

Подгруппы группы симметрии решетки аустенита и внутренняя архитектура самоаккомодационных комплексов

А. Г. Птицын,^{*} А. Г. Хунджуа,[†] Е. А. Бровкина,[‡] М. М. Мельников
 Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
 физический факультет, кафедра физики твердого тела
 Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2
 (Статья поступила 25.04.2016; Подписана в печать 05.05.2016)

В работе рассмотрена внутренняя архитектура самоаккомодационных комплексов мартенситных кристаллов, которая определяется плоскостями двойникования мартенситных кристаллов. Показано, что условие замкнутости доменного комплекса приводит к следующему требованию: операторы симметрии, соответствующие кристаллографически эквивалентным вариантам ориентационного соотношения и попарно связанные операцией двойникования, должны образовывать подгруппу группы операторов симметрии решетки кубического аустенита.

PACS: 61.50.ks УДК: 53.49.05

Ключевые слова: эффект памяти формы, мартенситные превращения, ориентационные соотношения, самоаккомодационные комплексы, двойникование.

В сплавах с эффектами памяти формы в процессе роста мартенситных кристаллов релаксация упругих напряжений приводит к их двойникованию, в результате чего формируется самоаккомодационный комплекс доменов (вариантов ориентационного соотношения). Деформация формы, усредненная по такому комплексу, описывается единичной матрицей, т. е. компенсация формоизменения и минимизация упругой энергии происходит не только на уровне зерна аустенита или поликристалла в целом, но и на микроуровне отдельных мартенситных кристаллов.

Известно, что в сплавах с эффектами памяти формы аустенит всегда имеет кубическую решетку (сингония мартенситных кристаллов может быть любой). Кубическая решетка аустенита определяет число кристаллографически эквивалентных вариантов в интервале от 4-х до 24-х (максимальный фактор повторяемости). Переход от одного варианта ОС к другому осуществляется с помощью одного из 24-х операторов симметрии, из которых 9 являются одновременно и операторами двойникования. Таким образом, среди всевозможных пар кристаллографически эквивалентных вариантов ориентационного соотношения лишь часть находится в двойниковой связи, что накладывает ограничения на внутреннюю архитектуру (количество и конфигурацию доменов в самоаккомодационном комплексе).

Морфология самоаккомодационного комплекса определяется внешней и внутренней архитектурой, т. е. внешней гранкой кристаллов мартенсита (габитусными плоскостями) и доменной внутренней структурой комплекса, т. е. задействованными плоскостями двойникования. Прогнозирование гранки на основе различных вариаций феноменологической теории мартен-

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

Рис. 1: Таблица умножения двойниующих операторов $\hat{S}_2 - \hat{S}_{10}$

ситных превращений малоэффективно и выходит за рамки настоящей работы. Относительно возможных вариантов доменной структуры самоаккомодационного комплекса можно утверждать, что их число ограничено, поддается прогнозированию и классификации. Кубическая решетка аустенита обладает девятью плоскостями симметрии, и параллельные им плоскости двойникования мартенсита должны пересекаться под углами в 90, 60 и 45°, что с учетом обычно наблюдаемой для мартенситных кристаллов некубической симметрии ограничивает число возможных плоскостей двойникования, т. е. междоменных границ в самоаккомодационном комплексе.

При ориентации кристаллической решетки мартенсита относительно решетки аустенита, выраженной матрицей \hat{A} , переход к эквивалентному варианту ориентационного соотношения осуществляется одним из операторов группы симметрии решетки аустенита \hat{S}_i : $\hat{A}_i = \hat{S}_i \hat{A}$. Двойникование кристалла мартенсита по плоскости (UVW) также меняет ориентацию решетки

^{*}E-mail: senyabird@yandex.ru

[†]E-mail: khundjua@mail.ru

[‡]E-mail: el-brov@yandex.ru

мартенсита $\hat{A}_i = \hat{A}\hat{D}_{UVW} = \hat{A}\hat{D}_i$ (\hat{D}_{UVW} — оператор двойникования). Двойниковая связь двух вариантов ориентационного соотношения выражается уравнением $\hat{A}_i = \hat{S}_i\hat{A} = \hat{A}\hat{D}_{UVW} = \hat{A}\hat{D}_i$, откуда $\hat{D}_i = \hat{A}^{-1}\hat{S}_i\hat{A}$. В общем случае, когда имеется несколько плоскостей двойникования, учет замкнутости самоаккомодационного комплекса, т. е. возврата к исходному домену после n -кратного двойникования, приводит к соотношению $\hat{A}\hat{D}_1\hat{D}_2\dots\hat{D}_n = \hat{A}$, или $\hat{D}_1\hat{D}_2\dots\hat{D}_n = \hat{E}$. Так как $\hat{D}_i = \hat{A}^{-1}\hat{S}_i\hat{A}$, $\hat{E} = \hat{D}_1\hat{D}_2\dots\hat{D}_n = \hat{A}^{-1}\hat{S}_1\hat{S}_2\dots\hat{S}_n\hat{A}$, откуда $\hat{S}_1\hat{S}_2\dots\hat{S}_n = \hat{E}$, т. е. произведение операторов двойникования \hat{D}_i , вид которых зависит от сингонии решетки мартенсита, можно заменить произведением операторов симметрии кубической решетки.

Соотношение $\hat{S}_1\hat{S}_2\dots\hat{S}_n = \hat{E}$ будет автоматически выполняться, если входящие в него операторы $\hat{S}_1, \hat{S}_2, \dots, \hat{S}_n, \hat{E}$ образуют подгруппу группы операторов симметрии $\{\hat{S}_i\}$ решетки кубического кристалла, которую составляют оператор \hat{E} и 23 оператора поворота вокруг осей симметрии 4, 2 и 3-го порядка на углы, кратные соответственно $2\pi/4, 2\pi/2$ и $2\pi/3$. Из них двойнивающими являются девять операторов $\hat{S}_2 - \hat{S}_{10}$ (рис. 1). Собственные векторы операторов $\hat{S}_2, \hat{S}_3, \hat{S}_4$ нормальны трем плоскостям типа $\{100\}$, а операторов $\hat{S}_5, \hat{S}_6, \hat{S}_7, \hat{S}_8, \hat{S}_9, \hat{S}_{10}$ — шести плоскостям типа $\{110\}$.

При изучении самоаккомодации следует рассмотреть операторы, попарно связанные операцией двойникования и образующие подгруппу группы операторов симметрии. Их следует искать в таблице умножения операторов $\hat{S}_2 - \hat{S}_{10}$. Отметим, что подгруппа двойнивающих операторов группой не является.

Т. к. $\hat{S}_j^2 = \hat{E}$ для любого из девяти двойнивающих операторов ($j=2-10$), операторы \hat{S}_j и \hat{E} образуют простейшие подгруппы группы операторов симметрии. Этим подгруппам можно поставить в соответствие мартенситный кристалл, представляющий собой систему доменов двух типов с междоменными границами, параллельными одной из 9-и плоскостей симметрии аустенита. Переход в двойникованную область выражается соотношением $\hat{A}_i = \hat{S}_i\hat{A}$, где \hat{S}_i — один из 9-и двойнивающих операторов симметрии. Так как для этих операторов $\hat{S}_i^2 = \hat{E}$, то повторное двойникование приводит к исходному варианту.

Подгруппы из четырех операторов симметрии (рис. 2) можно получить путем объединения приведенных выше подгрупп из двух операторов симметрии. Для всех четырех подгрупп операторов симметрии угол между плоскостями двойникования составляет 90° . В этом случае операторы, входящие в подгруппу, коммутируют, и комплекс «четверик» содержит 4 варианта ориентационного соотношения: $\hat{A}_1, \hat{A}_i = \hat{S}_i\hat{A}_1, \hat{A}_j = \hat{S}_j\hat{A}_1, \hat{A}_k = \hat{S}_j\hat{S}_i\hat{A}_1 = \hat{S}_k\hat{A}_1$ ($\hat{S}_j\hat{S}_i = \hat{S}_k$).

Шесть или восемь операторов симметрии, содержащие не двойнивающие операторы, также образуют под-

	2	3	4		2	9	10
2	E	4	3		2	E	10
3	4	E	2		9	10	E
4	3	2	E		10	9	2
	3	7	8			4	5
3	E	8	7		4	E	6
7	8	E	3		5	6	E
8	7	3	E		6	5	4
E	6	8	10	11	12		
6	E	12	11	10	8		
8	11	E	12	6	10		
10	12	11	E	8	6		
11	8	10	6	12	E		
12	10	6	8	E	11		

Рис. 2: Подгруппы из четырех и шести операторов симметрии

группы (рис. 3). Комплексы «шестерик» и «восьмерик» сформированы с помощью трех или четырех плоскостей двойникования, пересекающихся соответственно вдоль направлений $[111]_A$ или $[001]_A$. Наличие в «шестерике» и «восьмерике» доменов, не связанных с исходным доменом операцией двойникования, указывает на возможность слияния разных комплексов в процессе роста или деформации мартенситных кристаллов. Полученные в настоящей работе результаты удовле-

E	2	3	4	5	6	21	24
2	E	4	3	24	21	6	5
3	4	E	2	21	24	5	6
4	3	2	E	6	5	24	21
5	21	24	6	E	4	2	3
6	24	21	5	4	E	3	2
21	5	6	24	3	2	4	E
24	6	5	21	2	3	E	4

Рис. 3: Подгруппа из восьми операторов симметрии

творительно согласуются с экспериментально наблюдаемыми самоаккомодационными комплексами.

The symmetry group subgroupsof the austenite lattice and the internal architecture of self-accommodation complexes

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

*Department of Solid State Physics, Faculty of Physics,
M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia*
E-mail: ^asenyabird@yandex.ru, ^bkhundjua@mail.ru, ^cel-brov@yandex.ru

The paper deals with the internal architecture of self-accommodation complexes defined operating twinning planes of martensite crystals. It is shown, that the condition for the closed domain complexes leads to the following requirement: the symmetry operators corresponding to several variants of the orientation relationships, related by the twinning operation in pairs, must form a subgroup of the symmetry group of the cubic austenite lattice.

PACS: 61.50.ks

Keywords: shape memory effect, martensite transformations, twinning, orientation relation, symmetry of martensite lattice, self-accommodation complexes.

Received 25.04.2016.

Сведения об авторах

1. Птицын Арсений Григорьевич — вед. электроник, тел.: (495) 939-30-26, (495) 939-23-87, e-mail: senyabird@yandex.ru.
2. Хунджиа Андрей Георгиевич — докт. физ.-мат.наук, профессор, профессор; тел.: (495) 939-30-26, (495) 939-23-87, e-mail: khundjua@mail.ru.
3. Бровкина Елена Анатольевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-10-73, (495) 939-23-87, e-mail: el-brov@yandex.ru.
4. Мельников Максим Михайлович — вед. программист; тел.: (495) 939-30-26, (495) 939-23-87.