马氏体相变晶体学导论

马氏体相变晶体学导论

〔美〕C.M.Wayman 著

陈业新 李箭 译

徐祖耀 校

中南工业大学出版社

马氏体相变晶体学导论

马氏体相变晶体学导论

[美] C. M. Wayman 著
陈业新 李 箭 译
徐祖耀 校

中南工业大学出版社

马氏体相变晶体学导论

[美] C·M·Wayman 著

陈业新 李 箭 译

徐祖耀 校

责任编辑：田荣璋

插图责任编辑：刘楷英

*

中南工业大学出版社出版发行

中南工业大学出版社印刷厂印装

湖 南 省 新 华 书 店 经 销

*

开本：787×1092 1/32 印张：6.5 字数：144千字

1989年5月第1版 1989年5月第1次印刷

印数：0001—1000

*

ISBN 7-81020-226-x/O·034

定价：1.30元

绪　言

马氏体相变本质上为切变型或位移型相变，许多种类的金属和非金属在固态均可发生马氏体相变。现在，通称母相经马氏体相变所得产物为“马氏体”。为了纪念著名德国冶金学家Martens，1895年，Osmond建议用“马氏体”这个术语描述淬硬钢中所发现的显微组织。的确，当钢从高温迅速冷却时，会发生马氏体相变，而钢的硬化基本上是由于马氏体相变所引起的。

众所周知，现在除钢之外，许多材料都会发生马氏体相变。属于马氏体型的相变有一些共同的非常明确的几何特征。这些几何特征形成了本书中讨论问题的基础。1958年，Kaufman和Cohen已经讨论了马氏体相变的热力学和动力学。在本书中，这些方面将不再作讨论。

马氏体相变的位移特性在相变过程中表现为单个原子作有规则的迁动。这些原子的迁动类似于在机械孪生中发生的原子迁动。每个原子迁动的距离略小于一个原子间距。马氏体相变与一些由扩散控制的固态相变（例如，共析分解）形成了对照。在共析分解中，原子作无规则扩散和较长距离的移动。在这个意义上，马氏体相变是无扩散的。

马氏体相变的最明显的几何特征是其形状上的变化或形状形变。顾名思义，即当具有光滑表面的母相晶体发生相变而得到马氏体产物时，形状形变表现为清晰的表面畸变（倾动）。

所观察到的表面浮突结果表明，当母相发生相变而成为马氏体时，直线转变成直线，平面也转变成平面。此外，x射线观察已经显示，尽管马氏体相与母相具有不同的晶体结构，但马氏体相与母相之间存在着一定的点阵位向关系。在母相结构中存在着一个特殊的平面，这个平面称为惯习面或界面，它将母相和马氏体相分开。

任何成功地解释马氏体相变的晶体学理论必须预测形状形变、位向关系和惯习面。借助于实验所得到的这些量的部分数据，这个领域中的学者们曾试图推测马氏体相变过程中的原子运动。直到1953年，所提出的机制通常包括相当特定的原子运动和改组。总的说来，这些机制未能成功地预测所有观察到的几何特征。

1953年，Wechsler，Lieberman和Read（1953）在美国以及Bowles和Mackenzie（1954，a，b，c）在澳大利亚分别独立地建立了一个成功的表象理论。这些理论形成了随后在本书中讨论的基础。仅仅只要知道母相和马氏体相的点阵常数和晶体结构，这个附加内在假设的理论能够预测惯习面、位向关系和形状形变。（必须假定点阵对应关系和点阵不变切变。这些将在后面讨论）。Bowles和Mackenzie与Wechsler，Lieberman和Read所用的数学处理（矩阵代数）是明显不同的，但是，正如后续相应章节中指出的那样，这些理论在本质上是一致的。因为这个理论考虑了马氏体结构和母相结构实际配合在一起的情况，所以，这个理论被证明是成功的。实际上，早期的学者忽略了这个要点。在1955年，Christian对Bowles-Mackenzie处理和Wechsler-Lieberman-Read处理作了比较。

最近，出现了其他分析方法。但是，所有这些方法的基本

原理均与1953年建立的理论相同。特别地，Bullough和Bilby（1956）建立了表面位错（在相界上）处理；Bilby和Frank（1960）作出了柱体匹配（prism-matching）分析，其中将两个相的三角形柱体的结构单元在惯习面上配置在一起。

Bilby和Christian（1955，1961）已经提供了关于马氏体晶体学理论的两篇优秀述评。可以断言，这两篇文章对读者是很有价值的。特别是Bilby和Christian最近所写（1961）的述评，由于用最少的数学细节写成，所以更适用于教学。此外，Mackenzie（1960）已经准备了一个关于Bowles-Mackenzie方程的简单的无数学的描述。

本书由下列部分组成：有关数学基础的讨论；理论的综合发展；一些详细的计算示例以及理论和实验之间的比较。特别希望，计算示例将从实质上补充所需的数学说明。

目　录

第一章　矩阵的基本性质

现在，借用熟知的解析几何的例子引入矩阵的概念。如图1.1所示，一个两维的问题可以表示为点P的坐标(x_1，x_2)。然而，这一点又可以用与x_1ox_2坐标系成θ角的另一坐标系$\overline{x_1}o\overline{x_2}$中的坐标（$\overline{x_1}$，$\overline{x_2}$）来表示。从图1.1可见

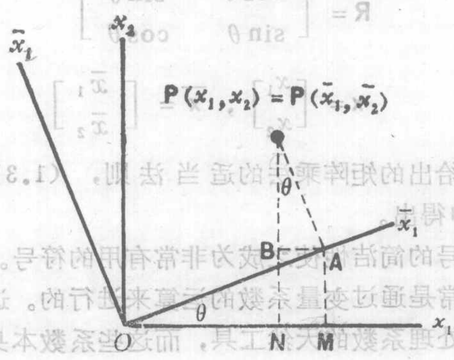

图1.1　通过坐标系旋转θ角进行的坐标转换

$$x_1 = \mathrm{OA}\cos\theta - \mathrm{AP}\sin\theta = \mathrm{OM} - \mathrm{NM}$$

$$= \bar{x}_1\cos\theta - \bar{x}_2\sin\theta \qquad (1.1)$$

$$x_2 = \mathrm{OA}\sin\theta + \mathrm{AP}\cos\theta = \mathrm{NB} + \mathrm{BP}$$

$$= \bar{x}_1\sin\theta + \bar{x}_2\cos\theta \qquad (1.2)$$

（1.1）和（1.2）式形成了方程组

$$\left.\begin{aligned} x_1 &= \bar{x}_1\cos\theta - \bar{x}_2\sin\theta \\ x_2 &= \bar{x}_1\sin\theta + \bar{x}_2\cos\theta \end{aligned}\right\} \tag{1.3}$$

上式可以方便地写成

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix} \tag{1.4}$$

含有$\sin\theta$和$\cos\theta$项的阵列称为矩阵。以$\mathbf{x}$表示“原”坐标的列，$\overline{\mathbf{x}}$表示“新”坐标的列，则（1.4）可以由矩阵符号写成

$$\mathbf{x} = \mathbf{R}\overline{\mathbf{x}}, \tag{1.5}$$

其中

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \overline{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix}$$

利用下面所给出的矩阵乘法的适当法则，（1.3）式可以从（1.4）式中得出。

矩阵符号的简洁性使之成为非常有用的符号。此外，方程组的运算通常是通过变量系数的运算来进行的。这样，矩阵组变成了一个处理系数的天然工具，而这些系数本身就是矩阵的元素。

矩阵是由数字或函数所组成的矩形表，并遵从一定的运算法则。矩阵中的每个表值称为元素，元素可以是数值（实数或虚数），也可以是函数，即$\cos\theta$等。尽管所介绍的矩阵例子是方阵，但在一般情况下，矩阵的行数并不一定等于列数。

通常，以有序下标变量表示矩阵的元素，例如，矩阵$\mathbf{A}$可以写成

$$
\mathbf{A}=[a_{ij}]=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13}\cdots & a_{1s} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23}\cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{r1} & a_{r2} & a_{r3}\cdots & a_{rs} \end{bmatrix} \tag{1.6}
$$

元素a_{ij}出现在矩阵的第i行第j列中。(1.6)式的矩阵有r行和s列，这个矩阵则称为$r\times s$阶矩阵。矩阵(1.6)也称为阶数为$(r,\ s)$的矩阵。如果$r=s$，则矩阵为方阵，而且阶数为r。在方阵中，元素a_{ii}组成了矩阵的对角元素。在以后的叙述中，矩阵将用大写的字母来表示，即$\mathbf{A}$或写成$[a_{ij}]$。符号$[a_{ij}]_{r\times s}$表示矩阵$\mathbf{A}$的阶数为$r\times s$。阶数为n的方阵可用符号$\mathbf{A}_n$表示。而矩阵的元素将以不带括号的a_{ij}表示之。

矩阵代数基本上基于四种运算法则：加法，数积，矩阵乘法和转置。这些将在有关课程中讨论。

矩阵$\mathbf{A}$和矩阵$\mathbf{B}$相等则说明这两个矩阵不仅有相同的阶数，而且对应元素亦相等。矩阵加法定义为：具有相同阶数$(r\times s)$的$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$矩阵的加法规则为

$$
\mathbf{A}+\mathbf{B}=[a_{ij}]_{(r,s)}+[b_{ij}]_{(r,s)}=[a_{ij}+b_{ij}]_{(r,s)} \tag{1.7}
$$

即，对应元素代数相加。如果$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$阶数不同，则和$\mathbf{A}+\mathbf{B}$就没有定义。矩阵加法遵从交换律和结合律。

交换律：$\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{B}+\mathbf{A}$ (1.8)

结合律：$\mathbf{A}+(\mathbf{B}+\mathbf{C})=(\mathbf{A}+\mathbf{B})+\mathbf{C}$ (1.9)

对于标量α有

$$
\alpha\mathbf{A}=\mathbf{A}\alpha=[\alpha a_{ij}] \tag{1.10}
$$

$$
\alpha(\mathbf{A}+\mathbf{B})=\alpha\mathbf{A}+\alpha\mathbf{B} \tag{1.11}
$$

两个矩阵之差首先将被减矩阵的每个元素以其负值代替，这样就可利用矩阵加法进行运算了。

在一定情况下，两个矩阵**A**和**B**可以相乘。如果**A**是$(r\times m)$阶矩阵，**B**是$(m\times n)$阶矩阵（即矩阵**A**的列数等于矩阵**B**的行数），矩阵乘积**AB**定义为$(r\times n)$阶矩阵，其第ij项由下式给出

$$ab_{ij}=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}b_{kj} \tag{1.12}$$

其中i的取值范围为1到r，j的取值范围为1到n。即矩阵**A**的第i行元素与矩阵**B**的第j列元素对应相乘，然后相加就得到矩阵乘积**AB**的第ij项元素。如果矩阵**A**的列数等于矩阵**B**的行数，则称矩阵**A**和矩阵**B**是可相乘矩阵。如果两个矩阵不可相乘，则矩阵乘积没有定义。

仅在特定情况下，矩阵乘积**AB**等于矩阵乘积**BA**。然而，如果**AB** = **BA**，则矩阵**A**和**B**称为可交换的。换句话说，通常的矩阵乘法是不可交换的。现在，用一个例子来表明矩阵乘法和数积之间的差异。考虑矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ -1 & 4 & 0\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 1 & -1\\ 2 & 2 & 2\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 1 & -1\\ 1 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

容易验证

$$AB = AC = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & -7 \end{bmatrix}$$

因而$AB = AC$，但是显然$B \neq C$

通常

（1）$AB \neq BA$；

（2）如果$AB = 0$，这并不表明矩阵A或矩阵B的所有元素都为零；

（3）如果$AB = AC$，这并不表明$B = C$。

如果两个矩阵A和B在两种次序下均具有可乘性，那么，矩阵的交换因子，用符号$[A, B]$表示，定义为

$$[A, B] = AB - BA \tag{1.13}$$

如果矩阵A和B是可交换的，那么，交换因子显然为零。

对矩阵乘法，存在着结合律和分配律：

$$(AB)C = A(BC) \qquad \text{结合律}$$

$$A(B + C) = AB + AC \qquad \text{分配律}$$

矩阵的转置即为行和列的互换。例如

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 1 \\ -3 & 2 & -1 \end{bmatrix} \text{的转置矩阵为} \begin{bmatrix} 4 & -3 \\ 0 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

在下文的叙述中，矩阵的转置用带撇号的字母符号表示，即A的转置矩阵为A'。转置具有如下性质

$$(A')' = A$$

$$(A + B)' = A' + B'$$

$$(\alpha A)' = \alpha A' \ (\alpha\text{是标量})，$$

$$(AB)' = B'A'$$

其中最后一个性质不是很明显，但是利用转置的定义和矩阵乘法法则并保持下标不变，则很容易导出这个性质。置$(\mathbf{AB})'$的第ij项为$(ab)'_{ij}$，则

$$(ab)'_{ij} = ab_{ji} = \sum_k a_{jk} b_{ki} = \sum_k b'_{ik} a'_{kj} = b'a'_{ij}$$

对于矩阵乘法没有经验的读者可能认为先转置第二个矩阵，然后再将行元素乘以行元素比根据（1.12）式中以行元素乘以列元素要容易些。

对于经常出现的重要矩阵类型，通常予以特殊名称，例如，一个方阵

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

称为对角矩阵。可见，所有非对角元素（$i \neq j$）均为零。如果矩阵的所有元素都为零，则此矩阵称为零矩阵或空矩阵。所有对角元素都相等的对角矩阵称为标量矩阵，其在通常乘法中的作用类似于一个标量，即

$$\begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 \\ 0 & 3 & 1 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \sqrt{2} \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 \\ 0 & 3 & 1 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

在$a_{ii} = 1$和$a_{ij} = 0$的特殊情况下，矩阵称为单位矩阵，与之相乘类似于与单位数量相乘。单位矩阵常用$\mathbf{I}_n$表示，其中n表示矩阵的阶数。当矩阵$\mathbf{A}$与$\mathbf{I}$有相同阶数时，易见，$\mathbf{IA} = \mathbf{AI} = \mathbf{A}$ 。

对称矩阵是方阵，诸如$\mathbf{A}=\mathbf{A}'$（$a_{ij}=a_{ji}$）。反对称矩阵（通常称为反号对称矩阵）也是一个方阵，其具有$\mathbf{A}=-\mathbf{A}'$（$a_{ij}=-a_{ji}$）特性。值得注意的是，在反对称矩阵中所有对称元素必须为零。当矩阵的元素用它的共轭复数代替时，就产生了复共轭矩阵，这个矩阵用$\widetilde{\mathbf{A}}$表示。矩阵$\mathbf{A}$的转置共轭用$\mathbf{A}^+$表示。例如，在量子力学中经常出现$\mathbf{A}=\mathbf{A}^+$，这样的矩阵称为哈密顿矩阵。

考虑坐标系旋转的两维问题。矩阵方程（1.5）导致

$$\mathbf{x}=\mathbf{R}\overline{\mathbf{x}}$$

原坐标$\mathbf{x}$是新坐标$\overline{\mathbf{x}}$的函数。在如下方程组中具有类似的情况

$$\left.\begin{aligned}x_1&=a_{11}\overline{x}_1+a_{12}\overline{x}_2+a_{13}\overline{x}_3\\x_2&=a_{21}\overline{x}_1+a_{22}\overline{x}_2+a_{23}\overline{x}_3\\x_3&=a_{31}\overline{x}_1+a_{32}\overline{x}_2+a_{33}\overline{x}_3\end{aligned}\right\}\qquad(1.14)$$

或

$$\mathbf{x}=\mathbf{A}\overline{\mathbf{x}}\text{，其中}\mathbf{A}=[a_{ij}]$$

这样的关系经常出现。在此可以说，原坐标以新坐标函数的形式出现。然而，往往需要从上述函数关系中得出以原坐标表示新坐标的关系。换句话说，企求如下类型的关系式

$$\overline{\mathbf{x}}=\mathbf{B}\mathbf{x}\qquad(1.15)$$

其中矩阵$\mathbf{B}$通常与矩阵$\mathbf{R}$有所不同。得到这样的结果需要利用矩阵的逆变换。实际上，矩阵所在的位置并不象通常数字代数所遇到的那样无关紧要。例如，在数字代数中，$y=3x$，通过除法可得$x=y/3$。

在作更进一步地讨论矩阵代数之前，我们简要地考虑一下

行列式的若干性质，正如所见，我们极为兴趣的是（3×3）阶矩阵的逆变换。一旦在单个矩阵的行列式值已知的情况下，则该矩阵的逆阵很容易求得。可是，严格说来，矩阵是可能在对其行列式毫无了解的前提下进行逆变换的。实际上，对阶数高于3（即3×3）的矩阵，可选择其它的数值方法来计算其逆阵。

第二章　行列式和矩阵的逆变换

行列式是一个唯一确定的标量，这个标量与一个阶数$n\geqslant 1$的方阵有关。n阶矩阵$\mathbf{A}=[a_{ij}]$的行列式依如下方法求得：首先从$\mathbf{A}$中不同行和列选取n个元素相乘作为行列式中的一项，其中元素排列以行下标从小到大为序。然后，将所有的项相加，每项的代数符号由列下标的交换次数决定。如果列下标的换位次数为偶数，该项的符号为正。反之，若为奇数，则符号为负。在这种情况下，以交换记号ε来确定各项的代数符号较为方便。ε具有如下性质

$$\varepsilon_{123}=\varepsilon_{312}=\varepsilon_{231}=1$$

$$\varepsilon_{132}=\varepsilon_{213}=\varepsilon_{321}=-1$$

换句话说，即

如果数字mnr的序列是序列123的偶次换位，则$\varepsilon_{mnr}=1$；

如果数字mnr的序列是序列123的奇次换位，则$\varepsilon_{mnr}=-1$。

在（3×3）阶矩阵$\mathbf{A}$中，行列式中的一项是

$$a_{11}a_{23}a_{32}$$

行下标组成了自然序列123。但是，决定该项符号的列下标却组成序列132，这是一个奇次换位，因而得到交换记号$\varepsilon_{132}=-1$，所以，这项的符号为负。对（2×2）阶矩阵$\mathbf{A}$的行列式，记为$\det\mathbf{A}$，$|\mathbf{A}|$或

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

我们可得

$$\det\mathbf{A} = \varepsilon_{12}a_{11}a_{22} + \varepsilon_{21}a_{12}a_{21}$$
$$= a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}。$$

应该注意，在以上两项的每一项中，矩阵**A**的每行和每列的元素仅精确地出现一次。对于（3×3）阶矩阵

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

$$\det\mathbf{A} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \varepsilon_{123}a_{11}a_{22}a_{33} + \varepsilon_{231}a_{12}a_{23}a_{31}$$
$$+ \varepsilon_{312}a_{13}a_{21}a_{32} + \varepsilon_{132}a_{11}a_{23}a_{32}$$
$$+ \varepsilon_{213}a_{12}a_{21}a_{33} + \varepsilon_{321}a_{13}a_{22}a_{31}$$
$$= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32}$$
$$- a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31} \quad (2.1)$$

以上求和可以如下方法进行因式分解

$$\det\mathbf{A} = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + a_{12}(a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33})$$
$$+ a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31}) \quad (2.2)$$

考虑第一项

$$a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32})$$

可见，括号内的量确实是子矩阵

$$\begin{bmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

的行列式。这个阶数为$(n-1)=2$的行列式称作为矩阵 **A** 的元素a_{11}的子式。同样，其它两项也含有 2 阶行列式。

现在，我们定义矩阵元素a_{ij}的余子式A_{ij}为$(-1)^{(i+j)}$乘以