

С. Б. Полотняк (г. Киев)

Численное моделирование фазового превращения В1 → В2 в образце из хлорида калия KCl при деформировании в гasketке аппарата сверхвысокого давления с алмазными наковальнями

Проведено численное моделирование процесса фазового превращения в образце из поликристаллического хлорида калия KCl при деформировании в квазигидростатических условиях на наковальнях аппарата сверхвысокого давления с алмазными наковальнями. Исследована стадийность процесса превращения и выявлены его закономерности. Показано, что фазовый переход в объеме конечного элемента приводит к существенному перераспределению полей напряжений, пластической и объемной деформации, а также к уменьшению давления в образце, приложенного к наковальням усилия и, соответственно, уменьшению движущей силы превращения. В процессе превращения в образце формируются несколько зародышей новой фазы, что обусловлено пластической релаксацией напряжений в упруго-пластически деформирующейся фазе В1 KCl — зарождение нового зародыша становится более выгодным, чем развитие старого.

Ключевые слова: метод конечных элементов; фазовое превращение мартенситного типа; хлорид калия; KCl; аппарат высокого давления с алмазными наковальнями; стадийность превращения.

Введение. Хлорид калия KCl является одним из щелочно-галоидных кристаллов, упругие, динамические и термодинамические характеристики, а также механизмы фазового превращения (ФП) при высоком давлении которого хорошо изучены в экспериментальных и теоретических исследованиях различных авторов [1—19]. Его широко используют в качестве тестового материала при разработке моделей, численных методик и алгоритмов для изучения поведения твердых тел при экстремальных параметрах. Как и у большинства щелочно-галоидных кристаллов, в хлориде калия KCl под влиянием внешнего воздействия (давление, температура) наблюдается фазовый переход из устойчивой при атмосферном давлении фазы низкого давления В1, имеющей структуру типа NaCl, в метастабильную фазу высокого давления В2 со структурой типа CsCl (рис. 1), сопровождающийся скачкообразным уменьшением объема (объемная деформация порядка 12 % [8, 10]) и изменением физико-механических свойств. Фазовая диаграмма для кристаллов KCl приведена на рис. 2. Поскольку новая фаза имеет отличные от фазы В1 оптические свойства, то переход можно наблюдать визуально. Экспериментально определенная величина давления ФП В1 → В2 для кристаллов KCl составляет ~ 2 ГПа, что и обуславливает широкое использование этого вещества для изучения закономерностей протекания ФП с использованием ставших в последнее время “стандартными” аппаратов сверхвысокого

давления с алмазными наковальнями (DAC) которые, несмотря на малый ($\sim 10^{-12} \text{ м}^3$) объем исследуемого образца, обеспечивают исключительно широкий диапазон изменения термодинамических параметров.

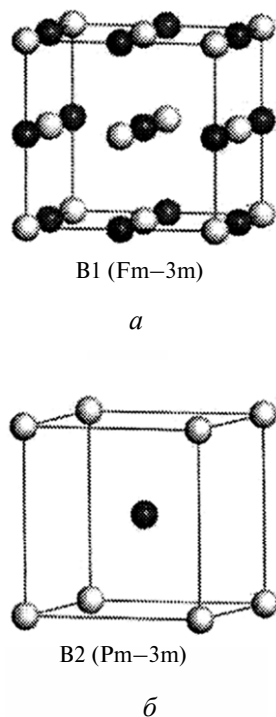


Рис. 1. Структура ионных кристаллов хлорида калия KCl: а — фаза низкого давления B1 (структура типа NaCl); б — фаза высокого давления B2 (структура типа CsCl).

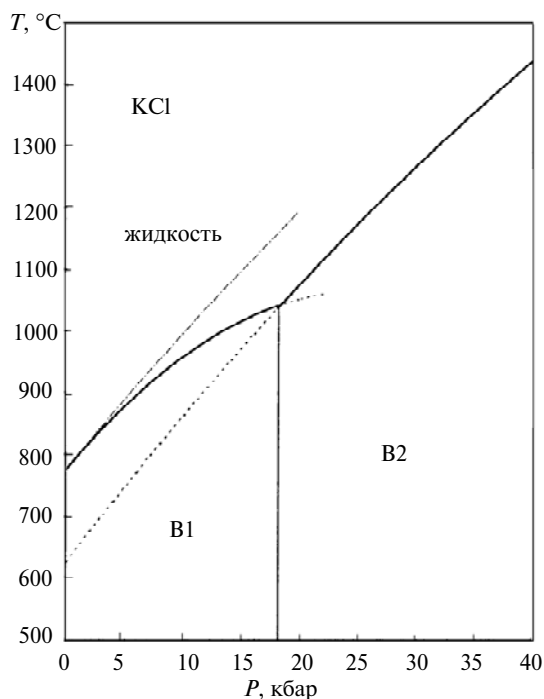


Рис. 2. Фазовая диаграмма хлорида калия [4].

Фазовые превращения, протекающие в кристаллических материалах при деформировании в DAC с использованием гasketок, но без передающей давление среды, имеют практически “мгновенный” характер, сопровождаются резким изменением объема и всех физико-механических свойств материала [20—23]. В литературе такие превращения классифицируют как мартенситные бездиффузионные или как полиморфные фазовые первого рода. В ходе ФП кристаллическая решетка новой фазы формируется за счет упорядоченного перемещения составляющих кристалл атомов исходной фазы, причем относительные смещения соседних атомов малы по сравнению с межуатомным расстоянием. Высокая скорость зарождения кристаллов новой фазы определяется малой величиной деформации, невысоким, по сравнению с энергией связи в кристалле, энергетическим барьером для однородного фазового перехода, упорядоченным строением и высокой подвижностью межфазных границ. При некотором отклонении от состояния равновесия избыточная энергия, необходимая для зарождения кристаллов новой фазы, становится сопоставимой с энергией присутствующих в исходной фазе дефектов и зарождение мартенситных кристаллов происходит с большой скоростью. Кроме того, вследствие воздействия образовавшейся фазы на исходную, энергетический барьер для перемещения границы фаз становится существенно меньше, чем для однородного перехода и при небольших отклонениях от равновесия

он исчезает — кристалл растет со скоростью порядка звуковой и без тепловой активации. Таким образом, ФП являются сложным термомеханическим процессом, сопровождающимся изменением механических свойств, фазовой деформацией, сложным распределением локальных напряжений и деформаций.

Для изучения закономерностей протекания ФП в деформируемых на алмазных наковальнях материалах с использованием термомеханической теории ФП в неупругих материалах [24—29] в Институте сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины разработана конечноэлементная методика [30], базирующаяся на использовании термодинамически обоснованного критерия фазового превращения в упруго-пластических материалах и экстремального принципа для определения всех неизвестных параметров. Серьезные затруднения термомеханического описания такого процесса обусловлены неопределенностью условий ФП, сложностью формулирования краевой задачи и значительной трудоемкостью ее численного решения. Поэтому цель данной работы состояла в исследовании кинетики мартенситного фазового превращения $B1 \rightarrow B2$ в кристаллах КС1 при их деформировании в ДАС при постоянной температуре с использованием разработанных методик, алгоритмов и программного обеспечения. При моделировании принято, что перестройка кристаллической решетки в микрообластях сводится к деформации ее ячейки и конечная фаза может рассматриваться как однородно деформированная исходная фаза.

Методика и алгоритм конечноэлементного моделирования фазового превращения мартенситного типа в малом объеме материала образца при деформировании в квазигидростатических условиях (в гаскетке, без передающей давление среды) на алмазных наковальнях. Методика и алгоритм решения поставленной задачи достаточно подробно изложены в [30].

Суть данного подхода состоит в следующем.

Рассмотрен процесс деформирования кристаллического образца в гаскетке аппарата с алмазными наковальнями. Система определяющих соотношений для моделирования процесса мартенситного ФП в упруго-пластических материалах при допущениях, что поведение новой и старой фаз описывается стандартной упруго-пластической моделью на основе условия пластического течения Мизеса, упругие свойства обеих фаз одинаковы, фазовая деформация чисто объемная, граница раздела фаз когерентна (перемещения при пересечении границы фаз непрерывны), имеет следующий вид:

- уравнения равновесия;
- кинематическое разложение полной деформации $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p + \boldsymbol{\varepsilon}_f$;
- закон Гука для упругой области;
- условие пластического течения Мизеса;
- ассоциированный закон пластического течения;
- критерий фазового перехода (для рассматриваемого случая)

$$\bar{X} = \int_0^{\varepsilon_{02}} 3\bar{\sigma}_0 d\varepsilon_0 - \Delta\psi^0 = k, \quad \bar{\sigma}_0 = \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \sigma_0 dV_n; \quad (1)$$

— принцип максимума

$$\mathbf{b}^*, \mathbf{b} (\mathbf{b} \in \mathbf{b}^*): F(\mathbf{b}) = 0, F(\mathbf{b}^*) = \int_{V_n^*} (X(\mathbf{b}^*) - k(\mathbf{b}^*)) dV_n < 0, F(\mathbf{b}^*) \rightarrow \max;$$

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{b}^*) &= \int_{V_n^*} (X(\mathbf{b}^*) - k(\mathbf{b}^*)) dV_n < 0 = F(\mathbf{b}) = \int_{V_n} (X(\mathbf{b}) - k(\mathbf{b})) dV_n ; \\
& \int_{\varepsilon_1^* V_n^*}^{\varepsilon_2^*} \int_{V_n^*} \boldsymbol{\sigma}^* : d(\boldsymbol{\varepsilon}_e^* + \boldsymbol{\varepsilon}_f^*) dV_n^* - \int_{V_n^*} \Delta \Psi^* dV_n^* - \int_{V_n^*} k^* dV_n^* < 0 = \\
& = \int_{\varepsilon_1 V_n}^{\varepsilon_2} \int_{V_n} \boldsymbol{\sigma} : d(\boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_f) dV_n - \int_{V_n} \Delta \Psi dV_n - \int_{V_n} k dV_n ; \\
\varphi(V_n^*, \bar{\sigma}_0^*) & \rightarrow \max, \quad \varphi = \int_0^{\varepsilon_{02}} 3\bar{\sigma}_0 d\varepsilon_0. \tag{2}
\end{aligned}$$

Здесь $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор деформаций; $\boldsymbol{\varepsilon}_e$, $\boldsymbol{\varepsilon}_p$ и $\boldsymbol{\varepsilon}_f$ — упругая, пластическая и фазовая деформации; V_n — объем материала, в котором в данный момент времени происходит ФП; \bar{X} — движущая сила превращения (осредненная по объему V_n величина приращения диссипации X вследствие непосредственно самого ФП); $\bar{\sigma}_0$ — осредненное по объему V_n давление; θ — температура; k — экспериментально определяемая величина диссипации энергии вследствие ФП; $\Delta \Psi_i^\theta$ — приращение температурной составляющей свободной энергии; $\varepsilon_0(\mathbf{r})$ — величина объемной деформации превращения, которая изменяется от нуля до своего предельного значения ε_{02} только в объеме V_n ; \mathbf{r} — радиус-вектор положения точки; \mathbf{b}^* — все возможные параметры ФП (положение, форма и ориентация зародыша, ε_f , ε_2 и др.); \mathbf{b} — те, для которых выполняется условие (1); φ — значение интеграла работы, зависящее только от объема зародыша новой фазы (его расположения и формы) и изменения осредненного по объему V_n давления.

Таким образом, для моделирования процесса ФП следует вычислять интеграл работы в уравнении (1) и рассчитывать изменение распределения локальных напряжений в зависимости от изменения фазовой деформации превращения. Для этого необходимо решить стандартную контактную упруго-пластическую задачу с заранее заданной объемной деформацией фазового превращения.

Алгоритм моделирования процесса протекания ФП в объеме материала образца основан на предположении, что в произвольный момент времени превращение может происходить только в одном конечном элементе. Тогда, при фиксированной температуре и известных значениях k и $\Delta \Psi^\theta$, величина интеграла работы φ (согласно критерию ФП (1)) дает полную информацию для оценки возможности ФП в данной точке материала. Поскольку заранее не известно, в какой именно точке материала образца будет происходить ФП (известно только то, что оно может происходить в объеме образца), то необходимо проверять всю область, занятую образцом — рассчитывать величину интеграла работы и на основании принципа максимума и критерия ФП принимать решение о возможности перехода. Поэтому последовательность вычислительного процесса будет следующей:

- задание исходной информации о конечноэлементном разбиении конструкции, упруго-пластических свойствах материалов, граничных условиях;
- задание области, в которой возможно протекание ФП (занимаемая образцом область);

— проверка всех конечных элементов (КЭ) в объеме материала образца на возможность протекания ФП. Для этого предполагают, что переход происходит в одном КЭ области, решают упруго-пластическую задачу с заданной величиной фазовой деформации ϵ_0 в этом элементе и рассчитывают условия ФП для него (интеграл работы и движущую силу перехода). Такую процедуру повторяют для всех КЭ в объеме материала образца;

— сортировка КЭ в этой области в соответствии с критерием максимума движущей силы. ФП будет происходить в элементе с максимальной движущей силой \bar{X} . Для этого КЭ задают величину ϵ_0 и повторно решают упруго-пластическую задачу, рассчитывая поля напряжений и деформаций нового двухфазного материала;

— возвращаются на второй этап и повторяют данную последовательность вычислений.

Данная последовательность вычислений позволяет выявить кинетику роста области ФП. Указанный алгоритм реализован в виде программ для разработанного в ИСМ НАН Украины вычислительного комплекса “Термомеханика 2” для численного решения контактных термоупруго-пластических задач по теории пластического течения при малых и конечных деформациях с учетом влияния высоких давлений и наличия фазовых превращений.

Численное моделирование кинетики фазового превращения $B1 \rightarrow B2$ в кристаллах КС1 при сжатии на алмазных наковальнях DAC. Рассмотрен процесс сжатия образца из поликристаллического хлорида калия, заключенного в гasketку из нержавеющей стали, при комнатной температуре в DAC (рис. 3). Диаметр рабочей поверхности алмазной наковальни составлял 300 мкм, диаметр образца — 150 мкм, начальная высота предварительно обжатого образца — 300 мкм.

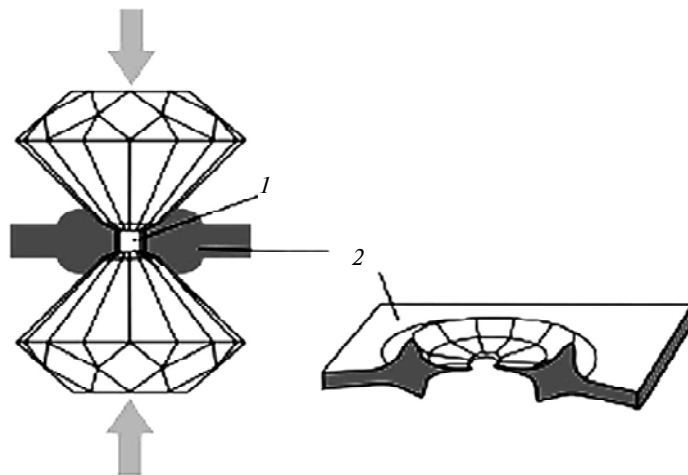


Рис. 3. Деформирование образца (1) из поликристаллического хлорида калия, заключенного в гasketку (2) из нержавеющей стали, при комнатной температуре в DAC.

Расчетная схема и конечноэлементная дискретизация исследуемой области приведены на рис. 4. Так как геометрия области и условия ее нагружения симметричны относительно оси наковален и срединной плоскости, задачу решали в осесимметричной постановке. Были заданы следующие граничные условия:

— по верхней поверхности наковальни — перемещение $u_z = -W$;

- по оси и плоскости симметрии — условия симметрии (касательные напряжения и величина соответствующего перемещения в направлении перпендикулярном к поверхности равны нулю);
- по поверхности контакта наковальня—прокладка—образец — условия абсолютного сцепления;
- по свободным поверхностям — условия отсутствия нормальных и касательных к границе напряжений.

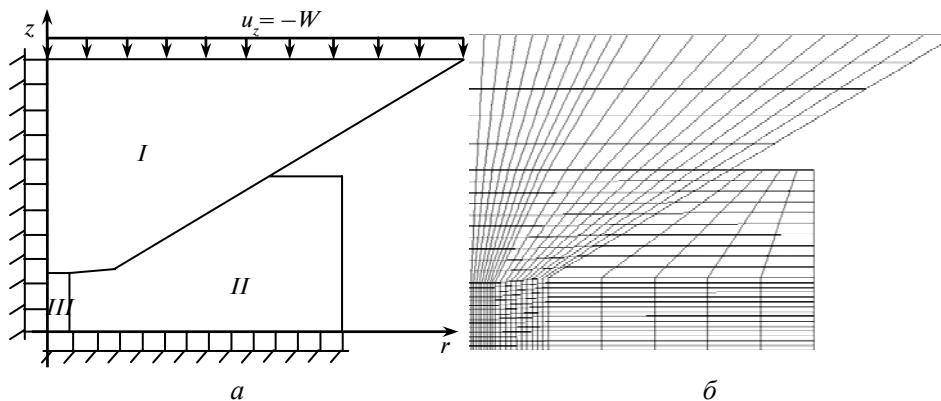


Рис. 4. Расчетная схема (а) решения задачи о деформировании образца КС1 в ДАС и дискретизация области на кубические изопараметрические конечные элементы (б): I — алмазная наковальня; II — гasketка из нержавеющей стали; III — образец.

Физико-механические характеристики материалов, использованные в расчетах, приведены в таблице.

Физико-механические характеристики материалов

Материал	Модуль Юнга, ГПа	Коэффициент Пуассона	Предел текучести, МПа
Алмаз	1070	0,07	—
Нержавеющая сталь	260	0,2525	3,66907
КС1, фаза В1	29,67	0,26	0,005
КС1, фаза В2	29,67	0,26	—

При моделировании были приняты следующие допущения:

- алмазные наковальни и фаза В2 КС1 (после ФП) деформируются упруго, а деформируемая гasketка из нержавеющей стали и фаза В1 КС1 — упруго-пластически;
- упругие свойства фаз В1 и В2 КС1 равны (имеющиеся в литературе данные о физико-механических свойствах фазы В2 крайне противоречивы, так как при атмосферном давлении данная фаза не существует);
- при постоянной температуре и заданной внешней нагрузке в материале образца происходит ФП с объемной фазовой деформацией $\epsilon_{02} = -0,12$;
- граница раздела фаз — когерентна, т. е. перемещения на границе непрерывны;
- давление ФП принимали равным 1,96 ГПа. Это вывод подтверждается как литературными данными, так и результатами проведенных ранее в ИСМ НАН Украины экспериментов по сжатию образцов данного материала на алмазных наковальнях.

Моделирование процесса деформирования образца поликристаллического КС1 в аппарате с алмазными наковальнями осуществляли пошагово — на каждом шаге нагружения задавали некоторую величину осевого смещения наковальни и рассчитывали распределение полей перемещений, деформаций, напряжений в исследуемой области. По завершении решения контактной упруго-пластической задачи, в соответствии с выше описанным алгоритмом, выполняли процедуры вычисления интеграла работы и движущей силы фазового превращения в материале образца КС1. Зависимость изменения максимального давления, сгенерированного в образце КС1, от приложенного усилия показана на рис. 5. На рис. 6 (см. цветную вклейку, стр. 39) приведено распределение величины накопленной пластической деформации q

(параметра Одквиста $q = \int \left(\frac{2}{3} \mathbf{d}_p : \mathbf{d}_p \right)^{\frac{1}{2}}$), величины объемной деформации ϵ_0 ,

давления $\sigma_0 = (\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta)/3$ в материале образца КС1 на первом, восьмом и 18-ом шаге нагружения (последний шаг нагружения без ФП).

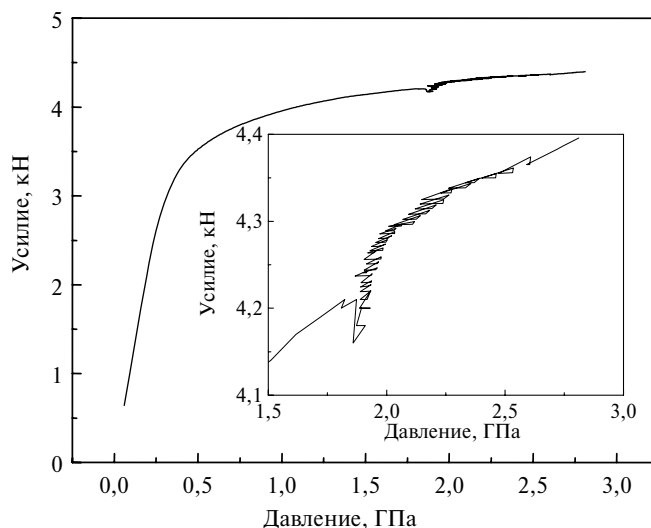


Рис. 5. Зависимость давления в образце КС1 от приложенного усилия.

Анализ показывает что, начиная с первого шага нагружения материал исследуемого образца деформируется пластически, максимальная величина накопленной пластической деформации на 18-ом шаге нагружения достигает 1,5 %. Характер распределения q по объему образца характеризуется значительной неравномерностью — наиболее деформированными являются области вблизи плоскости симметрии и границы образец—гasketка. Распределение давления и величины объемной деформации на первых шагах деформирования также имеет неоднородный характер: наибольшие значения этих величин наблюдаются в области контакта наковальня—образец и вблизи плоскости симметрии (для давления). При последующем нагружении области максимальных значений этих параметров значительно расширяются по направлению к плоскости симметрии образца, характер их распределения становится менее неоднородным и к 18-ому шагу нагружения градиент изменения давления и объемной деформации становится незначительным (область максимальных значений расположена вблизи плоскости симметрии).

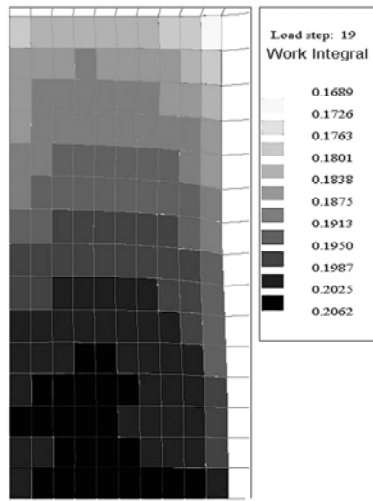


Рис. 7. Распределение величины интеграла работы в образце КС1 после 19-го шага нагружения.

На 19-ом шаге нагружения, в деформируемом образце появляются небольшие объемы материала, для которых начинают выполняться условия фазового превращения. В ряде конечных элементов величина интеграла работы ϕ начинает превышать сумму коэффициента диссипации k и приращения температурной составляющей свободной энергии $\Delta\psi^0$. На рис. 7 приведено распределение величины ϕ по объему образца после 19-го шага нагружения. Максимальное значение ϕ достигается в элементе 496. В соответствии с алгоритмом вычислительного процесса для этого КЭ необходимо задать величину ϵ_0 и повторно решить упруго-пластическую задачу, рассчитывая поля напряжений и деформаций нового двухфазного материала.

Фазовый переход в элементе 496 (рис. 8) приводит к существенному перераспределению полей интеграла работы, давления, объемной деформации, накопленной пластической деформации и, если в случае пластической и объемной деформации локальное перераспределение существует в некоторой окрестности этого элемента, то для давления и интеграла работы изменения происходят во всем объеме образца. Наблюдается уменьшение давления и приложенного к наковальням интегрального усилия. Проверка выполнения условий ФП после этого перехода показала, что дальнейшее развитие процесса превращения возможно только после увеличения величины приложенного к наковальням усилия (следует продолжить процесс нагружения).

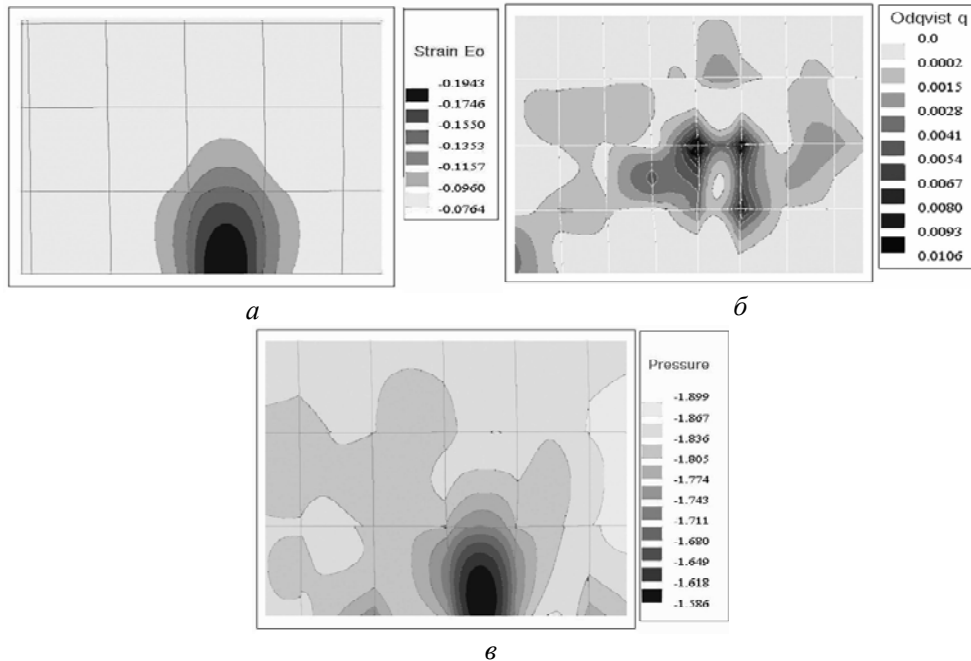
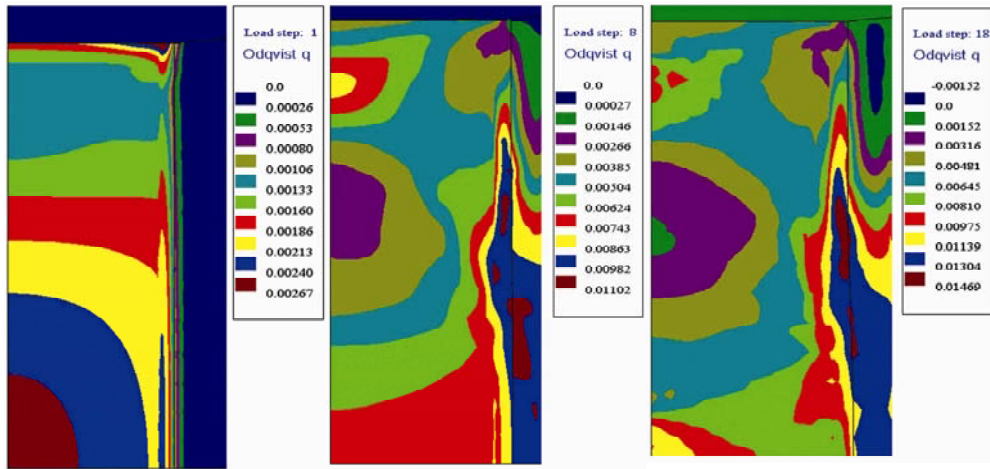
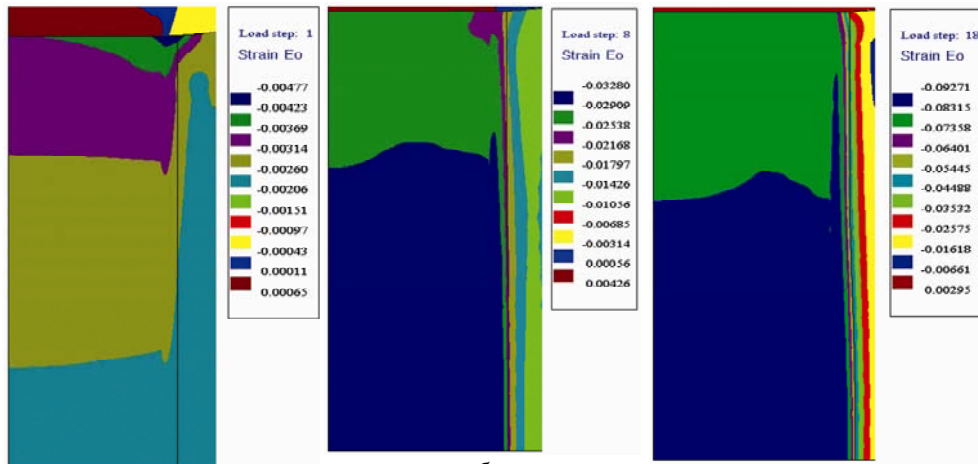


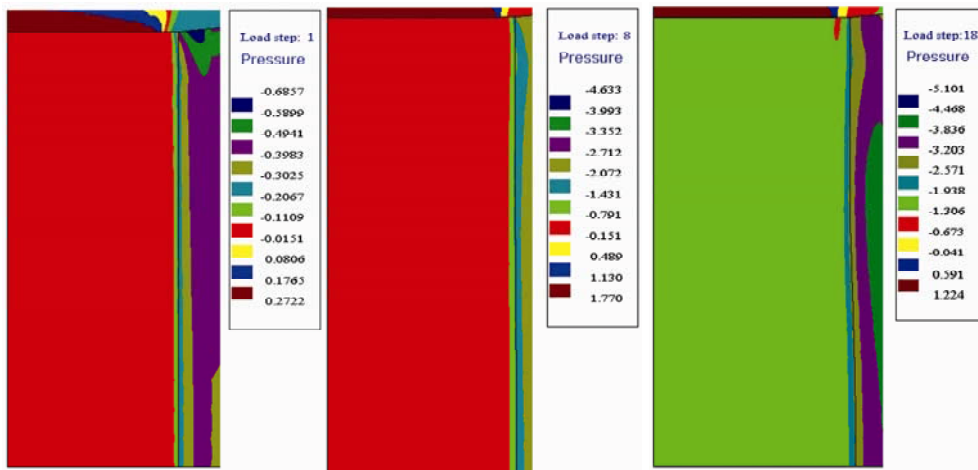
Рис. 8. Распределения объемной деформации (а), накопленной пластической деформации (б), давления (в) в материале образца после ФП в конечном элементе 496.



a



b



в

Рис. 6. Распределение полей накопленной пластической деформации q (a), объемной деформации (б), гидростатического давления σ_0 (в) в образце КС1 на первом (слева), восьмом (посередине) и 18-ом (справа) шагах нагружения (последний шаг нагружения без ФП).

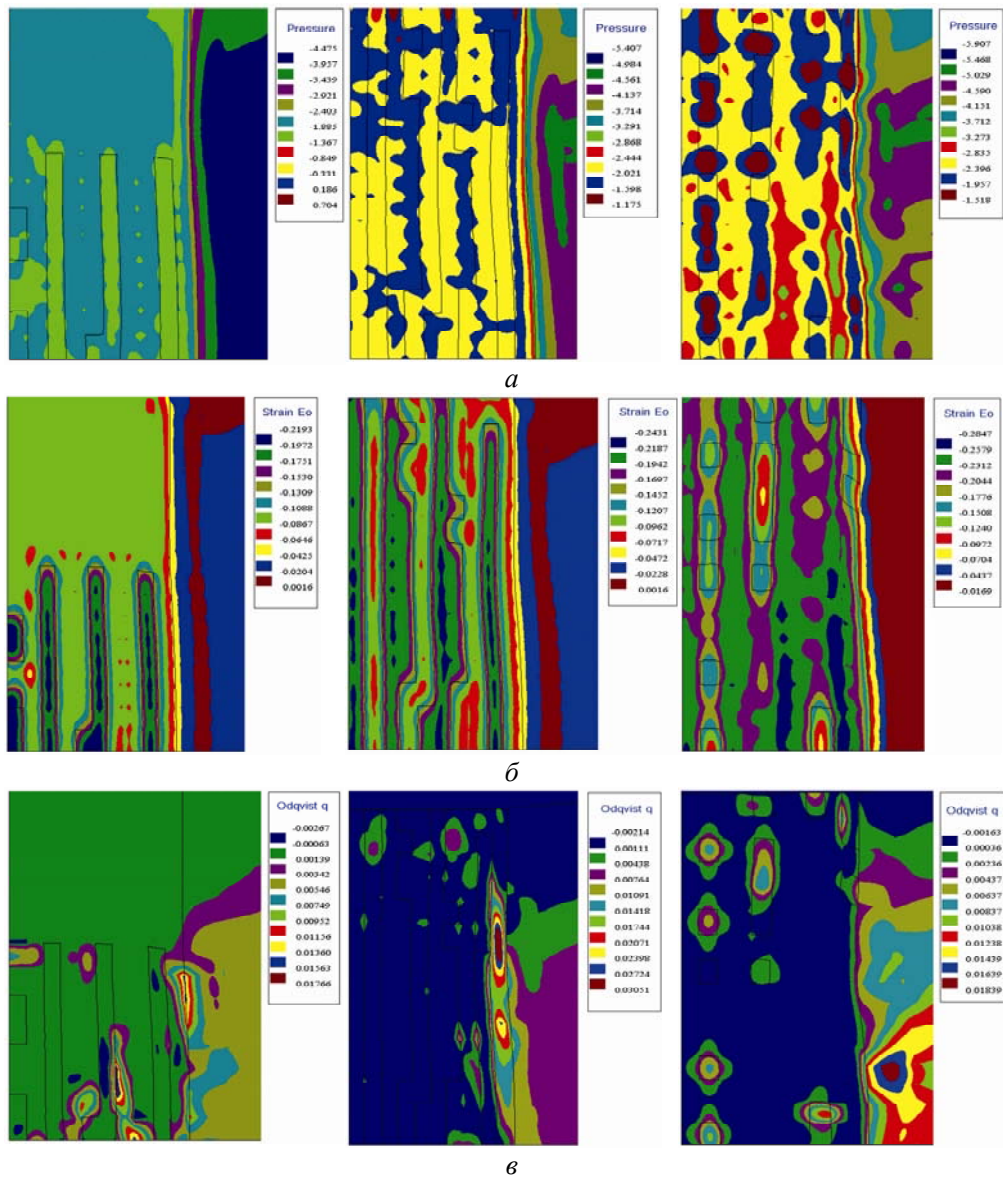


Рис. 10. Распределения полей давления (*a*), объемной деформации (*b*), накопленной пластической деформации (*c*) на различных стадиях процесса фазового превращения (слева, посередине и справа — 20, 50, 90 % концентрации новой фазы соответственно).

После 20-го шага нагружения условия фазового превращения начинают поочередно выполняться в конечных элементах 495, 486. Формируется зародыш новой фазы. Однако при последующем нагружении наряду с развитием существующего зародыша фазы В2 наблюдается и формирование нового зародыша. Такое поведение образца обусловлено локальным перераспределением компонент тензоров напряжений и деформаций в упруго-пластически деформирующейся фазе В1 образца. Вследствие пластической релаксации напряжений формирование нового зародыша становится более выгодным, чем развитие старого. При последующем нагружении, наряду с развитием уже существующих зародышей, происходит также формирование новых. На рис. 9 показана стадийность протекания фазового превращения в материале образца.

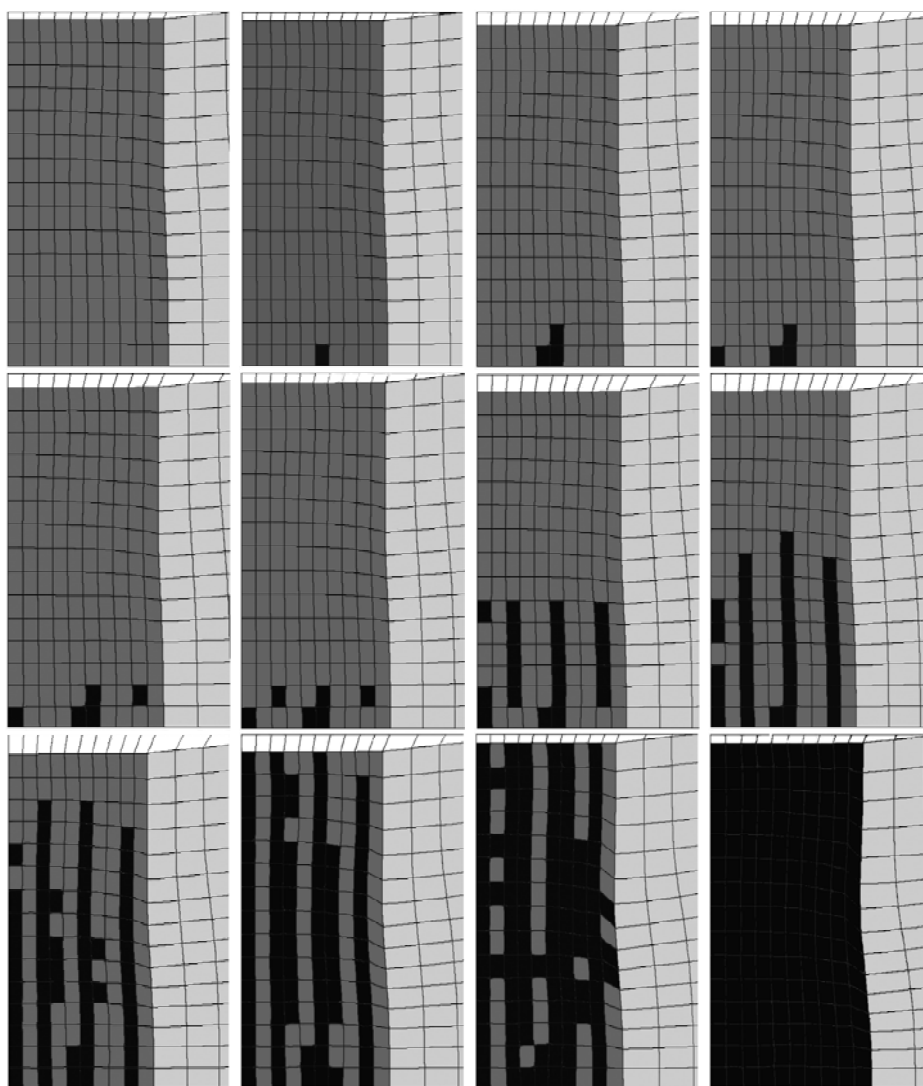


Рис. 9. Стадийность процесса фазового превращения В1 → В2 в материале образца поликристаллического хлорида калия KCl: □ — алмаз; □ — нержавеющая сталь; ■ — В1 фаза KCl, ■ — В2 фаза KCl.

Фазовое превращение, протекающее в материале исследуемого образца, вызывает существенные изменения в распределении полей напряжений и деформаций по объему образца. До начала фазового перехода распределение давления, величины накопленной пластической деформации, объемной деформации в исследуемом материале имело практически однородный характер (градиент изменения по объему материала образца не превышал 6 %), а после ФП в первом КЭ в распределении параметров напряженно-деформированного состояния образца начинают происходить изменения. Если на начальной стадии процесса фазового превращения эти изменения носили локальный характер, то после достижения концентрации новой фазы более 5 % возмущение, вызываемое элементами, в которых произошло ФП, становится существенным, вызывает значительную концентрацию в распределениях полей напряжений и деформаций и способствует протеканию ФП в материале образца. Если на начальной стадии превращения после приложения внешней нагрузки ФП происходит в одном или максимум в двух конечных элементах (без увеличения внешней нагрузки), то после достижения концентрации новой фазы порядка 20 % — в 7—12 элементах. Распределение полей давления, объемной деформации и накопленной пластической деформации на различных стадиях развития процесса фазового превращения В1 → В2 в образце КС1 приведены на рис. 10 (см. цветную вклейку, стр. 40).

Таким образом, анализируя стадийность протекания фазового превращения в поликристаллическом образце хлорида калия при деформировании в гasketке аппарата с алмазными наковальнями, следует отметить, что при ФП в образце происходит формирование нескольких зародышей новой фазы, что обусловлено пластической релаксацией напряжений в упруго-пластически деформирующейся фазе В1 образца, процесс развивается в направлении приложения нагрузки и характеризуется значительной неоднородностью распределения локальных полей напряжений и деформаций, способствующей протеканию процесса ФП. На рис. 11 приведены фотографии образцов КС1, полученные в ИСМ НАН Украины и Техасском Техническом университете (США) при изучении закономерностей процессов деформирования материалов в ДАС. Распределение фаз В1 и В2 в образце согласуется с расчетным (рис. 9). На рис. 12, 13 представлены полученные в результате проведенного расчета и экспериментов [8, 19] данные по зависимости концентрации фазы В2 и нормализованного объема $V(p)/V(0)$ образца поликристаллического КС1 от давления. Некоторое несовпадение результатов по концентрации обусловлено тем, что в эксперименте [19] фазовый переход начинался при $2,09 \pm 0,03$ ГПа и заканчивался при $2,82 \pm 0,1$ ГПа, а в расчете давление начала перехода составляло 1,96 ГПа. Кроме того, в эксперименте [19] нагружение

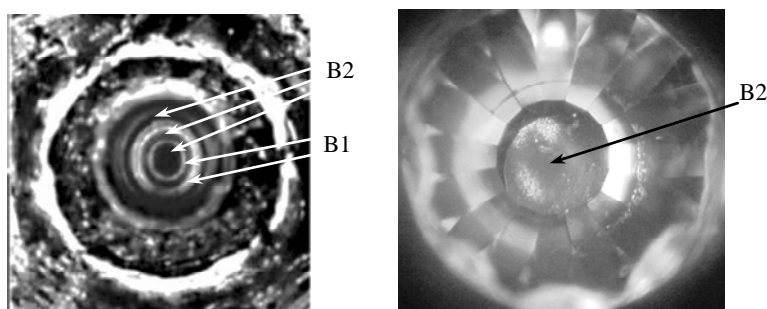


Рис. 11. Фазовое превращение в образцах из КС1 при деформировании на алмазных наковальнях.

образца осуществляли ступенями с выдержкой при постоянном давлении в течение нескольких минут при ФП, а в расчете после увеличения усилия допускали снижение давления в образце в ходе ФП.

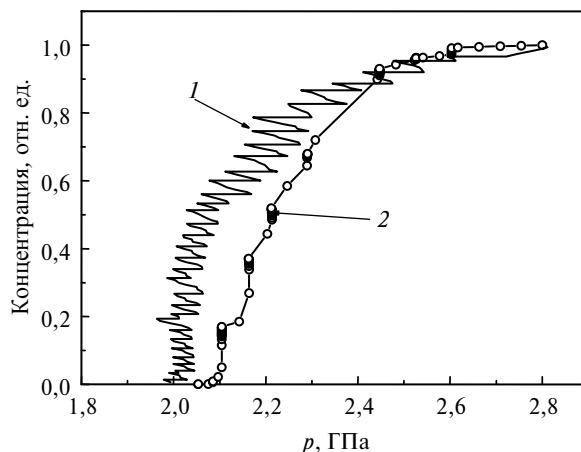


Рис. 12. Зависимость концентрации фазы В2 в образце поликристаллического КСl от давления: 1 — расчетные данные, 2 — эксперимент [19].

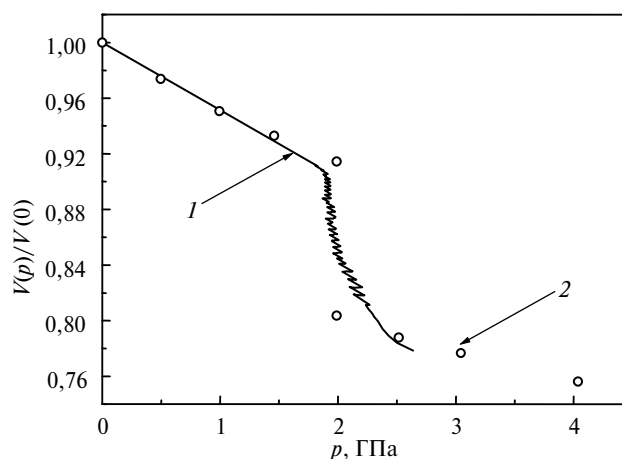


Рис. 13. Зависимость нормализованного объема $V(p)/V(0)$ образца КСl от давления в процессе нагружения и ФП: 1 — расчет, 2 — эксперимент [8].

Выводы

В результате численного моделирования фазового превращения в образце из поликристаллического хлорида калия КСl деформируемого в квазигидростатических условиях в аппарате сверхвысокого давления с алмазными наковальнями получены распределения компонент тензоров напряжений и деформаций в объеме образца в ходе превращения, исследована стадийность процесса и выявлены его закономерности. Установлено, что:

— фазовый переход в объеме конечного элемента приводит к существенному перераспределению компонент тензоров напряжений и деформаций, полей пластической и объемной деформации, а также к уменьшению давления в образце, приложенного к наковальням усилия и, соответственно, уменьшению движущей силы превращения;

— в процессе превращения в образце формируются несколько зародышей новой фазы, что обусловлено пластической релаксацией напряжений в упруго-пластически деформирующейся фазе В1 образца — формирование нового зародыша становится более выгодным, чем развитие старого.

Сравнение полученных в результате расчетов данных с экспериментальными подтверждает достоверность разработанных методики и программного обеспечения для численного моделирования процессов фазовых превращений мартенситного типа в малых объемах материалов при их деформировании в ДАС.

1. *Campbell A. J., Heinz D. L.* Compression of KCl in the B2 structure to 56 GPa // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1991. — **52.** — P. 495 — 499.
2. *Boehler R., Kennedy G. C.* Equation of state of sodium chloride up to 32 kbar and 500 °C // *Ibid.* — 1980. — **41.** — P. 517—523.
3. *Hofmeister A. M.* IR spectroscopy of alkali halides at very high pressures: calculation of equation of state and the response of bulk moduli to the B1 → B2 phase transition // *Phys. Rev. B.* — 1997. — **56.** — P. 5835—5855.
4. *Pistorius C. W. F. T.* Melting curves of the potassium halides at high pressures // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1965. — **26.** — P. 1543—1548.
5. *Recio J. M., Pendas A. M., Francisco E. et al.* Low-pressure and high-pressure equations of state for the alkali chlorides // *Phys. Rev. B.* — 1993. — **48.** — P. 5891—5901.
6. *Vaidya S. N., Kennedy G. C.* Compressibility of 27 halides to 45 kbar // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1971. — **32.** — P. 951—964.
7. *Yagi T.* Experimental determination of thermal expansivity of several alkali halides // *Ibid.* — 1978. — **39.** — P. 563 — 571.
8. *Walker D., Cranswick L. M. D., Verma P. K. et al.* Thermal equations of state for B1 and B2 KCl // *American Mineralogist.* — 2002. — **87.** — P. 805—812.
9. *Zhang S., Chen N.* Study on the high-pressure properties of KCl by inversion pair potentials // *Mater. Sci. Eng. B.* — 2003. — **99.** — P. 588—592.
10. *Yazar H. R.* High-pressure phase transition in some alkali halides using interatomic potential modes // *Turk. J. Phys.* — 2003. — **27.** — P. 195—199.
11. *Riedel M., Dassler R.* Pressure-induced nucleation and growth processes in the diamond anvil cell // *J. Crystal Growth.* — 1990. — **106.** — P. 695—704.
12. *Карпенко С. В., Кяров А. Х., Темроков А. И.* Структурные фазовые переходы типа В1→В2 в ограниченных ионных кристаллах // *Физика твердого тела.* — 2006. — **48,** вып. 3. — С. 529—535.
13. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества /* Под ред. акад. В. Е. Фортова и др. — М.: Наука, 2000. — 425 с.
14. *Сойфер Я. М., Вердян А.* Исследование локальных механических свойств монокристаллов хлористого калия методом атомно-силовой микроскопии // *Физика твердого тела.* — 2003. — **45,** вып. 9. — С. 1621—1625.
15. *Anderson O. L.* *Physical Acoustics* IIIВ. — N. Y.: Academic Press, 1965. — 77 p.
16. *Новиков Н. В., Полотняк С. Б., Шведов Л. К., Кривошея Ю. Н.* Сопротивление сдвигу материалов при сверхвысоких давлениях // *Сверхтв. материалы.* — 2005. — № 5. — С. 16—25.
17. *Новиков Н. В., Полотняк С. Б., Шведов Л. К., Левитас В. И.* Закономерности фазовых превращений и пластического деформирования материалов при сжатии и сдвиге в алмазных наковальнях: эксперименты и теория // Там же. — 1999. — № 3. — С. 39—51.
18. *Новиков Н. В., Шведов Л. К., Полотняк С. Б., Левитас В. И.* Экспериментальное исследование влияния сдвиговой деформации на фазовые превращения в различных материалах // *Синтез, спекание и свойства сверхтвердых материалов.* — Киев: Ин-т сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2000. — С. 131—144.
19. *Львищ Л. Д., Рябинин Ю. Н., Ларионов Л. В., Зверев А. С.* О мартенситном характере полиморфного перехода в КСl при высоком давлении // *ЖЭТФ.* — 1968. — **55,** № 4. — С. 1173—1185.
20. *Jayaraman A.* Diamond anvil cell and high-pressure physical investigations // *Rev. Modern Physics.* — 1983. — **55,** N 1. — P. 65—108.

21. *Jayaraman A.* Ultrahigh pressure // *Rev. Sci. Instrum.* — 1986. — **57**, N 6. — P. 1013—1031.
22. *Sherman W. F., Stadtmuller A. A.* Experimental techniques in high pressure research. — London: John Wiley & Sons Ltd, 1987. — 471 p.
23. *Novikov N. V., Petrusha I. A., Shvedov L. K. et al.* Abrupt irreversible transformation of rhombohedral BN to a dense form in uniaxial compression of CVD material // *Diamond Relat. Mater.* — 1999. — **8**. — P. 361—363.
24. *Levitas V. I.* Thermomechanical theory of martensitic phase transformations in inelastic materials // *Int. J. Solids Struct.* — 1998. — **35**, N 9—10. — P. 889—940.
25. *Levitas V. I.* Thermomechanics and kinetics of generalized second-order phase transitions in inelastic materials. Application to ductile fracture // *Mech. Res. Commun.* — 1998. — **25**, N 4. — P. 427—436.
26. *Levitas V. I.* General thermomechanical and kinetic approach to structural changes in inelastic material // *Constitutive and Damage Modelling of Inelastic Deformation and Phase Transformation: Proc. of "Plasticity'99"* / Ed. A. Khan. — Maryland: Neat Press Fulton, 1998. — P. 235—238.
27. *Levitas V. I.* Structural changes without stable intermediate state in inelastic material. Part I. General thermomechanical and kinetic approaches // *Int. J. Plasticity.* — 2000. — **16**. — P. 805—849.
28. *Levitas V. I.* Structural changes without stable intermediate state in inelastic material. Part II. Applications to displacive and diffusional-displacive phase transformations, strain-induced chemical reactions and ductile fracture // *Ibid.* — 2000. — **16**. — P. 851—892.
29. *Levitas V. I.* Continuum mechanical fundamentals of mechanochemistry // *High Pressure Surface Science and Engineering. Section 3.* — Bristol: Institute of Physics / Eds. Y. Gogotsi, V. Domnich. — 2004. — P. 159—292.
30. *Полотняк С. Б.* Методика численного моделирования процессов мартенситных фазовых превращений протекающих в малых объемах материалов при деформировании на алмазных наковальнях // *Сверхтв. материалы.* — 2008. — № 2. — С 13—28.

Ин-т сверхтвердых материалов
им. В. Н. Бакуля НАН Украины

Поступила 11.10.07