

Обоснование экспериментально наблюдаемых самоаккомодационных комплексов мартенситных кристаллов в сплавах с эффектами памяти формы

А. Г. Хунджуа,^{1,а} Е. А. Бровкина,^{1,б} А. Г. Птицын,¹ М. М. Мельников,¹ Б. А. Володин²

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,

¹кафедра физики твердого тела; ²кафедра математики.

Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

Поступила в редакцию 28.06.2019, после доработки 21.08.2019, принята к публикации 09.09.2019.

Предложен алгоритм анализа возможности образования самоаккомодационных комплексов мартенситных кристаллов в сплавах с эффектами памяти формы с учетом двойникования и минимизации усредненной по соответствующей совокупности доменов деформации. Показано, что полная самоаккомодация возможна лишь в комплексах, содержащих одновременно все варианты ориентационного соотношения.

Проведенный расчет для случая ромбоэдрического мартенсита (4 возможных варианта ориентационного соотношения) показал, что средняя деформация формы по четырем доменам отсутствует. Образующий при этом четырехдоменный комплекс включает в себя все возможные варианты ориентационного соотношения и поэтому является самоаккомодационным. Данные комплексы неоднократно наблюдались в сплавах никелида титана.

Анализ моноклинного 18R-мартенсита показывает, что полная самоаккомодация может достигаться только в комплексе из 12 различных доменов. Наблюдаемые экспериментально четырехдоменные комплексы в сплавах Cu–Al–Ni и Cu–Al–Mn могут быть объяснены частичной самоаккомодацией, учитывающей выход кристалла мартенсита на внешнюю поверхность кристалла.

Ключевые слова: эффект памяти формы, мартенситные превращения, двойникование, самоаккомодационные комплексы, операторы симметрии, эллипсоид деформации.

УДК: 538.9. PACS: 61.50.ks.

ВВЕДЕНИЕ

Мартенситное превращение в процессе охлаждения в отсутствие полей внешних напряжений формирует кристаллы мартенсита с вполне определенной внешней огранкой и внутренним строением. Внутреннее строение обусловлено двойникованием кристаллов мартенсита в процессе роста. В некоторых случаях проявляется тенденция к группированию мартенситных кристаллов (МК) в самоаккомодационные комплексы (СК) — системы доменов мартенситных кристаллов, разделенных (и в то же время связанных) плоскостями двойникования [1, 2]. Вышеупомянутые домены представляют собой эквивалентные варианты ориентационного соотношения (ОС) между решетками аустенита и мартенсита [3, 4]. Строение СК определяется числом входящих в него доменов и конфигурацией междоменных границ, т. е. задействованными плоскостями двойникования. Причиной формирования комплексов является самоаккомодация упругих напряжений, компенсирующая деформацию формы в масштабах СК в целом. В неупорядоченных твердых растворах механизм обратимости мартенситных превращений, определяющей проявление эффектов памяти формы (ЭПФ), опирается именно на возможность формирования СК [5, 6], что, несомненно, должно учитываться при разработке новых материалов с памятью.

Число возможных вариантов доменной структуры СК ограничено, поддается прогнозированию и классификации, так как аустенит всегда имеет кубическую решетку, что определяет число кристаллографически эквивалентных вариантов ОС (число

различных доменов) — от 3 до 24. Переход от домена к домену описывается с помощью одного из 24 операторов симметрии решетки аустенита, девять из которых являются одновременно и операторами двойникования. Такой чисто математический подход позволяет строить замкнутые комплексы из 3, 4, 6, 8, 12 или даже 24 доменов [4], но имеет существенный недостаток — отсутствие связи с минимизацией деформации формы путем двойникования. И, по-видимому, именно в этом кроется причина того, что далеко не все математически предсказанные СК наблюдаются экспериментально. Неоднократно наблюдались СК трех типов:

1. Четырехдоменные комплексы ромбоэдрического R-мартенсита в сплавах на основе никелида титана [7–9].
2. Четырехдоменные комплексы моноклинного 18R-мартенсита в сплавах на основе меди (Cu–Al–Ni, Cu–Al–Mn) [10–14].
3. Шестидоменные комплексы моноклинного мартенсита B19' в сплавах на основе никелида титана [15–17].

Целью настоящей работы было сопоставление наблюдаемых в эксперименте СК с теоретически возможными и обоснование реализации одних и отсутствия других (экспериментально ненаблюдаемых).

1. ЭЛЛИПСОИД ДЕФОРМАЦИИ

Будем считать, что устойчиво наблюдаемым комплексам мартенситных кристаллов соответствует условие полной самоаккомодации — отсутствие усредненной по такому комплексу деформации превращения.

Симметрия СК как целого диктуется кубической симметрией решетки аустенита. В общем случае

^а E-mail: khundjua@mail.ru

^б E-mail: el-brov@yandex.ru

число кристаллографически эквивалентных вариантов ОС равно 24, а переход от одного варианта ОС к другому описывается с помощью одного из 24 операторов симметрии куба — тождественный оператор \hat{S}_1 плюс операторы поворота вокруг осей симметрии 4-го (9 операторов), 2-го (6 операторов) и 3-го (8 операторов) порядка на 90° , 180° и 120° соответственно или на кратные им углы. При этом операторы поворота на 180° описывают переход в двойникованную область.

Элементарные ячейки решеток аустенита и мартенсита преобразуются друг в друга путем однородной деформации, которая в применении к сфере единичного радиуса превращает ее в трехосный эллипсоид (эллипсоид деформации), выраженной в общем случае [18] уравнением

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz = 1. \quad (1)$$

Уравнения эллипсоидов деформации еще трех вариантов ОС, полученных в результате двойникования по трем плоскостям, параллельным плоскостям (100), (010), (001) решетки аустенита, имеют соответственно вид (2)–(4):

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 - 2a_{12}xy - 2a_{13}xz + 2a_{23}yz = 1,$$

$$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ -z \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 - 2a_{12}xy + 2a_{13}xz - 2a_{23}yz = 1,$$

$$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy - 2a_{13}xz - 2a_{23}yz = 1.$$

Сложение (1)–(4) приводит к уравнению

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 = 1, \quad (5)$$

но это уравнение не сферы, а эллипсоида, обращаемое в уравнение сферы при равенстве коэффициентов:

$$a_{11} = a_{22} = a_{33}. \quad (6)$$

Последнее условие выполняется, например, при формировании ромбоэдрического R-мартенсита в никелиде титана.

2. РОМБОЭДРИЧЕСКИЙ R-МАРТЕНСИТ В НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

Элементарная ячейка R-мартенсита никелида титана представляет собой ромбоэдрически искаженную ячейку аустенита — растянутую вдоль одной из пространственных диагоналей куба. В соответствии с числом пространственных диагоналей куба имеются 4 варианта ОС.

Для ромбоэдрического искажения решетки характерны следующие соотношения:

$$a = b = c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ - \varphi,$$

$$\begin{pmatrix} (1 + \varepsilon) \cos \varphi & \sin \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & (1 + \varepsilon) \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & \sin \varphi & (1 + \varepsilon) \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

Ввиду малости ромбоэдрического искажения $\sin \varphi < 0.04$ матрица ОС примет вид:

$$\hat{A}_R = \begin{pmatrix} 1 & \varphi & \varphi \\ \varphi & 1 & \varphi \\ \varphi & \varphi & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{A}_R^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -\varphi & -\varphi \\ -\varphi & 1 & -\varphi \\ -\varphi & -\varphi & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\varphi & -\varphi \\ -\varphi & 1 & -\varphi \\ -\varphi & -\varphi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - \varphi(y + z) \\ y - \varphi(x + z) \\ z - \varphi(x + y) \end{pmatrix}.$$

Подставляя преобразованные координаты в уравнение сферы: $x'^2 + y'^2 + z'^2 = 1$, получаем уравнение эллипсоида:

$$(1 + 2\varphi^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(xy + yz + zx) = 1.$$

Применяя операторы симметрии \hat{S}_2 , \hat{S}_3 и снова \hat{S}_2 (здесь учтено, что $\hat{S}_3\hat{S}_2 = \hat{S}_4$), получим 4 уравнения эллипсоидов для соответствующих ориентаций мартенсита, с помощью которых можно сформировать СК:

$$(1 + 2\varphi^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(xy + yz + zx) = 1;$$

$$(1 + 2\varphi^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(-xy - yz + zx) = 1;$$

$$(1 + 2\varphi^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(-xy + yz - zx) = 1;$$

$$(1 + 2\varphi^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(xy - yz - zx) = 1.$$

Суммируя 4 уравнения, получаем $4(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) = 4$ — уравнение сферы.

Итак, средняя деформация формы по четырем доменам отсутствует, т.е. эти четыре домена образуют СК — «четверик», содержащий 4 домена, отвечающих четырем вариантам ОС. Поскольку все возможные варианты ОС включены в комплекс, то он с неизбежностью будет самоаккомодационным.

3. МОНОКЛИННЫЙ 18R-МАРТЕНСИТ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ МЕДИ

Для моноклинного мартенсита m 18R в сплавах на основе меди для четырех доменов полная аккомодация в общем случае невозможна, равенство (6) невыполнимо.

Для пущей убедительности следует расписать коэффициенты a_{ij} , входящие в уравнение (1), через параметры решеток и ОС.

В случае мартенситных превращений в сплавах на основе меди деформацию решетки проще описывать

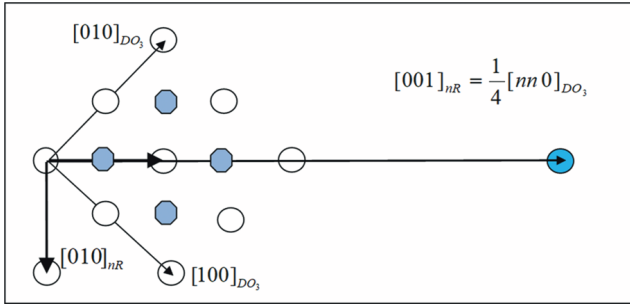


Рис. 1. Взаимная ориентация базисных векторов в элементарных ячейках орторомбического мартенсита и ОЦК-аустенита. Цветом выделены атомы второго слоя

не в базисе ОЦК решетки аустенита, а в орторомбическом базисе (рис. 1), переход к которому описывается матрицей \hat{B} :

$$|x, y, z\rangle = \hat{B}|u, v, w\rangle, \quad |u, v, w\rangle = \hat{B}^{-1}|x, y, z\rangle.$$

Тогда однородная деформация может быть учтена с помощью трех последовательных преобразований: переход в орторомбический базис, деформация, переход к исходному кубическому базису: $|r'\rangle = \hat{B}\hat{\mathfrak{R}}^{-1}\hat{B}^{-1}|r\rangle$, где $\hat{\mathfrak{R}}$ – тензор деформации:

$$\hat{\mathfrak{R}}_{\text{ort}} = \begin{vmatrix} 1 + \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & (1 + \varepsilon_3) \end{vmatrix},$$

$$\hat{\mathfrak{R}}_{\text{ort}}^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 + \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \varepsilon_3 \end{vmatrix}.$$

В случае мартенситного превращения аустенита со структурой типа DO_3 в многослойную орторомбическую решетку мартенсита nR (n – число плотноупакованных слоев в элементарной ячейке) деформации выражаются через параметры решеток мартенсита по формулам: $1 + \varepsilon_1 = \frac{a_{nR}}{a_{DO_3}}$, $1 + \varepsilon_2 = \frac{b_{nR}}{\sqrt{2}a_{DO_3}}$, $1 + \varepsilon_3 = \frac{2\sqrt{2}c_{nR}}{na_{DO_3}}$, а матрица перехода \hat{B} имеет вид

$$\hat{B} = \begin{vmatrix} 0 & 1/2 & n/4 \\ 0 & -1/2 & n/4 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{B}^{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 2/n & 2/n & 0 \end{vmatrix}.$$

Тогда матрица ОС \hat{G}_1^{ort} имеет вид

$$\hat{G}_1^{\text{ort}} = \hat{B}\hat{\mathfrak{R}}^{-1}\hat{B}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \left\{ \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & \left\{ -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & 0 \\ \left\{ -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & \left\{ \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{1+\varepsilon_1} \end{vmatrix} \quad (7)$$

и представляет собой матрицу, описывающую эллипсоид деформации, присущей МП.

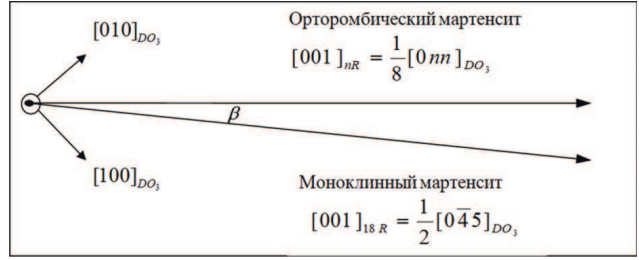


Рис. 2. Взаимная ориентация базисных векторов в элементарных ячейках моноклинного мартенсита и ОЦК-аустенита

Эллипсоиды деформации для других вариантов ОС можно получить, заменяя в соотношении (7) матрицу \hat{B} на матрицу $\hat{S}_i\hat{B}$. Тогда

$$\hat{G}_i^{\text{ort}} = \hat{S}_i\hat{B}\hat{\mathfrak{R}}^{-1}(\hat{S}_i\hat{B})^{-1} = \hat{S}_i\hat{B}\hat{\mathfrak{R}}^{-1}\hat{B}^{-1}\hat{S}_i^{-1} = \hat{S}_i\hat{G}_1^{\text{ort}}\hat{S}_i^{-1}.$$

Моноклинный мартенсит $m18R$ в сплавах на основе меди фактически является моноклинно искаженным орторомбическим мартенситом (рис 2), описанным выше.

Для моноклинного мартенсита тензоры деформации имеют вид:

$$\hat{\mathfrak{R}}_{\text{моно}} = \begin{vmatrix} 1 + \varepsilon_1 & 0 & (1 + \varepsilon_3) \sin \beta \\ 0 & 1 + \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & (1 + \varepsilon_3) \cos \beta \end{vmatrix},$$

$$\hat{\mathfrak{R}}_{\text{моно}}^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -\sin \beta \\ 1 + \varepsilon_1 & 0 & \cos \beta(1 + \varepsilon_1) \\ 0 & 1 + \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\cos \beta(1 + \varepsilon_3)} \end{vmatrix},$$

где $\sin \beta = \frac{2}{\sqrt{n^2+4}}$, $\cos \beta = \frac{n}{\sqrt{n^2+4}}$. В результате получим

$$\hat{B}\hat{\mathfrak{R}}_{\text{моно}}^{-1}\hat{B}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos \beta(1+\varepsilon_3)} & -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos \beta(1+\varepsilon_3)} & 0 \\ -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos \beta(1+\varepsilon_3)} & \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos \beta(1+\varepsilon_3)} & 0 \\ -\frac{2 \operatorname{tg}^2 \beta}{1+\varepsilon_1} & -\frac{2 \operatorname{tg}^2 \beta}{1+\varepsilon_1} & \frac{2}{(1+\varepsilon_1)} \end{vmatrix} = \hat{G}_1^{\text{моно}}. \quad (8)$$

Для данного варианта ОС уравнение эллипсоида деформации можно получить, подставляя преобразованные в результате однородной деформации, связанной с мартенситным превращением, координаты

$$|x, y, z\rangle = \hat{G}_1^{\text{моно}}|x, y, z\rangle \quad (9)$$

в уравнение сферы.

Тогда с учетом соотношений (8)–(9) уравнение эллипсоида деформации принимает следующий вид:

$$\frac{x^2}{2} \left\{ \frac{1}{(1 + \varepsilon_2)^2} + \frac{1}{\cos^2 \beta(1 + \varepsilon_3)^2} + \frac{2 \operatorname{tg}^4 \beta}{(1 + \varepsilon_1)^2} \right\} + \frac{y^2}{2} \left\{ \frac{1}{(1 + \varepsilon_2)^2} + \frac{1}{\cos^2 \beta(1 + \varepsilon_3)^2} + \frac{2 \operatorname{tg}^4 \beta}{(1 + \varepsilon_1)^2} \right\} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{z^2}{(1 + \varepsilon_1)^2} + \\
 & + \left\{ \frac{1}{\cos^2 \beta (1 + \varepsilon_3)^2} - \frac{1}{(1 + \varepsilon_2)^2} + \frac{2 \operatorname{tg}^4 \beta}{(1 + \varepsilon_1)^2} \right\} xy - \\
 & - \frac{\operatorname{tg}^2 \beta}{(1 + \varepsilon_1)^2} xz - \frac{\operatorname{tg}^2 \beta}{(1 + \varepsilon_1)^2} yz = 1. \quad (10)
 \end{aligned}$$

Уравнение (10) отличается от общего случая (1) равенством некоторых коэффициентов в нем: $a_{11} = a_{22} = a$; $b_{13} = b_{23} = b$ и может быть записано в виде:

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12}xy + 2bxz + 2byz = 1. \quad (11)$$

Уравнения эллипсоидов, отвечающих другим вариантам ОС, можно получить из соответствующих матриц ОС. При этом некоторые из 24 матриц могут описывать одну и ту же деформацию решетки (эллипсоиды деформации таких вариантов будут совпадать).

Процедуру можно упростить, учитывая кубическую симметрию аустенита. Ясно, что поворот на угол π вокруг оси $[100]_{\text{DO}_3}$ приводит к замене $[x \rightarrow x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z]$. Такой поворот описывается оператором $\hat{S}_2|\mathbf{r}\rangle$. Заменяя координаты в уравнении (11) в соответствии с указанным преобразованием

$$\hat{S}_2|\mathbf{r}\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ -z \end{pmatrix},$$

получаем уравнение эллипсоида деформации для 2-го варианта ОС:

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12}xy - 2bxz + 2byz = 1. \quad (12)$$

Описанная процедура привязывает варианты ОС к операторам симметрии.

Аналогично получаем уравнения для всех 24 вариантов ОС:

$$\hat{S}_3|\mathbf{r}\rangle = |-x, y, -z\rangle$$

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12}xy + 2bxz - 2byz = 1; \quad (13)$$

$$\hat{S}_4|\mathbf{r}\rangle = |-x, -y, z\rangle$$

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12}xy - 2bxz - 2byz = 1; \quad (14)$$

$$\hat{S}_5|\mathbf{r}\rangle = |y, x, -z\rangle$$

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12}xy - 2bxz - 2byz = 1; \quad (15)$$

$$\hat{S}_6|\mathbf{r}\rangle = |-y, -x, -z\rangle$$

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12}xy + 2bxz + 2byz = 1; \quad (16)$$

$$\hat{S}_7|\mathbf{r}\rangle = |z, -y, x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2bxy + 2bxz - 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_8|\mathbf{r}\rangle = |-z, -y, -x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2bxy + 2bxz + 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_9|\mathbf{r}\rangle = |-x, z, y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2bxy - 2b_{12}xz + 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{10}|\mathbf{r}\rangle = |-x, -z, -y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2bxy + 2b_{12}xz + 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{11}|\mathbf{r}\rangle = |z, x, y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2bxy + 2b_{12}xz + 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{12}|\mathbf{r}\rangle = |y, z, x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2bxy + 2bxz + 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_{13}|\mathbf{r}\rangle = |-y, z, -x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2bxy - 2bxz - 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_{14}|\mathbf{r}\rangle = |-z, -x, y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2bxy + 2b_{12}xz - 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{15}|\mathbf{r}\rangle = |-y, -z, x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2bxy - 2bxz + 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_{16}|\mathbf{r}\rangle = |z, -x, -y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2bxy - 2b_{12}xz - 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{17}|\mathbf{r}\rangle = |y, -z, -x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2bxy + 2bxz - 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_{18}|\mathbf{r}\rangle = |-z, x, -y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2bxy - 2b_{12}xz + 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{19}|\mathbf{r}\rangle = |x, -z, y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2bxy - 2b_{12}xz - 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{20}|\mathbf{r}\rangle = |z, y, -x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2bxy - 2bxz + 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_{21}|\mathbf{r}\rangle = |-y, x, z\rangle$$

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12}xy + 2bxz - 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{22}|\mathbf{r}\rangle = |x, z, -y\rangle$$

$$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2bxy + 2b_{12}xz - 2byz = 1;$$

$$\hat{S}_{23}|\mathbf{r}\rangle = |-z, y, x\rangle$$

$$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2bxy - 2bxz - 2b_{12}yz = 1;$$

$$\hat{S}_{24}|\mathbf{r}\rangle = |y, -x, z\rangle$$

$$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12}xy - 2bxz + 2byz = 1.$$

Группа операторов симметрии \hat{S}_i содержит 24 оператора, но разных уравнений эллипсоидов вдвое меньше. Например, одинаковыми являются уравнения эллипсоидов (11) и (16). В результате имеются 12 пар различных уравнений эллипсоидов:

$$\hat{A}_1 \Leftrightarrow \hat{A}_6; \quad \hat{A}_2 \Leftrightarrow \hat{A}_{24}; \quad \hat{A}_3 \Leftrightarrow \hat{A}_{22}; \quad \hat{A}_4 \Leftrightarrow \hat{A}_5;$$

$$\hat{A}_7 \Leftrightarrow \hat{A}_{17}; \quad \hat{A}_8 \Leftrightarrow \hat{A}_{12}; \quad \hat{A}_9 \Leftrightarrow \hat{A}_{18}; \quad \hat{A}_{10} \Leftrightarrow \hat{A}_{11};$$

$$\hat{A}_{13} \Leftrightarrow \hat{A}_{23}; \quad \hat{A}_{14} \Leftrightarrow \hat{A}_{22}; \quad \hat{A}_{15} \Leftrightarrow \hat{A}_{20}; \quad \hat{A}_{16} \Leftrightarrow \hat{A}_{19}.$$

Самоаккомодация требует включения в комплекс трех вариантов с коэффициентом a_{33} при каждой переменной. Кроме того, необходимо равенство трех слагаемых с коэффициентами b_{12} и b , чего нельзя достичь в нечетном числе доменов. Дальнейший анализ показывает, что самоаккомодация достигается только в комплексе из 12 разных доменов, т. е. СК должен содержать **все** варианты ОС. Однако СК из четырех доменов моноклинного мартенсита

18R многократно наблюдались в сплавах Cu—Ni—Al и Cu—Al—Mn [10, 19], что требует каких-то объяснений.

Такие же рассуждения справедливы и в отношении СК-кристаллов моноклинного мартенсита в никелиде титана, ОС для которого практически совпадает с ОС для мартенсита 18R, а структура B19' также является моноклинной и отличается лишь количеством плотноупакованных слоев. СК типа шестерик наблюдались экспериментально [20, 21], хотя в них самоаккомодация недостижима.

Следует обратить внимание на то, что фактически наблюдались СК, выходящие на поверхность кристалла аустенита. В этом случае самоаккомодация в направлении нормали к поверхности может отличаться от самоаккомодации в перпендикулярных нормали направлениях, т.к. открытая поверхность мартенситного кристалла не испытывает упругого воздействия со стороны аустенитной матрицы. В первом приближении это условие математически означает, что упругая деформация по комплексу может ограничиться двумя направлениями, перпендикулярными нормали.

Например, усреднение по комплексу из 4 доменов (11, 12, 13 и 14) приводит к уравнению $4ax^2 + 4ay^2 + 4a_{33}z^2 = 4$, описывающему эллипсоид вращения. Поскольку коэффициент $a = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{(1+\varepsilon_2)^2} + \frac{1}{\cos^2 \beta (1+\varepsilon_3)^2} + \frac{2 \operatorname{tg}^4 \beta}{(1+\varepsilon_1)^2} \right\}$ включает деформации по всем трем осям, то с учетом требования сохранения удельного объема при МП он заведомо ближе к единице, чем коэффициент $a_{11} = \frac{1}{(1+\varepsilon_1)^2}$. Тогда, направляя ось z перпендикулярно поверхности аустенитного кристалла, удается реализовать описанную выше схему аккомодации для доменного комплекса.

Вопрос о частичной аккомодации примыкает к задаче о внешней огранке кристаллов мартенсита — задаче достаточно сложной и в общем случае пока далекой от решения. Если кристаллы мартенсита находятся внутри аустенитной матрицы, они обычно имеют линзовидную форму, и вопрос о внешней огранке ведет к поиску габитусных плоскостей, прогнозирование которых редко бывает успешным, т.к. требует рассмотрения баланса упругой и поверхностной энергии. Но есть и частные случаи, для которых можно более оптимистично смотреть на возможность расчета габитусных плоскостей.

1. Кристаллы мартенсита, имеющие форму плоскопараллельной пластины, пронизывающей весь кристалл аустенита с выходом на его внешнюю поверхность. Для такого объекта можно пренебречь упругой энергией и сосредоточиться на энергии когерентной межфазной границы мартенсит—аустенит, минимизация которой может указать путь поиска габитусной плоскости.
2. Подобные соображения справедливы и для граней СК. Причиной формирования СК является именно минимизация упругой энергии, т.е. огранка регулируется энергией межфазной границы. Однако для СК ситуация несколько усложняется, ввиду того, что его внешняя поверхность является многогранником, симметрия которого должна впи-

сываться в анизотропию упругих свойств аустенита. Во всяком случае, интуитивные соображения симметрии подсказывают, что оси симметрии кубической решетки аустенита должны совпадать с осями симметрии многогранника, составленного из мартенситных кристаллов — СК.

Экспериментально наблюдаемые СК не лежат в толще кристалла аустенита, а выходят на его поверхность. При этом минимизация упругой энергии необходима лишь в двух измерениях (исключается направление, перпендикулярное поверхности). Математически это сводится к замене эллипсоида деформации на эллипс.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основным итогом работы являются результаты анализа проблемы самоаккомодации. Математически показано, что полная самоаккомодация возможна лишь в комплексах, содержащих одновременно все варианты ОС.

Наблюдаемые экспериментально СК могут быть объяснены частичной самоаккомодацией, учитывающей выход кристалла мартенсита на внешнюю поверхность кристалла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Otsuka K., Wayman C.M. Shape Memory Materials. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1998.
2. Лободюк В.А., Эстрин Э.И. Мартенситные превращения. М., 2009.
3. Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Мельников М.М., Птицын А.Г. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2014. № 6. С. 90. (Khundjua A.G., Brovkina E.A., Melnikov M.M., Ptitsyn A.G. // Mosc. Univ. Phys. Bull. 2014. 69, N 6. P. 529.)
4. Хунджуа А.Г., Птицын А.Г., Бровкина Е.А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2018. № 1. С. 90. (Khundjua A.G., Ptitsyn A.G., Brovkina E.A. // Moscow University Phys. Bull. 2018. 73, № 1. P. 101.)
5. Хунджуа А.Г., Птицын А.Г., Бровкина Е.А., Чжэн Ш. // ФММ. 2012. 113, № 11, С. 1093. (Khundzhuua A.G., Ptitsyn A.G., Brovkina E.A., Chzhen S. // Physics of Metals and Metallography. 2012. 113, № 11. P. 1035.)
6. Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Чжэн Ш. // Перспективные материалы. 2010. № 6, С. 12.
7. Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч. 1. Структура, фазовые превращения и свойства / Под ред. В.Г. Пушина. Екатеринбург, 2006.
8. Fukuda T., Saburi T., Doi K., Nenno S. // Materials Transactions. 1992. 33. P. 271.
9. Miyazaki S. // Shap. Mem. Superelasticity. 2017. 3. P. 279.
10. Оцука К., Симидзу К., Судзуки Ю. и др. Сплавы с эффектом памяти формы. М., 1990.
11. Shusong T., Huibin X. // Continuum Mech. Thermodyn. 1990. 2, N 4. P. 241.
12. Sari U., Aksoy I. // Journal of Materials Processing Technology. 2008. 195, N 1–3. P. 72.
13. Mallik U.S., Sampath V. // Materials Science and Engineering A. 2008. 481–482. P. 680.
14. Aldirmaz E., Aksoy I. // Arab J Sci Eng. 2014. 39. P. 575.
15. Nishida M., Nishiura T., Kawano H., Inamura T. // Philos. Mag. 2012. 92. P. 2215.

16. Nishida M., Okunishi E., Nishiura T. et al. // Philos. Mag. 2012. **92**. P. 2234.
17. Inamura T., Nishiura T., Kawano H. et al. // Philos. Mag. 2012. **92**. P. 2247.
18. Александров П. С. Курс аналитической геометрии и линейной алгебры. Санкт-Петербург. 2009.
19. Sari U. // International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials. 2010. **17**, N. 2. P. 192.
20. Otsuka K., Ren X. // Progress in Materials Science. 2005. **50**. P. 511.
21. Soejima Y., Motomura S., Mitsuhashi M. et al. // Acta Mater. 2016. **103**. P. 352.

Substantiation of Experimentally Observed Self-Accommodation Complexes of Martensite Crystals in Alloys with Shape Memory Effects

A. G. Khundjua^{1,a}, E. A. Brovkina^{1,b}, A. G. Ptitsin¹, M. M. Melnikov¹, B. A. Volodin²

¹Department of Solid State Physics, ²Department of mathematics;

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russia.

E-mail: ^akhundjua@mail.ru, ^bel-brov@yandex.ru.

This paper presents an algorithm for analyzing the possibility of the formation of self-accommodation complexes of martensite crystals in alloys with shape memory effects with consideration for twinning and minimization of the strain averaged over a corresponding set of domains. It has been shown that complete self-accommodation is possible only in the complexes that simultaneously contain all the orientation relationship variants. The calculation performed for the case of rhombohedral martensite (four possible orientation relationship variants) has demonstrated that there is no average shape strain in the four domains. The thus-formed four-domain complex incorporates all the possible variants of the orientation relationship and, for this reason is a self-accommodation complex. Such complexes have been repeatedly observed in titanium nickelide alloys. The analysis of monoclinic 18R-martensite shows that complete self-accommodation can be attained only in the complex of 12 different domains. The experimentally observed four-domain complexes in the Cu–Al–Ni and Cu–Al–Mn alloys can be explained by partial self-accommodation, which takes the exposure of a martensite crystal on the outer surface of a crystal into account.

Keywords: shape memory effect, martensite transformations, twinning, self-accommodation complexes, symmetry operators, ellipsoid of deformation.

PACS: 61.50.ks.

Received 28 June 2019.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2019. **74**, No. 6. Pp. 650–656.

Сведения об авторах

1. Хунджуа Андрей Георгиевич — доктор физ.-мат наук, профессор; тел.: (495) 939-30-26, e-mail: khundjua@mail.ru.
2. Бровкина Елена Анатольевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-10-73, e-mail: el-brov@yandex.ru.
3. Птицын Арсений Григорьевич — вед. электроник; тел.: (495) 939-30-26, e-mail: senyabird@yandex.ru.
4. Мельников Максим Михайлович — вед. программист; тел.: (495) 939-30-26, e-mail: xenomorpha@list.ru.
5. Володин Борис Алексеевич — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-39-47, e-mail: volodinba@mail.ru.