

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.26 : 518.5

ДВОЙНИКОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ МАРТЕНСИТНОЙ ФАЗЫ

А. Г. Хунджуа, А. В. Сорокин, Е. В. Чернов

(кафедра физики твердого тела)

Исследованы кристаллографические особенности двойникового системы мартенситных кристаллов, сформированных в результате фазового превращения из монокристалла исходной фазы. Показано, что в сплавах с эффектом памяти формы двойникование приводит к переходу от одного варианта ориентационного соотношения к другому, кристаллографически эквивалентному.

Мартенситные превращения в металлических сплавах сопровождаются двойникованием мартенситных кристаллов. В сплавах с эффектом памяти формы механизм запоминания непосредственно связан с двойникованием. Таким образом, двойникование при выделении кристаллов второй фазы является закономерным процессом для широкого круга металлических сплавов и требует детального изучения.

При мартенситных превращениях решетки исходной фазы и мартенсита связаны строгим ориентационным соотношением, которое описывается матрицей соответствия \hat{A} , преобразующей координаты произвольного вектора \mathbf{r} в двух базисах. Пусть $\mathbf{r} = \sigma_i \mathbf{a}_i = \sigma'_i \mathbf{b}_i$, где $\{\mathbf{a}_i\}$ и $\{\mathbf{b}_i\}$ — базисные векторы кристаллических решеток исходной фазы и мартенсита. Тогда вектор-столбцы σ и σ' связаны соотношениями

$$\sigma = \hat{A}\sigma'; \quad \sigma' = \hat{A}^{-1}\sigma. \quad (1)$$

В зависимости от сингонии кристалла исходной фазы ориентационное соотношение допускает реализацию нескольких кристаллографически эквивалентных вариантов взаимной ориентации решеток, каждый из которых вносит свой вклад в дифракционную картину. В случае кубической симметрии кристалла исходной фазы таких вариантов может быть не более 24, каждый из которых описывается соответствующей матрицей \hat{A}_i . Используя операторы симметрии кристаллической решетки исходной фазы \hat{S}_i , можно получить матрицы \hat{A}_i , исходя из какой-либо одной:

$$\hat{A}_i = \hat{S}_i \hat{A}.$$

Для кубической решетки исходной фазы 24 оператора симметрии можно получить, комбинируя три оператора поворота на 90° вокруг базисных векторов

$$\hat{X} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \hat{Y} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \hat{Z} = \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 &= \hat{E}; \quad \hat{S}_2 = \hat{X}^2; \quad \hat{S}_3 = \hat{Y}^2; \quad \hat{S}_4 = \hat{Z}^2; \\ \hat{S}_{5-8} &= \hat{X}\hat{S}_{1-4}; \quad \hat{S}_{9-12} = \hat{Y}\hat{S}_{1-4}; \quad \hat{S}_{13-16} = \hat{Z}\hat{S}_{1-4}; \\ \hat{S}_{17-20} &= \hat{X}\hat{S}_{9-12}; \quad \hat{S}_{21-24} = \hat{X}\hat{S}_{13-16}. \end{aligned} \quad (2)$$

Если двойникование мартенсита не приводит к кристаллографически эквивалентному варианту ориентационного соотношения, на дифракционных картинах в результате двойникования появится дополнительная система рефлексов. При моделировании дифракционных картин двойникование мартенсита может быть учтено путем видоизменения формул [1] посредством замены матрицы \hat{A} на матрицу $\hat{A}\hat{D}$, где \hat{D} — матрица двойникования, конкретный вид которой определяется плоскостью двойникования и сингонией решетки мартенсита. Расчет матрицы двойникования основан на решении системы уравнений, связывающих индексы трех некопланарных векторов в решетках мартенсита и двойника. Операцию двойникования формально можно описать поворотом на 180° вокруг нормали к плоскости двойникования. В результате такого поворота вектор нормали к плоскости (H, K, L), имеющий индексы

$[H_n, K_n, L_n]$, остается неизменным, а координаты векторов, лежащих в плоскости двойникования, меняют свой знак на противоположный. Вектор нормали к плоскости двойникования $\sigma_n = \{H_n, K_n, L_n\} = \{H, K, L\} \hat{g}^{-1}$, где \hat{g} — фундаментальный метрический тензор [2]. В качестве двух векторов, лежащих в плоскости двойникования, можно взять векторы $\sigma_1 = \{-K, H, 0\}$ и $\sigma_2 = \{0, -L, K\}$. Матрицу D находим из решения системы уравнений

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_n &= D\tilde{\sigma}_n; & -\tilde{\sigma}_1 &= \tilde{D}\tilde{\sigma}_1; & -\tilde{\sigma}_2 &= \tilde{D}\tilde{\sigma}_2; \\ \tilde{D} &= \frac{1}{HH_n + KK_n + LL_n} \begin{vmatrix} HH_n - KK_n - LL_n & 2H_nK & 2H_nL \\ 2HK_n & KK_n - HH_n - LL_n & 2K_nL \\ 2HL_n & 2KL_n & LL_n - HH_n - KK_n \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (3)$$

при этом $\det \tilde{D} = 1$, $\tilde{D}^2 = E$.

Случай, когда двойникование приводит к кристаллографически эквивалентному варианту ориентационного соотношения, может быть описан матричными уравнениями вида $\hat{S}_i \hat{A} = \hat{A} \tilde{D}_i$. Тогда если матрица двойникования D (3) совпадает хотя бы с одним из решений уравнения

$$\tilde{D}_i = \hat{A}^{-1} \hat{S}_i \hat{A}, \quad (4)$$

то двойникование приводит к эквивалентному варианту ориентационного соотношения и рентгенографически такие двойники не выявляются. Среди матриц \tilde{D}_i (4) не все являются матрицами двойникования. Выявление матриц, описывающих двойникование, сводится к решению задачи на собственные значения: если матрица \tilde{D}_i имеет собственные значения $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$, она описывает двойникование по плоскости, нормаль к которой определяется собственным вектором, соответствующим λ_1 .

Собственные значения матрицы \tilde{D}_i есть корни уравнения вида

$$\lambda^3 - J_1 \lambda^2 + J_2 \lambda - J_3 = 0, \quad (5)$$

где $J_1 = d_{11} + d_{22} + d_{33} = \text{Tr } \tilde{D}_i$, $J_2 = d_{11}d_{22} + d_{22}d_{33} + d_{11}d_{33} - d_{12}d_{21} - d_{13}d_{31} - d_{23}d_{32}$, $J_3 = \det \tilde{D}_i = 1$, d_{ij} — элементы матрицы \tilde{D}_i . С другой стороны, если матрица \tilde{D}_i является матрицей двойникования, уравнение (5) представимо в виде

$$(\lambda - 1)(\lambda + 1)(\lambda + 1) = 0,$$

что накладывает ограничения на коэффициенты: $J_1 = -1$, $J_2 = -1$.

Запишем задачу на собственные значения в виде

$$\lambda \sigma' = \tilde{D}_i \sigma' = \hat{A}^{-1} \hat{S}_i \hat{A} \sigma'. \quad (6)$$

Выразим σ' через σ (1), тогда уравнение (6) принимает вид

$$\lambda \sigma = \hat{S}_i \sigma,$$

т. е. собственные значения матрицы \tilde{D}_i совпадают с собственными значениями соответствующего оператора \hat{S}_i , и матрица \tilde{D}_i является матрицей двойникования, только если оператор \hat{S}_i имеет собственные значения $\lambda_1 = 1$, $\lambda_{2,3} = -1$. Из группы операторов $\{\hat{S}_i\}$ (2) этому условию удовлетворяют 9 операторов: $\hat{S}_2 - \hat{S}_4$, \hat{S}_7 , \hat{S}_8 , \hat{S}_{10} , \hat{S}_{12} , \hat{S}_{14} , \hat{S}_{15} , собственные векторы которых, соответствующие $\lambda = 1$, определяют нормаль к плоскости двойникования, выраженную в индексах решетки исходной фазы. Собственные векторы операторов $\hat{S}_2 - \hat{S}_4$ соответствуют трем плоскостям типа $\{100\}$, а остальных шести операторов — плоскостям типа $\{110\}$.

Таким образом, если плоскость двойникования кристаллов мартенсита оказывается параллельной одной из перечисленных выше плоскостей кристалла исходной фазы (плоскости симметрии), двойникование приводит к кристаллографически эквивалентному варианту ориентационного соотношения и дополнительные рефлексы от двойников на дифракционных картинах не появляются. Именно такая ситуация имеет место при двойниковании термоупругого мартенсита в сплавах с эффектами памяти формы. Например, в системах Ti—Ni, Ni—Al, Mn—Cu, In—Ti, Cu—Al—Ni [3] мартенситные кристаллы сдвойникованы по плоскостям, параллельным плоскостям $\{110\}$ кристалла исходной фазы.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Захарова М. И., Сорокин А. В., Хунджуа А. Г. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1984. 25, № 4. С. 80. [2] Васильев Д. М. Физическая кристаллография. М., 1972. [3] Сплавы с эффектами памяти форм. М., 1990.

Поступила в редакцию
03.12.90

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1991. Т. 32, № 5

УДК 669.866

СТРУКТУРА И МАГНИТОУПРУГИЕ СВОЙСТВА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ФАЗ ЛАВЕСА ТИПА C15

Г. В. Бондарькова, А. С. Илюшин, И. А. Никанорова

(кафедра физики твердого тела)

Представлены результаты теоретического расчета спин-ориентационных магнитных фазовых диаграмм для ряда сечений системы $(\text{Tb}_{1-x}\text{Ho}_x)_{1-y}\text{Dy}_y\text{Al}_2$, температурные и концентрационные зависимости энергии магнитокристаллической анизотропии.

Редкоземельные фазы Лавеса C15 и сплавы на их основе являются перспективными магнитоупругими материалами, уже нашедшими применение в современной технике [1—3]. В качестве основных требований, предъявляемых к их магнитным характеристикам, выделяют в первую очередь два: большую величину магнитоупругости λ и малую энергию магнитокристаллической анизотропии W_{ma} . Решение поставленной задачи может быть найдено с помощью синтеза фаз Лавеса типа C15, содержащих три или более редкоземельных компонента. Эмпирический поиск сплавов с оптимальными магнитными характеристиками сопряжен со значительными экспериментальными трудностями, большей части которых можно избежать, если использовать расчетные методы [4]. Из работ [3, 4] известно, что для редкоземельных фаз Лавеса можно вполне корректно провести расчеты на основе теории кристаллического поля для одноионной модели, в которой при ограниченном числе подгруппочных параметров удается связать электронные свойства редкоземельных ионов с магнитными и структурными состояниями сплавов с оптимальными магнитоупругими характеристиками. Методика таких численных расчетов подробно изложена в работе [4].

Интерметаллические соединения RAI_2 и многокомпонентные сплавы на их основе, изоструктурные фазам Лавеса типа C15, являются удобными модельными объектами для всесторонних теоретических и экспериментальных исследований. Теоретическое описание обменных магнитных взаимодействий в них сравнительно

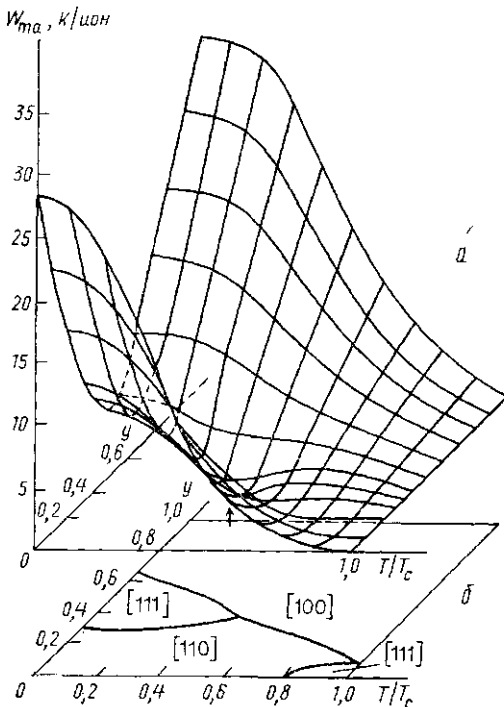


Рис. 1. Температурные и концентрационные зависимости энергии магнитокристаллической анизотропии W_{ma} (а) и спин-ориентационная магнитная фазовая диаграмма (б) для сплавов системы $(\text{Tb}_{0,5}\text{Ho}_{0,5})_{1-y}\text{Dy}_y\text{Al}_2$