-Si-Cr-N 合金，具体考虑间隙原子 N 对马氏体相变和层错应变能的作用。

2. Eshelby 的弹性理论^[6-8]

为了定量考虑马氏体相变引起的弹性能，根据 Eshelby 理论，将固体中的相变产物看作是非均质夹杂，共格地存在于无限大的母相中。他设想了一个如下的计算过程：从作为连续介质的母相中割出一块，让它不受约束地发生马氏体相变，此时的相变应变作为局部应变 ε_{ij}^* 被定义为本征应变；在马氏体的表面施加一个外力，使马氏体弹性地恢复原来的形状和尺寸，并放回原处；再施加一个与上述外力反向的表面力，这样马氏体和周围的母相一起协调变形，得到所需要的应力 - 应变场。Eshelby 证明：对一无限大固体中含一个均匀椭球夹杂 Ω ，当其内部的本征应变 ε_{ij}^* 为均匀分布时，椭球内部的应力 (σ_{ij}) 和应变 (ε_{ij}) 也是均匀分布的：

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \varepsilon_{kl}^* \quad (1)$$

$$\sigma_{ij} = L_{ijkl} (S_{klmn} - I_{klmn}) \varepsilon_{mn}^* \quad (2)$$

其中 L_{ijkl} 为材料的弹性模量张量， I_{klmn} 为单位张量， S_{klmn} 为 Eshelby 张量，它依赖于椭球的形状：

$$S_{klmn} = \frac{1}{16\pi(1-\nu)} \int_{\Sigma} \frac{(\lambda_k g_{lmn} + \lambda_l g_{kmn})}{\alpha} d\omega \quad (3)$$

其中

$$g_{lmn} = (1-2\nu)(\delta_{lm} p_n + \delta_{ln} p_m - \delta_{mn} p_l) + 3p_l p_m p_n \quad (4)$$

p 是单位矢量。而单位张量 $I_{klmn} = \frac{1}{2}(\delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{kn} \delta_{lm})$ 。弹性介质的本构关系为：

$$\sigma = L : \varepsilon, \quad \varepsilon = M : \sigma \quad (5)$$

式中 L 和 M 是弹性模量张量和弹性柔度张量。所以单位体积构元的弹性应变能可表示为：

$$W_e = -\frac{1}{2} \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dV / V = -\frac{1}{2} \varepsilon^* : L : (S - I) : \varepsilon^* \quad (6)$$

而合金中的马氏体存在多种变体(最多 24 种)，每种变体 i 的体积百分数假定为 f_i ，所以没有相互作用的 n 个变体的弹性应变能为：

$$W_{ne} = \sum_{i=1}^n f_i W_{ei} \quad (7)$$

马氏体片间的交互作用是复杂的，包括同一变体之间以及各变体之间的相互作用，与马氏体的大小，马氏体片间的距离及夹角都有关。下面主要针对两片马氏体的具体情况分别给出它们的计算方法。

3. 马氏体弹性能的力学分析

3.1. 平行马氏体片间的相互作用

马氏体 M_1 和 M_2 相互平行，是指两马氏体具有相同的惯习面，有两种方式：共轴型和非共轴型。图 1 所示的是共轴的两片马氏体， $CD//EF$ ， AB 是 M_1 和 M_2 的间距 (h)， A ， B 分别是 M_1 和 M_2 的中心。设马氏体 M_i 在 M_j 处产生的应力场为 ${}^i\sigma$ ， M_j 在 M_i 处产生的

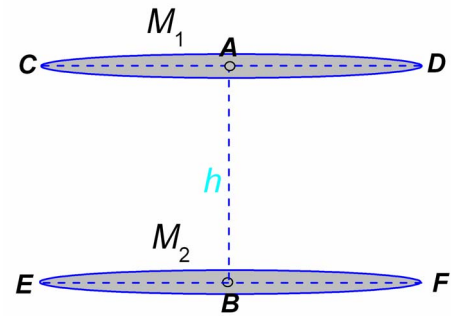


Figure 1. Illustration of two parallel martensites
图 1. 两共轴马氏体片的示意图

应力场为 ${}^j\sigma$ ($i, j=1, 2$, 且 $i \neq j$), 则马氏体间的弹性交互作用能 W_{int} 可表示为:

$$W_{\text{int}} = -\frac{1}{4} \left({}^i\varepsilon^* : {}^j\sigma + {}^j\varepsilon^* : {}^i\sigma \right) \quad (8)$$

在所建立的坐标系中, 惯习面的法向为 Z 轴, 中心 A 和 B 的坐标满足如下关系:

$$x_A = x_B + \Delta x, y_A = y_B + \Delta y, z_A = z_B + \Delta z \quad (9)$$

其中 $\Delta x, \Delta y, \Delta z (\geq 0)$ 决定了 M_1 和 M_2 的相对位置。所以外应力场是通过改变本征应变来获得的, 具体的计算处理将依据相变晶体学。

3.2. 非平行马氏体片间的相互作用

3.2.1. 两片马氏体间没有交截

只要确定了马氏体的惯习面, 则两变体间的夹角就可以得到(如图 2 所示):

$$\cos \angle BOD = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \quad (10)$$

其中 (h_i, k_i, l_i) 是惯习面指数 ($i=1, 2$)。同样为了得到各质心在对方质心处的应力场, 需要将本征应变旋转一个角度 $\angle BOD$, 即将其转化到同一坐标中。若转动矩阵为 R , 则弹性交互作用能为:

$$W_{\text{int}} = -\frac{1}{4} \left[(R \cdot {}^i\varepsilon^* \cdot R^{-1}) : {}^j\sigma + (R^{-1} \cdot {}^j\varepsilon^* \cdot R) : {}^i\sigma \right] \quad (11)$$

3.2.2. 两片马氏体间存在交截

这种情况(图 3)比马氏体无交截(图 2)要复杂, 因

为交叉处马氏体的形成经过多次切变(至少是二次切变)。可以肯定的是它的本征应变与两片马氏体的都不同, 所引起的应变能要大, 对相变有较大的阻力。所以在有些相变中一片马氏体往往终止于另一片马氏体, 宁可在其侧面协调形成第三片马氏体, 也不穿过。具体的特征应变将结合 Fe-Mn-Si 基合金的 $\gamma \rightarrow \varepsilon$ 马氏体相变加以分析, 这里主要给出其弹性交互作用 W_{int} 的一般描述。

为了考虑的方便, 将交截过程分成两个阶段: 先简单地叠放, M_1 和 M_2 都没有发生任何改变; 再交截, 此时改变的仅仅是重叠部分。此时 W_{int} 包括两部分: 非接触交互作用能, 其计算方法和方程(11)相同; 另一部分仅来自交截。 M_1 和 M_2 的交截部分 EFGH 也可看成一个椭球体, 但它的形状不同, 即 Eshelby 张量有所改变。而且在交截部分的马氏体相变晶体学特殊, 这就决定了它自身的本征应变。所以其弹性交互作用能见式(12)。

式中的 f_c , ${}^c\varepsilon^*$, cS 分别是交截部分的体积百分数, 本征应变和 Eshelby 张量。

基于以上分析, 要定量计算马氏体相变所引起的应变能, 必须知道本征应变 ε^* , 它是相变晶体学所要解决的问题。

3.3. Fe-Mn-Si 基合金 $\gamma \rightarrow \varepsilon$ 相变晶体学

马氏体相变属于切变型位移相变^[9-11], 是通过一个平面不变应变来完成的, 惯习面的真实存在证明了这一过程。为了定量地处理这个平面不变应变 D , 唯象地将其分解为一个简单切变 S , 一个 Bain 畸变 B 和

$$W_{\text{int}} = -\frac{1}{2} f_c \left\{ {}^c\varepsilon^* : L : ({}^cS - I) : {}^c\varepsilon^* - \frac{1}{2} \left[{}^i\varepsilon^* : L : (S - I) : {}^j\varepsilon^* + {}^j\varepsilon^* : L : (S - I) : {}^i\varepsilon^* \right] \right\} - \frac{1}{4} \left[(R \cdot {}^i\varepsilon^* \cdot R^{-1}) : {}^j\sigma + (R^{-1} \cdot {}^j\varepsilon^* \cdot R) : {}^i\sigma \right] \quad (12)$$

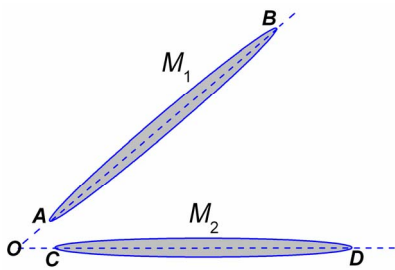


Figure 2. Illustration of two unparallel martensites
图 2. 非平行马氏体片的示意图

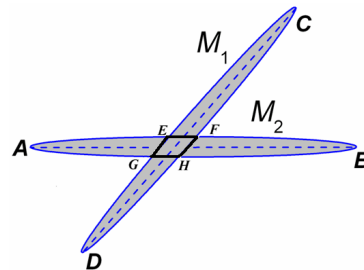


Figure 3. Illustration of two crossing martensites
图 3. 相互交截马氏体片的示意图

一个旋转 R ，它们并不表示相变的三个真实过程。它们之间存在以下关系

$$D = R \cdot B \cdot S \quad (13)$$

D 作为形状应变是相变的总应变，包括平行于惯习面的切应变和垂直于惯习面的伸缩。 D 的矩阵形式为

$$D = I + m_1 d' p' \quad (14)$$

其中， I ——单位二阶张量， m_1 ——不变平面沿其法向的位移量， d' ——不变平面位移方向的单位矢量， p' ——不变平面法向的单位矢量。根据实验结果，通过关系式(13)可得到不变平面应变 D ，再经过(14)式可得到 m_1 ， d' 和 p' 。参考小变形理论，对于不变平面的细观相变塑性应变可以表示为

$$\varepsilon^p = \frac{1}{2} m_1 (d' p' + p' d') \quad (15)$$

此处的 ε^p 就是马氏体相变的本征应变 ε^* 。根据唯象理论，可以确定所有可能出现的马氏体变体类型，同时得到第 i 类变体的 d'_i 和 p'_i ，那么就可算出第 i 类变体的本征应变：

$$\varepsilon_i^* = \frac{1}{2} m_1 (d'_i p'_i + p'_i d'_i) \quad (i=1,2,\dots,24) \quad (16)$$

$fcc(\gamma) \rightarrow hcp(\varepsilon)$ 马氏体相变是最简单的一类相变，它通过 $(111)_{fcc}$ 上的层错扩展和堆垛即可获得 hcp 结构。Guo 等^[12] 对热诱发相变过程的晶体学进行了处理，在简单切变矩阵中引进切变几率，以解释多变体组成的 hcp 马氏体带及其自协调效应。但要定量地确定这个切变几率从实验上是困难的，另外热诱发马氏体依旧存在表面浮凸，这说明 3 个 $\langle 112 \rangle$ 方向上的切变几率并不严格相等。由于 Bain 畸变后的三个主形变值均小于 1，表明代表马氏体的椭球包含于代表母相的圆球中，没有未伸长线存在，所以 Olson 和 Cohen 建议^[13] 旋转没有必要存在，即 $R = I$ 。目前还没有实验测得这种合金中不变平面的形状应变大小，无论是热诱发形成的

马氏体还是应力诱发形成的，这也为理论计算带来了一定的困难。下面结合 Fe-Mn-Si-Cr-N 合金分别对单变体和自协调多变体加以讨论。

3.3.1. 单变体

依据公式(14)，计算 FeMnSi 基合金中单变体的点阵变形矩阵为：

$$D_1 = \begin{bmatrix} 0.99749 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99749 & 0.35361 \\ 0 & 0 & 0.99221 \end{bmatrix}; \quad (17)$$

$$D_2 = \begin{bmatrix} 0.99705 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99705 & 0.35361 \\ 0 & 0 & 0.99360 \end{bmatrix}$$

D_1 和 D_2 分别是本文所研究的 1 号和 2 号合金的 IPS 矩阵。根据式(14)和式(16)得到相应的本征应变

$$\varepsilon_1^* = \begin{bmatrix} -0.00251 & 0 & 0 \\ 0 & -0.00251 & 0.17681 \\ 0 & 0.17681 & -0.00779 \end{bmatrix}; \quad (18)$$

$$\varepsilon_2^* = \begin{bmatrix} -0.00295 & 0 & 0 \\ 0 & -0.00295 & 0.17681 \\ 0 & 0.17681 & -0.00640 \end{bmatrix}$$

合金的点阵常数是通过 XRD 分析得到的，所需的晶体学参数如表 1 所示。

3.3.2. 自协调多变体

由于母相(111)面上存在 3 个等价的切变方向，这就决定了在一个马氏体带(惯习面相同)中可能存在 3 个变体，最终的变形矩阵为：

$$D_1 = \begin{bmatrix} 0.99749 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99749 & 0.17681 \cdot p \\ 0 & 0.17681 \cdot p & 0.99221 \end{bmatrix}; \quad (19)$$

$$D_2 = \begin{bmatrix} 0.99705 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99705 & 0.17681 \cdot p \\ 0 & 0.17681 \cdot p & 0.99360 \end{bmatrix}$$

Table 1. The crystallographic parameters of $fcc(\gamma) \rightarrow hcp(\varepsilon)$ martensitic transformation in Fe-Mn-Si-Cr based alloys^[14]
表 1. Fe-Mn-Si-Cr 基合金 $fcc(\gamma) \rightarrow hcp(\varepsilon)$ 马氏体相变晶体学参数^[14]

| Alloys | $a_r (nm)$ | $a_c (nm)$ | $c_c (nm)$ | η_1 | η_2 | η_3 |
|--|------------|------------|------------|----------|----------|----------|
| No.1 Fe ₂₅ Mn ₆ Si ₅ Cr _{0.083} N | 0.359374 | 0.253516 | 0.411747 | 0.99749 | 0.99749 | 0.99221 |
| No.2 Fe ₂₅ Mn ₆ Si ₅ Cr _{0.14} N | 0.360731 | 0.254362 | 0.413883 | 0.99705 | 0.99705 | 0.99360 |

D_1 和 D_2 分别是 1 号和 2 号合金的 IPS 矩阵, 相应的本征应变分别为:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^* &= \begin{bmatrix} -0.00251 & 0 & 0 \\ 0 & -0.00251 & 0.17681 \cdot p \\ 0 & 0.17681 \cdot p & -0.00779 \end{bmatrix}; \\ \varepsilon_2^* &= \begin{bmatrix} -0.00295 & 0 & 0 \\ 0 & -0.00295 & 0.17681 \cdot p \\ 0 & 0.17681 \cdot p & -0.00640 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (20)$$

p 是相变后形成马氏体带总的切变几率。

3.3.3. 外部应力场的估计

根据弹性材料的本构关系, 夹杂体外的应力场可通过相应的应变得到。在所建立的坐标体系中, 单变体马氏体的质心位于原点, 外界的任意点为 $P(\Delta x \ \Delta y \ \Delta z)$ 。相对 P 点, 本研究体系中马氏体的本征应变为:

$$\varepsilon_o^* = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} a_\gamma - a_\varepsilon & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} a_\gamma + \Delta x & \frac{\sqrt{2}}{2} a_\gamma - a_\varepsilon & \frac{\sqrt{6}}{6} a_\gamma \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} a_\gamma + \Delta y & \frac{4\sqrt{3}}{3} a_\gamma + \Delta z \\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{6} a_\gamma & \frac{d_{0002}}{d_{111} + \Delta z} \end{bmatrix} \quad (21)$$

所以此片马氏体在 P 点的应力场为

$$\sigma_p = L : (S - I) : \varepsilon_o^* \quad (22)$$

至此, 对计算应变能所需的理论分析基本上完成了, 下面就是计算的结果和分析。

4. 计算结果与分析

4.1. 热诱发马氏体的弹性应变能

热诱发所形成的马氏体往往包含多种变体, 这种自协调使相变应变减小, 最终通过降低相变应变能这类阻力而使相变容易进行。(20)式给出了两种合金的本征应变, 分别代入(6)式可得到它们的弹性应变能。图 4(a)是在切变几率为 0.05 时, 合金的弹性应变能随

形状因子 ξ 的变化情况。 $\xi = 0$ 表示一个没有厚度的平椭球, $\xi = 1$ 则表示一个圆球。从此图中可看出, ξ 从 0 到 1, 单位体积的马氏体应变能是单调增加的, 这表明马氏体变体最容易以板状或片状的形式出现, 同时说明形成片状马氏体所消耗的能量相对要小。

如 Fe-1.8C 合金所形成透镜状马氏体所需的化学驱动力在 1000 J/mol 左右, 而 Fe-Mn-Si 基, Co-Ni 基合金所形成的片状马氏体的驱动力则在 (100~200) J/mol 的范围内, 显然比前者要小许多^[15]。由于实验中很难得到热诱发马氏体带的切变几率, 而且到目前为止还没有热诱发马氏体切变量的实验报道, 所以在这里应当考虑切变几率的作用。图 4(b)是切变几率从 0.01 到 0.1 之间变化时马氏体的弹性应变能, 所以马氏体相变时总是向完全自协调的方向进行, 以减小相变应变能。合金 2 的弹性应变能比合金 1 的大, 这是

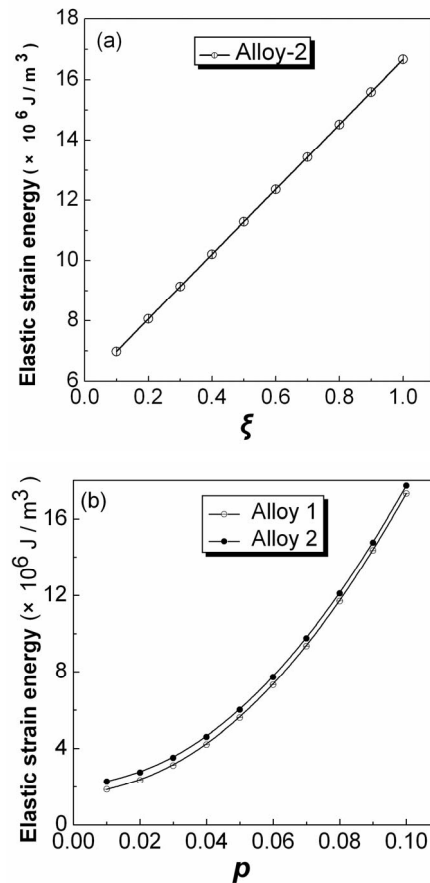


Figure 4. (a) The relation between elastic strain energy and ξ in Alloy 5; (b) The relation between elastic strain energy and p in Alloy 1 and Alloy 5
图 4. (a) 2 号合金的弹性应变能随与形状因子 ξ 的关系; (b) 1 号、2 号合金的应变能与切变几率 p 的关系

间隙原子 N 强化的结果。首先加入 N 原子后, 奥氏体的点阵常数由 0.359374 nm 增加到 0.360731 nm, 相应马氏体的点阵常数也增加了(见表 1), 导致马氏体的本征应变矩阵中的主应变增加(见公式(20)), 另外 N 的强化作用是显著的^[14], 必然使合金的弹性模量有一定程度的提高, 结合公式(20)即可定性地得到上述结论。

4.2. 应力诱发马氏体的弹性应变能

4.2.1. 单变体

AFM 实验^[16]证明应力诱发所形成的马氏体多为单变体。图 5 是合金单变体马氏体的弹性应变能与形状参数的关系曲线。首先可以看出 2 号合金单变体的弹性应变能比 1 号的大, 表明 N 的加入增加了形成单变体所需的能量。若是外力做功, 在相同的应变条件下, 2 号所需的应力比 1 号的理论上应该要大。从合金的应力应变曲线中可得到两种合金马氏体相变的临界应力分别为 170 MPa (No.1), 205 MPa (No.2)^[14], 这说明含量为 0.14 wt% 的氮使诱发马氏体的临界应力提高了 35 MPa, 这尽管是一个宏观的外加应力, 但它从侧面反映了 N 原子对单变体应变能的大小的影响。同自协调马氏体的应变能(见图 4)相比, 单变体的应变能要大许多, 这就是为什么热诱发形成马氏体带而不能形成单变体的重要原因。这类合金的相变驱动力很小(<200 J/mol), 所以要形成单变体必需施加一定的外应力, 以提供足够的驱动力。

4.2.2. 变体间的交互作用能

针对前面列出的几种马氏体变体的相对位置, 结合 Fe-Mn-Si 合金对具有 HCP 结构的马氏体变体的

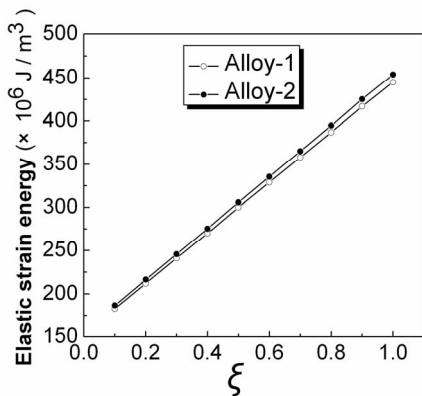


Figure 5. Effect of ξ on elastic strain energy of single variant
图 5. 马氏体单变体形状因子 ξ 对弹性应变能的影响曲线

交互作用进行分析。本节中只以共轴的两片平行马氏体为研究对象, 考察它们的交互作用能。设两同一马氏体变体的间距为 h , 相当于(22)式中的 Δz , 而 $\Delta x = \Delta y = 0$ 。令 $h = m \cdot (nd_{111})$, 其中 nd_{111} 表示马氏体片的厚度, 将马氏体片看成一层, 则一片马氏体相对另一片的应变为:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{M1}^* &= \begin{bmatrix} -0.00251 & 0 & 0 \\ 0 & -0.00251 & \frac{0.17681}{1 + \frac{m}{4}} \\ 0 & \frac{0.17681}{1 + \frac{m}{4}} & \frac{-0.00779}{1 + m} \end{bmatrix}, \\ \varepsilon_{M2}^* &= \begin{bmatrix} -0.00295 & 0 & 0 \\ 0 & -0.00295 & \frac{0.16781}{1 + \frac{m}{4}} \\ 0 & \frac{0.16781}{1 + \frac{m}{4}} & \frac{-0.00640}{1 + m} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (23)$$

根据(8)式就可得到同变体间的交互作用, 如图 6 所示。马氏体相距越远, 它们的弹性相互作用越小, 自协调的效果也减弱, 所以自协调所形成的多个变体靠的很近, 如 Cu-基合金中所形成的变体协调群, Fe-Mn-Si 合金中热诱发所形成的马氏体带中往往包含 3 个变体, 变体协调的原则是使总体的相变应变能最小, 因为在正相变中应变能是相变的阻力项。形状因子从一定程度上反映了马氏体的形态, 是片状还是透镜状, 前面已得到片状马氏体的应变能最小。这里将比较它们的交互作用, 如图 7 所示, 形状因子越大, 交互作用越强。在一些 Fe-Ni-C 合金中, 存在爆发型马氏体转变, 形成的透镜马氏体如同闪电状, 这是它们之间强烈相互作用的结果^[15]。

5. 结论

本文利用 Eshelby 弹性夹杂理论, 结合 N 合金化的 Fe-Mn-Si-Cr 基合金, 对马氏体单变体、多变体的

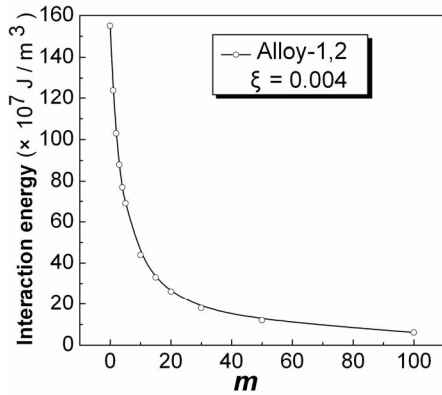


Figure 6. Effect of m on interaction energy
图 6. 同一变体间的交互作用与变体间距的关系

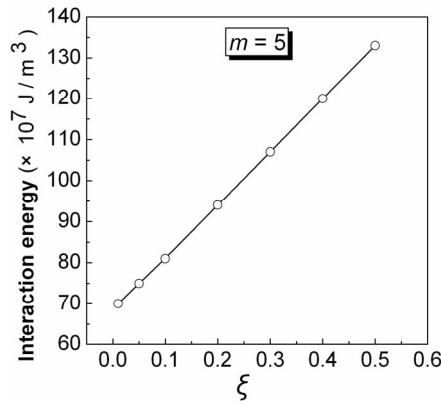


Figure 7. Effect of ξ on interaction energy
图 7. 变体交互作用与形状因子的关系

弹性应变能以及平行马氏体之间的交互作用进行了计算，并比较了 N 合金化的效果，得到如下结论：

- 1) N 合金化使马氏体的应变能都有所增加，表明正相变的阻力增加；
- 2) 单变体的应变能远远大于相变的临界驱动力，所以热诱发相变中难以观察到单变体；单变体的应变能比多变体的大许多倍；
- 3) 多变体的应变能与切变几率 p 有密切关系， p 减小，应变能降低；
- 4) 片状形态的马氏体的应变能最小；
- 5) 平行马氏体之间的交互作用能与间距相关，在

间距增加的开始，这种交互作用减小得快，随后趋于缓和。

6. 致谢

感谢徐祖耀院士和戎咏华教授的关心与支持。

参考文献 (References)

- [1] 徐祖耀. Fe-Mn-C 及 Fe-Ni-C 合金马氏体相变热力学[J]. 金属学报, 1980, 16(4): 430-434.
- [2] J.-H. Yang, C. M. Wayman. Intersecting-shear mechanisms for the formation of secondary ϵ martensite variants. Acta Metallurgica et Materialia, 1992, 40(8): 2025-2031.
- [3] I. A. Yakubtsov, B. Ariapour and D. D. Perovic. Effect of nitrogen on stacking fault energy of f.c.c. iron-based alloys. Acta Materialia, 1999, 47(4): 1271.
- [4] J.-C. Li, W. Zheng and Q. Jiang. Stacking fault energy of iron-base shape memory alloys. Materials Letters, 1999, 38(4): 275-277.
- [5] P. J. Ferreira, P. Mullner. A thermodynamic model for the stacking-fault energy. Acta Materialia, 1999, 46(13): 4479-4484.
- [6] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. Proceedings of the Royal Society, 1957, A241: 376-396.
- [7] J. D. Eshelby. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. Proceedings of the Royal Society, 1959, A252: 561-569.
- [8] J. D. Eshelby. Elastic inclusions and inhomogeneities. Progress in Solid Mechanics, 1961, 2: 87-140.
- [9] M. S. Wechsler, D. S. Lieberman and T. A. Read. On the theory of the formation of martensite. Transaction of American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers, 1953, 197: 1503-1515.
- [10] J. S. Bowles, J. K. MacKenzie. The crystallography of martensite transformations, part I. Acta Metallurgica, 1954, 2(1): 129-137.
- [11] J. K. MacKenzie, J. S. Bowles. The crystallography of martensite transformations II. Acta Metallurgica, 1954, 2(1): 138-147.
- [12] Z. H. Guo, Y. H. Rong, S. P. Chen and Z. Y. Xu (T. Y. Hsu). Crystallography of FCC(γ) \rightarrow HCP(ϵ) martensitic transformation in Fe-Mn-Si based alloys. Scripta Materialia, 1999, 41(2): 153-158.
- [13] G. B. Olson and M. Cohen. A general mechanism of martensitic nucleation: Part I. General concepts and the FCC \rightarrow HCP transformation. Metallurgical Transactions A, 1976, 7(12): 1897-1904.
- [14] 万见峰. Fe-Mn-Si-Cr-N 形状记忆合金的马氏体相变[D]. 上海交通大学, 2001.
- [15] 徐祖耀. 马氏体相变与马氏体(第二版)[M]. 北京: 科学出版社, 1999: 430.
- [16] D.-Z. Liu, T. Kikuchi, S. Kajiwara and N. Shinya. Atomic force microscopy study of stacking modes of martensitic transformation in Fe-Mn-Si based shape memory alloys. Materials Science Forum, 2000, 327-328: 255.