

Модернизация пакета программ для моделирования картин дифракции, расчета параметров двойникования и самоаккомодации мартенситных кристаллов

А. Г. Хунджау^a, Е. А. Бровкина^b, М. М. Мельников^c

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

E-mail: ^akhundjua@mail.ru, ^bel-brov@rambler.ru, ^cxenomorpha@list.ru

Статья поступила 24.05.2012, подписана в печать 05.06.2012.

Представлен модернизированный пакет программ для моделирования картин точечной дифракции и расчета некоторых кристаллографических характеристик мартенситных кристаллов в сплавах с эффектами памяти формы. Оптимизирована методика анализа ориентационных соотношений между решетками аустенита и мартенсита с точки зрения возможности формирования самоаккомодационных комплексов.

Ключевые слова: эффект памяти формы, мартенситные превращения, рентгенограмма, микроэлектроограмма, самоаккомодация, двойникование, ориентационное соотношение.

УДК: 004.94:539.26:539.27. PACS: 07.05.Tp, 61.10.-i, 61.14.-x.

Введение

Изучение структурных аспектов мартенситных превращений методами рентгеновского анализа монокристаллов и дифракционной электронной микроскопии ставит перед исследователем задачу извлечения максимально возможной информации из экспериментальных дифракционных картин. Непосредственный расчет картин дифракции — индексация рефлексов матричной и выделяющейся фаз с последующим определением параметров решетки мартенсита, ориентационного соотношения между решетками аустенита и мартенсита, плоскостей двойникования кристаллов мартенсита представляет собой обратную задачу теории рассеяния и далеко не всегда рационален. Трудности такого расчета обусловлены в основном тем, что на снимках одновременно присутствуют рефлексы от всех кристаллографически эквивалентных вариантов взаимной ориентации решеток мартенсита и аустенита. Поэтому более разумным представляется моделирование дифракционных картин для известных заранее или гипотетических ориентационных соотношений и плоскостей двойникования и сопоставление их с экспериментальными рентгенограммами и (или) электронограммами.

Моделирование точечных картин дифракции от двухфазных объектов разрабатывается уже достаточно давно, в том числе и на кафедре физики твердого тела физического факультета МГУ. Модернизированный пакет программ в своей основе базируется на созданной ранее программе расчета картин дифракции на монокристаллах с системой частиц второй фазы, сформированной в результате фазового превращения [1], но расширяет возможности ее применения для сплавов, испытывающих мартенситное превращение. В таких сплавах необходимо учитывать особенности формирования двухфазной структуры при мартенситных превращениях, а именно двойникование кристаллов мартенсита и формирование самоаккомодационных комплексов. Кроме того, программа дополнена интерактивными окнами для ввода исходных данных, визуализации

картины дифракции в масштабе эксперимента, вывода матриц ориентационных соотношений, матриц двойникования и дополнительных результатов расчета, необходимых для оценки возможностей самоаккомодации.

1. Методика расчета

Расчет дифракционной картины основан на построении Эвальда и включает в себя нахождение координат узлов обратных решеток матричной и выделяющейся фаз, выявление тех из них, которые удовлетворяют уравнениям Лауэ, и определение координат соответствующих им рефлексов на пленке. При этом необходимо учитывать, что в случае рентгеновского излучения рефлексы от основной фазы формируются как на характеристическом, так и на «белом» излучении, а рефлексы фазы выделения (на ранних стадиях формирования) — только на характеристическом излучении. В электронном микроскопе длина волны электронов постоянна и определяется ускоряющим напряжением, обычно в этом случае радиус сферы Эвальда настолько велик, что сферическая поверхность вблизи нулевого узла обратной решетки практически вырождается в плоскость.

Для определения координат узлов обратных решеток, принимающих участие в формировании дифракционной картины, их следует представить в едином базисе, определяемом выбранной ориентацией монокристалла аустенита относительно первичного луча. Переход от координат узлов обратной решетки мартенсита к координатам тех же узлов в базисе решетки аустенита описывается матрицей ориентационного соотношения \hat{A} , столбцы которой являются проекциями базисных векторов решетки мартенсита на базис решетки аустенита.

При мартенситном превращении кристаллическая решетка исходной фазы (аустенита) связана с решеткой выделяющейся фазы строгим ориентационным соотношением, которое обычно записывается путем указа-

ния параллельных плоскостей и направлений, лежащих в этих плоскостях:

$$\{HKL\}\langle hkl \rangle_A \parallel \{H'K'L'\}\langle h'k'l' \rangle_M. \quad (1)$$

Для расчета матрицы ориентационного соотношения \hat{A} необходимо знать три пары параллельных векторов в решетках аустенита и выделяющейся фазы. Исходя из ориентационного соотношения (1) с помощью известных кристаллографических соотношений [2, 3] можно непосредственно указать две пары таких векторов:

- векторы $\langle hkl \rangle$ и $\langle h'k'l' \rangle$;
- векторы $\langle H_n K_n L_n \rangle$ и $\langle H'_n K'_n L'_n \rangle$, перпендикулярные плоскостям $\{HKL\}$ и $\{H'K'L'\}$ соответственно.

В качестве третьей пары можно взять вектор решетки аустенита $\langle h_n k_n l_n \rangle$ (перпендикулярный $\langle hkl \rangle$ и $\langle H_n K_n L_n \rangle$) и параллельный ему вектор решетки мартенсита $\langle h'_n k'_n l'_n \rangle$ (перпендикулярный $\langle h'k'l' \rangle$ и $\langle H'_n K'_n L'_n \rangle$).

Зная матрицу ориентационного соотношения \hat{A} , следует путем перебора определить координаты узлов обратных решеток аустенита и мартенсита, удовлетворяющих условиям Лауз, т. е. лежащих на сфере Эвальда (точнее — отстоящих от сферы Эвальда на некоторое заданное расстояние), и с учетом геометрии съемки рассчитать координаты рефлексов на дифрактограмме. Данный алгоритм может быть применен к любой системе, состоящей из двух монокристаллов с заданной ориентацией друг относительно друга.

Для мартенситных превращений существует ряд особенностей, которые необходимо учитывать при моделировании:

- наличие кристаллографически эквивалентных вариантов ориентационного соотношения;
- двойникование кристаллов мартенситной фазы, характерное для всех мартенситных сплавов и играющее в механизме эффекта памяти формы не меньшую роль, чем само мартенситное превращение;
- возможность поворота кристалла мартенсита, связанного с релаксацией упругой энергии, на некоторый угол относительно первоначально заданного ориентационного соотношения.

Ориентационное соотношение предполагает реализацию всех кристаллографически эквивалентных вариантов — в соответствии с количеством плоскостей типа $\{HKL\}$ и направлений типа $\langle hkl \rangle$ решетки аустенита, фигурирующих в ориентационном соотношении. В случае кубической структуры кристалла аустенита в общем случае может существовать не более 24 эквивалентных вариантов ориентационного соотношения (максимальное значение фактора повторяемости). Для каждого варианта следует рассчитать свою матрицу ориентационного соотношения \hat{A}_i , но можно использовать операторы симметрии решетки аустенита \hat{S}_i [4], которые осуществляют все возможные перестановки троек индексов $\{HKL\}$. Тогда

$$\hat{A}_i = \hat{S}_i \cdot \hat{A}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, 24.$$

Двойникование кристаллов мартенсита вносит соответствующий вклад в дифракционные картины, который можно учесть с помощью замены матрицы ориентационного соотношения \hat{A} на матрицу $\hat{A} \cdot \hat{D}$, где

\hat{D} — матрица двойникования, конкретный вид которой определяется плоскостью двойникования (HKL)

$$\hat{D} = \frac{1}{HH_n + KK_n + LL_n} \times \begin{pmatrix} HH_n - KK_n - LL_n & 2H_n K & 2H_n L \\ 2HK_n & KK_n - HH_n - LL_n & 2K_n L \\ 2HL_n & 2KL_n & LL_n - KK_n - HH_n \end{pmatrix},$$

где H, K, L — индексы плоскости двойникования; H_n, K_n, L_n — индексы нормали к плоскости двойникования [4].

Разворот кристаллов мартенсита на угол φ вокруг некоторой оси, задаваемой тройкой индексов направления [uvw] в базисе основной фазы, можно учесть, действуя на матрицу \hat{A} оператором поворота $\hat{\Phi}$, имеющим вид

$$\hat{\Phi} =$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \varphi + & \gamma \sin \varphi + & -\beta \sin \varphi + \\ + \alpha^2(1 - \cos \varphi) & + \alpha \beta(1 - \cos \varphi) & + \alpha \gamma(1 - \cos \varphi) \\ -\gamma \sin \varphi + & \cos \varphi + & \alpha \sin \varphi + \\ + \beta \alpha(1 - \cos \varphi) & + \beta^2(1 - \cos \varphi) & + \beta \gamma(1 - \cos \varphi) \\ \beta \sin \varphi + & -\alpha \sin \varphi + & \cos \varphi + \\ + \gamma \alpha(1 - \cos \varphi) & + \gamma \beta(1 - \cos \varphi) & + \gamma^2(1 - \cos \varphi) \end{pmatrix},$$

где φ — угол поворота; α, β, γ — направляющие косинусы поворота [uvw].

2. Визуализация результатов расчета (интерактивное окно программы)

Важным моментом в эксплуатации пакета программ является визуализация результатов расчета — графическое построение рентгенограмм (микроэлектронограмм) на экране монитора и вывод их на печать. Для этих целей имеется интерактивное окно программы, которое служит и для ввода следующих исходных данных:

- ориентировка кристалла аустенита относительно первичного луча (задается двумя направлениями в решетке аустенита, параллельными лучу и вертикали);
- интервал длин волн излучения для каждой из фаз;
- параметры решеток основной фазы и выделяющейся фазы (martенсита);
- тип решетки Бравэ аустенита и мартенсита (примитивная, гранецентрированная, объемно-центрированная);
- ориентационное соотношение;
- плоскость двойникования
- величина и направление оси поворота кристалла мартенсита.

Кроме того, в программе возможно изменение еще ряда параметров моделирования: размера узла обратной решетки аустенита и мартенсита, пределов перебора для индексов узлов обратной решетки аустенита и мартенсита, расстояния образец–пленка для моделирования рентгенограмм, постоянной электронного микроскопа для моделирования микроэлектронограмм.

После введения исходных данных практически мгновенно рассчитанная рентгенограмма или микроэлек-

транограмма выводится на экран и может быть распечатана в масштабе, соответствующем эксперименту. Интерактивное окно программы с результатами расчета приведено на рис. 1.

3. Дополнительные возможности программы

С помощью программы моделирования дифракционных картин можно решать и другие задачи, например связанные с оценкой возможности образования самоаккомодационных комплексов мартенситных кристаллов. Кристаллографическим условием, необходимым

для самоаккомодации мартенситных кристаллов, является параллельность плоскости двойникования решетки мартенсита одной из плоскостей симметрии решетки аустенита. Программа позволяет практически мгновенно решить этот вопрос путем сравнения модельных рентгенограмм, рассчитанных без учета двойникования и с учетом двойникования по интересующей плоскости. Только в случае совпадения этих рентгенограмм, т. е. если двойникование переводит один вариант ориентационного соотношения в кристаллографически эквивалентный ему и соответственно не добавляет новых рефлексов, выполняется условие самоаккомодации.

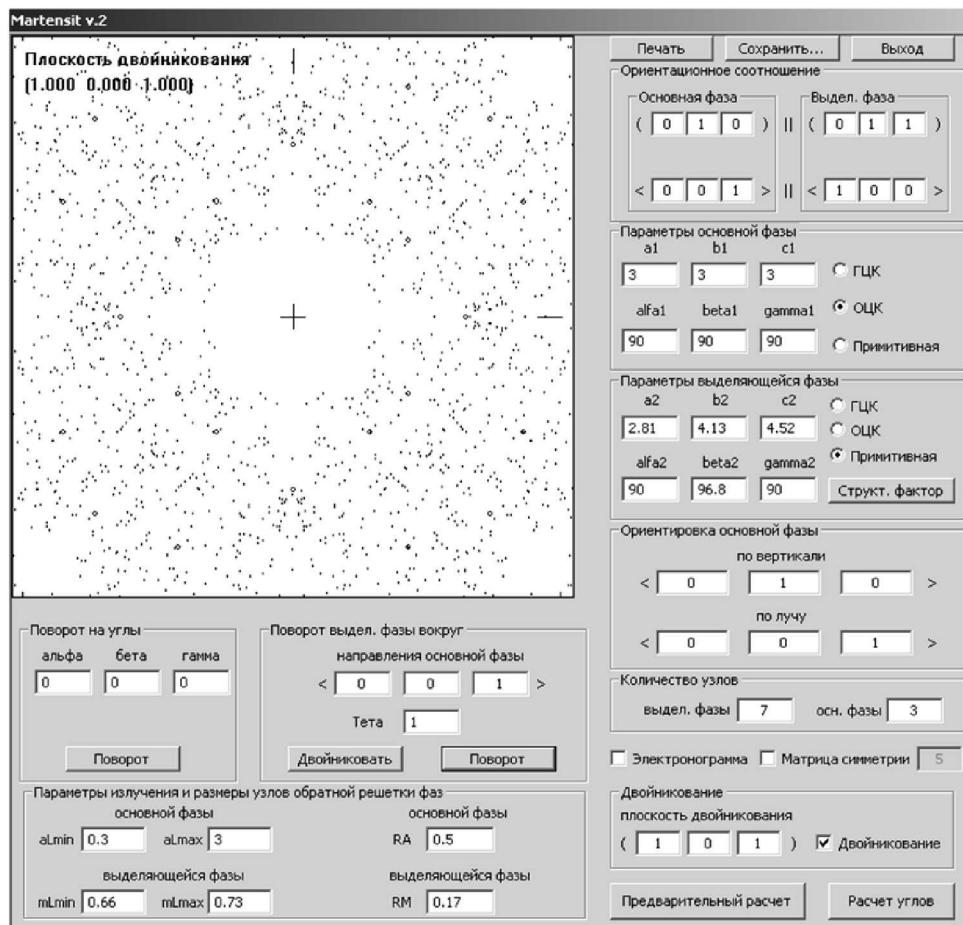


Рис. 1. Интерактивное окно программы моделирования дифракционных картин с выделениями моноклинного мартенсита в 24 вариантах ориентационного соотношения с учетом двойникования по плоскости (101)

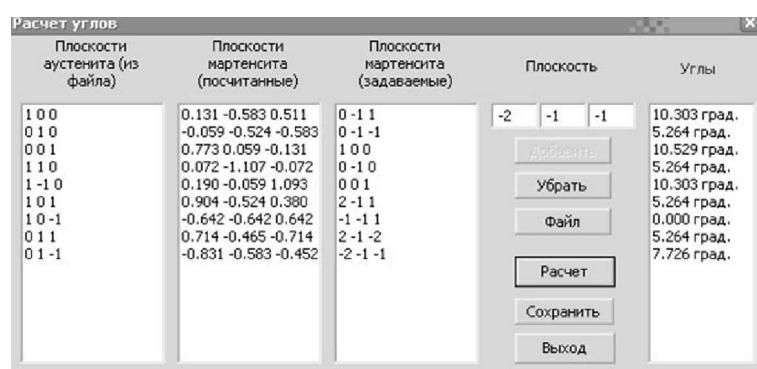


Рис. 2. Интерактивное окно программы расчета углов между плоскостью симметрии решетки аустенита и плоскостью двойникования решетки мартенсита

В ряде сплавов с эффектами памяти формы, например Mn–Cu, Ti–Ta и др., самоаккомодация имеет место и при отклонении от параллельности плоскостей двойникования и симметрии на углы в несколько градусов [5, 6]. В этом случае двойникование приводит к расщеплению, а также к появлению новых дополнительных рефлексов на дифракционных картинах. Программа в диалоговом режиме с помощью дополнительного окна (рис. 2) дает возможность найти соответствующие углы распаралеливания между плоскостью двойникования мартенсита и каждой из девяти плоскостей симметрии решетки austенита типа {100} и {110} (аустенит во всех сплавах с эффектами памяти формы имеет кубическую структуру).

Заключение

Таким образом, модернизированный пакет программ оказывается полезным при изучении мартенситных превращений в сплавах с эффектами памяти. С его помощью помимо моделирования картин дифракции с целью нахождения ориентационных соотношений, плоскостей двойникования, величин углов упругого разворота кристаллов мартенсита, возможна оценка вероятности самоаккомодации, т. е. проявления эффектов памяти формы в сплавах исследуемой системы.

Помимо визуализации дифракционных картин пакет позволяет непосредственно выводить в отдельном окне результаты промежуточных вычислений, которые могут понадобиться для анализа кристаллографических особенностей мартенситных сплавов: матрицы ориентационного соотношения, двойникования и другие параметры.

Программа была успешно апробирована при анализе кристаллографических особенностей ряда сплавов с мартенситными превращениями [5, 6].

Список литературы

1. Илюшин А.С., Сорокин А.В., Хунджуа А.Г., Пестов И.В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1990. № 2. С. 98.
2. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Кристаллография. М., 2000.
3. Хунджуа А.Г. Матричный метод описания кристаллических структур и его применение к анализу и моделированию картин дифракции электронов и рентгеновских лучей. М., 2010.
4. Хунджуа А.Г., Сорокин А.В., Чернов Е.В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1991. № 5. С. 86.
5. Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Чжэн Шаотао // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2010. № 3. С. 27.
6. Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Чжэн Шаотао // Перспективные материалы. 2010. № 6. С. 12.

Updating of the software package for the simulating of diffraction pictures, the calculation of the parameters of twinning and self-accommodation of martensite crystals

A. G. Khundjua^a, E. A. Brovkina^b, M. M. Melnikov^c

*Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University,
Moscow 119991, Russia.*

E-mail: ^akhundjua@mail.ru, ^bel-brov@rambler.ru, ^cxenomorpha@list.ru.

The paper presents an updated software package designed for the simulating of point diffraction pictures and for the calculation of some crystallographic characteristics of martensite crystals in alloys with shape memory effects. In the paper one finds the optimized method of analysis of orientation relationships between the lattices of austenite and martensite from the point of view of the possibility of self-accommodation complexes formation.

Keywords: shape memory effect, martensite transformations, X-ray diffraction, electron diffraction, self-accommodation, twinning.

PACS: 07.05.Tp, 61.10.-i, 61.14.-x.

Received 24 May 2012.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 5(2012).

Сведения об авторах

1. Хунджуа Андрей Георгиевич — докт. физ.-мат наук, профессор; тел.: (495) 939-30-26, (495) 939-23-87, e-mail: khundjua@mail.ru.
2. Бровкина Елена Анатольевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-30-26, (495) 939-23-87, e-mail: el-brov@rambler.ru.
3. Мельников Максим Михайлович — мл. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-30-26, (495) 939-23-87, e-mail: xenomorpha@list.ru.