

Платоновы и архимедовы тела как основа строения самоаккомодационных комплексов мартенситных кристаллов в сплавах с эффектами памяти формы

А.Г. Хунджужа,^{1,*} Е.А. Бровкина^{1,†}

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

(Поступила в редакцию 06.10.2022; после доработки 29.10.2022; принята к публикации 31.10.2022)

Целью работы является анализ взаимосвязи архитектуры самоаккомодационных комплексов (СК) с сингонией решетки мартенситных кристаллов. Самоаккомодационные комплексы состоят из множества попарно сдвойникованных доменов — кристаллов мартенситов, относящихся к кристаллографически эквивалентным вариантам ориентационного соотношения между решетками аустенита и мартенсита. Рассчитаны простейшие СК для тетрагональной, орторомбической, ромбоэдрической и моноклинной дисторсии кубической решетки аустенита. Показано, что полная самоаккомодация возможна лишь в комплексах, содержащих одновременно все варианты ориентационного соотношения.

Обсуждается вопрос внешней огранки комплексов. Причиной формирования СК является минимизация упругой энергии, т.е. огранка регулируется энергией межфазной границы. С другой стороны, если внешняя поверхность СК является многогранником, то его симметрия должна «вписываться» в анизотропию упругих свойств аустенита. Из соображений симметрии понятно, что многогранник должен быть правильным и обладать теми же элементами симметрии, что и кубическая решетка аустенита, при этом оси симметрии кубической решетки аустенита должны совпадать с осями симметрии многогранника. Подобными многогранниками и являются некоторые из тел Платона и Архимеда, обладающие осями симметрии 2-го, 3-го и 4-го порядков. Ряд рассчитанных в работе примеров подтверждает возможность существования комплексов в виде указанных многогранников.

PACS: 61.50.ks. УДК: 538.9.

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

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.78.2320502

ВВЕДЕНИЕ

В сплавах с эффектами памяти формы кристаллы мартенсита, сформированные в процессе охлаждения в массиве высокотемпературной фазы (аустенита) в отсутствие полей внешних напряжений, имеют вполне определённую внешнюю огранку и внутреннее строение [1–6]. Кристаллы мартенсита объединены в самоаккомодационные комплексы — многогранник, состоящий из множества попарно сдвойникованных доменов (кристаллографически эквивалентных вариантов ориентационного соотношения между решетками аустенита и мартенсита). При этом грани многогранника — плоские, в отличие от линзообразной формы и двояковыпуклой поверхности одиночных кристаллов мартенсита, находящихся внутри аустенитной матрицы (без выхода на внешнюю поверхность кристалла). При выходе на внешнюю поверхность кристалла мартенситная линза становится плоскопараллельной пластиной.

Целью настоящей работы является рассмотрение взаимосвязи архитектуры самоаккомодационных комплексов с сингонией решетки мартенситных кристаллов. Строение самоаккомодационного комплекса определяется его доменной структурой, т.е. задействованными плоскостями двойникования. Число возможных вариантов доменной структуры самоаккомодационных комплексов ограничено, поддается прогнозированию и классификации, ввиду того, что аустенит всегда имеет кубическую решетку, что определяет число кристаллографически эквивалентных вариантов ориентационного соотношения (число различных доменов) — от 3 до 24. Переход от домена к домену описывается с помощью одного из 24 операторов симметрии решетки аустенита [7, 8], из которых девять являются одновременно и операторами двойникования.

Из соображений симметрии понятно, что многогранник должен обладать теми же элементами симметрии, что и кристаллическая решетка аустенита (в сплавах с эффектами памяти формы аустенит всегда имеет кубическую решетку). Многогранник должен быть правильным, т.е. принадлежать к Платоновым или Архимедовым телам, и иметь оси симметрии 2-го, 3-го и 4-го порядков.

* E-mail: khundjua@mail.ru

† E-mail: cel-brov@yandex.ru

1. РОМБОЭДРИЧЕСКИЙ МАРТЕНСИТ

Например, если взять октаэдр (Платоново тело) или усеченный куб, срезанный так, чтобы образовался октаэдр с вершинами в центре граней куба (Архимедово тело), затем расцечь этот октаэдр по плоскостям его симметрии (параллельным граням куба), то можно получить представление о внутреннем устройстве самоаккомодационного комплекса ромбоэдрического R-мартенсита в никелиде титана [8, 9]. В результате такого сечения октаэдр распадется на 8 доменов, попарно сдвоенных по плоскостям, параллельным плоскостям аустенита типа {100}. Как видно из рис. 1, восьмидоменный комплекс содержит 4 варианта ориентационного соотношения. На рис. 1, а показано расположение доменов в верхней части октаэдрического домена, на рис. 1, б — в нижней части (ниже плоскости двойникового, параллельной плоскости (001)_A решетки аустенита).

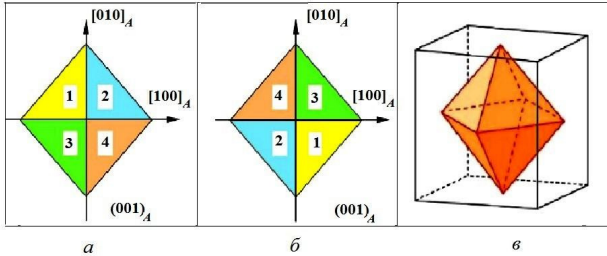


Рис. 1. Верхняя (а) и нижняя (б) части восьмидоменного самоаккомодационного комплекса R-мартенсита в никелиде титана в форме октаэдра (Платоново тело), вписанного в куб с ребрами, параллельными базисным вектором решетки аустенита (в)

Исследование проблемы самоаккомодации должно включать как построение различных типов комплексов для заданных ОС, так и анализ релаксации упругих напряжений в этих комплексах. Самоаккомодация невозможна без как минимум 2 плоскостей двойникового решетчатого мартенсита, параллельных плоскостям симметрии решетки аустенита, что в случае низкосимметричной решетки мартенсита маловероятно.

Построение различных типов комплексов следует начать с простейшего варианта — наличия двух плоскостей двойникового решетчатого мартенсита (с помощью одной плоскости двойникового можно построить полисинтетический двойник, но не самоаккомодационный комплекс).

Наиболее благоприятны для выполнения условий параллельности соответствующих плоскостей мартенситные превращения дисторсионного типа. Малая дисторсия кубической решетки оставляет практически параллельными системы плоскостей типа {110} и {100} в решетках аустенита и мартенсита, открывая одновременно возможность двойникового решетчатого мартенсита по некоторым из этих плоскостей.

Например, в сплавах на основе γ -марганца при мартенситном превращении ГЦК аустенита в тетрагональный или орторомбический мартенсит [10] открывается возможность двойникового по четырем или шести плоскостям типа {110}. Следует помнить, что двойникование по плоскостям симметрии решетки мартенсита ничего в расположении атомов не меняет. Далее будут рассмотрены тетрагональная, орторомбическая, ромбоэдрическая и моноклинная дисторсии кубической решетки и рассчитаны простейшие самоаккомодационные комплексы.

2. ТЕТРАГОНАЛЬНЫЙ МАРТЕНСИТ

В сплавах на основе γ -Mn антиферромагнитное упорядочение приводит к мартенситному превращению дисторсионного типа ГЦК аустенита в тетрагональный или орторомбический мартенсит (в зависимости от легирующего элемента). Базисные векторы тетрагонального мартенсита направлены вдоль базиса аустенита. Элементарные ячейки решеток аустенита и мартенсита преобразуются друг в друга путем однородной деформации, которая в применении к сфере единичного радиуса $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ превращает её в эллипсоид вращения (деформации): $\frac{x'^2}{(1+\varepsilon_1)^2} + \frac{y'^2}{(1+\varepsilon_2)^2} + \frac{z'^2}{(1+\varepsilon_3)^2} = 1$. Это уравнение отличается от уравнения эллипсоида в общем виде: $a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz = 1$, равенством нулю трех коэффициентов $a_{13} = a_{23} = a_{12} = 0$, а также равенством коэффициентов: $a_{11} = a_{22} = a$, и может быть записано в виде: $ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 = 1$. Заменяя координаты в этом уравнении в соответствии с 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 второго варианта ОС: $ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 = 1$.

Действуя подобным образом, можно найти уравнения для всех 24 вариантов ориентационного соотношения (001)_A || (100)_M, [001]_A || [100]_M. Группа операторов симметрии \hat{S}_i содержит 24 оператора, но разных уравнений эллипсоидов будет всего три, т.е. 24 варианта вырождаются в 3 (с коэффициентом a_{33} при x^2, y^2, z^2) (табл. 1).

Таблица 1. Кристаллографически эквивалентные варианты ориентационного соотношения для тетрагонального мартенсита в сплавах γ -Mn

A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₂₁	A ₂₄
A ₇	A ₈	A ₁₂	A ₁₃	A ₁₅	A ₁₇	A ₂₀	A ₂₃
A ₉	A ₁₀	A ₁₁	A ₁₄	A ₁₆	A ₁₈	A ₁₉	A ₂₂

Казалось бы, самоаккомодационный комплекс может содержать по одному варианту из каждой

группы, но так не получится. Если в качестве исходного взять домен A_1 , то его двойникованными соседями могут быть домены 7 или 8, с одной стороны, и домены 9 или 10 — с другой. Однако переход от домена 7 к доменам 9 или 10 реализуется не двойниковыми операторами, как и при переходе от домена 8 к доменам 9 или 10.

Построенный таким образом комплекс (рис. 2) основан на компенсации деформации, но в нём не все соседствующие домены связаны операцией двойничкования. Такие домены не могут расти один за счет другого путем скольжения при наложении напряжений, и самоаккомодация будет затруднена.

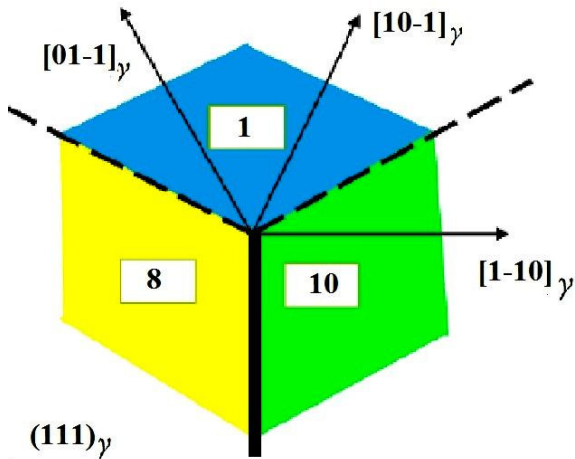


Рис. 2. Схема возможного двойничкования тетрагонального мартенсита в сплавах на основе γ -Mn

В статье [10] описана морфология кристаллов мартенсита: в сплавах Mn-Cu, как и в хорошо изученных сплавах In-Tl: «в результате превращения образуются грубые и тонкие двойники. Границей грубых двойников являются плоскости $\{110\}$; грубые двойники состоят из тонких, границей которых являются плоскости $\{110\}$, лежащие под углом 60° к границам грубых двойников, инвариантной плоскостью является плоскость $\{110\}$, что приводит к образованию колоний кристаллов двойников с взаимно перпендикулярными осями c , образующих тонкие двойники. Грубый двойник представляет собой колонию тонких двойников». Из этого описания уже можно уловить необычность строения комплексов доменов — отсутствие в них симметрии. По-видимому, это связано именно с невозможностью двойниковой связи между некоторыми доменами.

3. ОРТОРОМБИЧЕСКИЙ МАРТЕНСИТ

В некоторых сплавах на основе γ -Mn мартенсит имеет орторомбическую структуру. При этом базисные векторы элементарной орторомбической ячейки мартенсита направлены соответственно вдоль базисных осей аустенита: $a||[100]$, $b||[010]$, $c||[001]$

(имеется 6 кристаллографически эквивалентных вариантов ОС). Элементарные ячейки решеток аустенита и мартенсита преобразуются друг в друга путем однородной деформации, которая в применении к сфере единичного радиуса превращает её в эллипсоид вращения (тождественный эллипсоиду деформации): сфера $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ переходит в эллипсоид $\frac{x'^2}{(1 + \varepsilon_1)^2} + \frac{y'^2}{(1 + \varepsilon_2)^2} + \frac{z'^2}{(1 + \varepsilon_3)^2} = 1$.

Это уравнение отличается от уравнения эллипсоида в общем виде: $a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz = 1$, равенством нулю трех коэффициентов $a_{13} = a_{23} = a_{12} = 0$. $a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 = 1$. для 2-го варианта ориентационного соотношения: $a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 = 1$.

Действуя подобным образом, можно найти уравнения для всех 24-х вариантов ориентационного соотношения — разных уравнений эллипсоидов будет 6. Если взять по домену из каждой строки табл. 2 и собрать из них комплекс, то усредненная деформация по комплексу равна нулю.

Таблица 2. Кристаллографически эквивалентные варианты ориентационного соотношения для орторомбического мартенсита в сплавах γ -Mn

A_1, A_2, A_3, A_4	$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 = 1$
A_5, A_6, A_{21}, A_{24}	$a_{22}x^2 + a_{11}y^2 + a_{33}z^2 = 1$
A_7, A_8, A_{20}, A_{23}	$a_{33}x^2 + a_{22}y^2 + a_{11}z^2 = 1$
$A_{12}, A_{13}, A_{15}, A_{17}$	$a_{11}x^2 + a_{33}y^2 + a_{22}z^2 = 1$
$A_9, A_{10}, A_{19}, A_{22}$	$a_{22}x^2 + a_{33}y^2 + a_{11}z^2 = 1$
$A_{11}, A_{14}, A_{16}, A_{18}$	$a_{33}x^2 + a_{11}y^2 + a_{22}z^2 = 1$

Для орторомбического мартенсита усредненная деформация равна нулю и в комплексе из 3-х доменов (первый — из группы A_1, A_2, A_3, A_4 , второй — из $A_9, A_{10}, A_{19}, A_{22}$ и третий — из $A_{11}, A_{14}, A_{16}, A_{18}$). Однако ни один домен из группы 1 не связан операцией двойничкования ни с одним доменом из группы 2 или 3, поэтому о самоаккомодации здесь речь не идет.

Построение 6-доменного самоаккомодационного комплекса орторомбического мартенсита требует три плоскости двойничкования, например $(1\bar{1}0)$, $(10\bar{1})$ и $(01\bar{1})$, (двойничкование решетки мартенсита по этим плоскостям возможно). В результате двойничкования по этим плоскостям может быть сформирован 6-доменный комплекс (рис. 3). В итоге можно построить 4 самоаккомодационных комплекса по 6 доменов в каждом.

Заметим, что если выстроить по этой же схеме домены тетраэдрического мартенсита, то сформируется самоаккомодационный комплекс «шестерик» без перечисленных выше недостатков — отсутствия двойниковой связности доменов.

Описание мартенситных структур в орторомбическом базисе не ограничивается случаем сплавов на основе γ -Mn. Оно применяется практически для

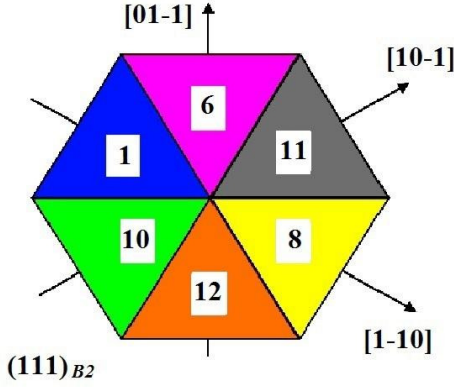


Рис. 3. Схема возможного двойникового орторомбического мартенсита в сплавах на основе γ -Mn

всех плотноупакованных многослойных структур мартенсита. Так, в некоторых сплавах на основе меди со структурой аустенита типа DO_3 формируется многослойный орторомбический мартенсит $18R$ [1]. При этом взаимная ориентация решеток такова, что $(001)_{DO_3} \parallel (100)_{18R}$, $[110]_{DO_3} \parallel [001]_{18R}$.

В отличие от случая дисторсии решетки при таком ориентационном соотношении деформацию решетки проще описывать не в базисе решетки аустенита, а в орторомбическом базисе, 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:

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

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: $1 + \varepsilon_1 = \frac{a_{nR}}{a_{DO_3}}$,

$$\hat{A}_1^{mono} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos\beta(1+\varepsilon_3)} & -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos\beta(1+\varepsilon_3)} & 0 \\ -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos\beta(1+\varepsilon_3)} & \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{\cos\beta(1+\varepsilon_3)} & 0 \\ -\frac{2tg^2\beta}{1+\varepsilon_1} & -\frac{2tg^2\beta}{1+\varepsilon_1} & \frac{2}{(1+\varepsilon_1)} \end{vmatrix}.$$

Для исходного варианта ОС (матрица $\hat{A}_1 = \hat{A}$) уравнение эллипсоида деформации можно получить, подставляя преобразованные в результате мартенситного превращения координаты $|x', y', z'\rangle = \hat{A}_i|x, y, z\rangle$, в уравнение сферы. Полученное уравнение отлича-

$$1 + \varepsilon_2 = \frac{b_{nR}}{\sqrt{2}a_{DO_3}}, \quad 1 + \varepsilon_3 = \frac{2\sqrt{2}c_{nR}}{na_{DO_3}}.$$

Тогда матрица ориентационного соотношения имеет вид:

$$\hat{A}_1^{ort} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \left\{ \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & \left\{ -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & 0 \\ \left\{ -\frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & \left\{ \frac{1}{1+\varepsilon_2} + \frac{1}{1+\varepsilon_3} \right\} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{1+\varepsilon_1} \end{vmatrix}.$$

Проводя стандартные действия, легко убедиться, что разных уравнений эллипсоидов будет 6. Если взять по домену из каждой строки табл. 3 и собрать из них комплекс, то усредненная деформация по комплексу равна нулю. Такие комплексы наблюдались экспериментально в сплавах Cu-Zn [1].

Шестидоменный самоаккомодационный комплекс может быть вписан в усеченный октаэдр, кубооктаэдр и усеченный куб — Архимедовы тела.

Таблица 3. Кристаллографически эквивалентные варианты ориентационного соотношения для орторомбического мартенсита в сплавах Cu-Zn

A_1, A_4, A_5, A_6	$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12}xy = 1$
A_2, A_3, A_{21}, A_{24}	$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12}xy = 1$
$A_7, A_{15}, A_{17}, A_{23}$	$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2b_{12}xy = 1$
$A_8, A_{12}, A_{13}, A_{20}$	$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2b_{12}xy = 1$
$A_{10}, A_{11}, A_{16}, A_{19}$	$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2b_{12}xy = 1$
$A_9, A_{14}, A_{18}, A_{22}$	$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2b_{12}xy = 1$

4. МОНОКЛИННЫЙ МАРТЕНСИТ

Мартенсит $m18R$ в сплавах на основе меди фактически является моноклинно искаженным орторомбическим мартенситом [1, 11, 12], описанным выше. Для моноклинного мартенсита тензор деформации

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

а матрица ориентационного соотношения

есть от уравнения эллипсоида в общем виде $a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz = 1$ равенством в последнем некоторых коэффициентов, а именно $a_{11} = a_{22} = a$; $a_{12} = b_{12}$; $a_{13} = a_{23} = b$ и может быть записано в виде: $ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12} + 2bxz + 2byz = 1$.

Уравнения для других вариантов ориентационно-го соотношения можно найти в табл. 4.

Таблица 4. Кристаллографически эквивалентные варианты ориентационного соотношения для моноклинного мартенсита в сплавах на основе меди (из статьи А.Г. Хунджуа и др. в № 6 (2019) в этом журнале)

A_1, A_6	$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12} + 2bxz + 2byz = 1$
A_2, A_{24}	$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12} - 2bxz + 2byz = 1$
A_3, A_{21}	$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 - 2b_{12} + 2bxz - 2byz = 1$
A_4, A_5	$ax^2 + ay^2 + a_{33}z^2 + 2b_{12} - 2bxz - 2byz = 1$
A_7, A_{17}	$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2b_{12} + 2bxz - 2byz = 1$
A_8, A_{12}	$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2b_{12} + 2bxz + 2byz = 1$
A_9, A_{18}	$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2b_{12} - 2bxz + 2byz = 1$
A_{10}, A_{11}	$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2b_{12} + 2bxz + 2byz = 1$
A_{13}, A_{23}	$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 + 2b_{12} - 2bxz - 2byz = 1$
A_{14}, A_{22}	$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 - 2b_{12} + 2bxz - 2byz = 1$
A_{15}, A_{20}	$a_{33}x^2 + ay^2 + az^2 - 2b_{12} - 2bxz + 2byz = 1$
A_{16}, A_{19}	$ax^2 + a_{33}y^2 + az^2 + 2b_{12} - 2bxz - 2byz = 1$

Уравнения эллипсоидов составляют 12 различных пар. Анализ этих уравнений показывает, что для полной самоаккомодации необходимо:

1. включить в комплекс варианты с коэффициентом a_{33} при каждом слагаемом — достижимо при числе доменов, кратном трем;
2. уничтожить три последних слагаемых с коэффициентами b_{12} и b — достижимо при числе доменов, кратном четырем.

Тогда одновременное выполнение п. 1 и 2 возможно минимум в 12 доменах, т.е. полная самоаккомодация достигается только в комплексах, содержащих ВСЕ варианты ОС. Однако самоаккомодационные комплексы из четырех доменов мартенсита $m18R$ многократно наблюдались в сплавах Cu-Ni-Al и Cu-Al-Mn [11, 12], что требует каких-то объяснений.

Подобные рассуждения справедливы и в отношении моноклинного мартенсита $B19'$ в никелиде титана, т.к. ориентационные соотношения для мартенситов $B19'$ и $m18R$ в сплавах на основе меди практически совпадают, а их структуры отличаются лишь количеством плотноупакованных слоев. Тогда и в никелиде титана самоаккомодационные комплексы должны содержать 12 доменов. Однако и здесь экспериментально наблюдались комплексы типа шестерик, содержащие меньшее число доменов [13, 14].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, анализ проблемы показал, что полная самоаккомодация возможна лишь в комплексах, содержащих одновременно ВСЕ варианты ориентационного соотношения (по крайней мере, для известных из литературы данных).

Наблюдаемые экспериментально самоаккомодационные комплексы могут быть объяснены частичной самоаккомодацией, учитывающей выход кристалла мартенсита на внешнюю поверхность кристалла. Следует обратить внимание на то, что в эксперименте наблюдаются именно комплексы, 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. При этом минимизация упругой энергии необходима лишь в двух измерениях (исключается направление, перпендикулярное поверхности). Математически это сводится к замене эллипсоида деформации на эллипс (пересечение эллипсоида с поверхностью кристалла).

Вопрос о частичной аккомодации примыкает к задаче о внешней огранке кристаллов мартенсита — задаче достаточно сложной [15] и в общем случае пока далекой от решения. Если кристаллы мартенсита находятся внутри аустенитной матрицы, они обычно имеют линзообразную 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. Грани самоаккомодационного комплекса, которые также являются плоскими. Причиной формирования самоаккомодационного комплекса является именно минимизация упругой энергии, т.е. огранка регулируется энергией межфазной границы. Однако для самоаккомодационного комплекса ситуация несколько усложняется ввиду того, что его внешняя поверхность является многогранником, симметрия которого должна «вписываться» в анизотропию упругих свойств аустенита. Во всяком случае, интуитивные соображения симметрии подска-

зывают, что оси симметрии кубической решетки аустенита должны совпадать с осями симметрии многогранника, составленного из мартенситных кристаллов, т.е. самоакко-

модационного комплекса. Подобными многогранниками как раз и являются некоторые из тел Платона и Архимеда.

- [1] *Ооцука К., Симидзу К., Судзуки Ю.* и др. Сплавы с эффектом памяти формы. Пер. с яп. М., 1990.
- [2] *Otsuka K., Wayman C.M.* Shape Memory Materials. Cambridge: Cambridge Univ. Press. 1998.
- [3] Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч. 1. Структура, фазовые превращения и свойства. / Под ред. В.Г. Пушина. Екатеринбург, 2006.
- [4] *Варлимонт Х., Дилей Л.* Мартенситные превращения в сплавах на основе меди, серебра и золота. Пер. с англ. М., 1980.
- [5] *Хунджюа А.Г.* Структурные превращения в сплавах с эффектами памяти формы. Учеб. посо. М.: Физический факультет МГУ, 2014.
- [6] *Хунджюа А.Г., Птицын А.Г., Бровкина Е.А., Чжэн Шаотiao* // ФММ. 2012. **113**. № 11. С. 1093.
- [7] *Хунджюа А.Г., Сорокин А.В., Чернов Е.В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1991. **32**, N 5. С. 86. (*Khundzhua A.G., Sorokin A.V., Chernov E.V.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 1991. **46**, 5. P. 83)
- [8] *Хунджюа А.Г., Птицын А.Г., Бровкина Е.А.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2018. № 1. С. 90. (*Khundzhua A.G., Ptitsin A.G., Brovkina E.A.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 2018. **73**, N 1. P. 101).
- [9] *Fukuda T., Saburi T., Doi K., Nenno S.* Nucleation and Self-Accommodation of the R-Phase in Ti-Ni Alloys // Mater. Trans., JIM. 1992. **33**. P. 271.
- [10] *Винтайкин Е.З., Удовенко В.А., Литвин Д.Ф.* и др. // Изв. ВУЗов. Физика. 1985. № 5. С. 104.
- [11] *Sar Ugur, Aksoy Ilhan.* // Journal of Materials Processing Technology. 2008. **195**, N 1–3. P. 72.
- [12] *Aydogdu Yildirim, Aydogdu Ayse, Adiguzel Osman* // Journal of Materials Processing Technology. 2002. **123**. N 3. P. 498.
- [13] *Nishida M., Nishiura T., Kawano H., Inamura T.* // Philos. Mag. 2012. **92**. P. 2215.
- [14] *Soejima Y., Motomura S., Mitsuahara M, Inamura T., Nishida M.* // Acta Materialia 2016. **103**. P. 352.
- [15] *Лободюк В.А., Эстрин Э.И.* Мартенситные превращения. М., 2009.

Platonic and Archimedean Solids As a Basis for the Structure of Self-Accommodation Complexes of Martensite Crystals in Alloys with Shape Memory Effects

A.G. Khundjua^a, E.A. Brovkina^b

Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russia

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

The purpose of this work is to analyze the relationship between the architecture of self-accommodation complexes (SACs) and the lattice syngony of martensite crystals. Self-accommodation complexes consist of a set of pairwise twinned domains, martensite crystals, which are crystallographically equivalent variants of the orientation relationship between austenite and martensite lattices. The simplest SACs for tetragonal, orthorhombic, rhombohedral, and monoclinic distortions of the cubic austenite lattice are calculated. It is shown that complete self-accommodation is possible only in complexes containing all variants of the orientation relationship simultaneously. The problem of the external faceting of the complexes is discussed. The reason for the formation of SACs is the minimization of elastic energy, i.e., the faceting is regulated by the energy of the interphase boundary. On the other hand, if the external surface of a SAC is a polyhedron, its symmetry should fit into the anisotropy of elastic properties of austenite. From symmetry considerations, it is clear that the polyhedron should be regular and have the same symmetry elements as the cubic lattice of austenite, and the symmetry axes of the cubic lattice of austenite should coincide with the symmetry axes of the polyhedron. Such polyhedrons are some of Platonic and Archimedean solids with axes of symmetry of the second, third, and fourth orders. A number of examples calculated in the article confirm the possibility of the existence of complexes in the form of these polyhedrons.

PACS: 61.50.ks.

Keywords: shape memory effect, martensite transformations, twinning, orientation relationship, self-accommodative complexes, symmetry operators, deformation ellipsoid.

Received 06 October 2022.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2023. **78**, No. 2. Pp. 192–198.

Сведения об авторах

- Хунджюа Андрей Георгиевич — доктор физ.-мат наук, профессор; тел.: (495) 939-23-87, e-mail: khundjua@mail.ru.
- Бровкина Елена Анатольевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-23-87, e-mail: el-brov@yandex.ru.