

Расширение пакета программ по расчету кристаллографических характеристик мартенситных превращений

А. Г. Хунджуа^{1,*}, Б. А. Володин^{2,†}, Е. А. Бровкина^{1,‡}, М. М. Мельников^{1,§}

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

¹кафедра физики твердого тела

²кафедра математики

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

(Статья поступила 04.07.2017; Подписана в печать 05.07.2017)

В работе представлен расширенный пакет программ по моделированию дифракционных картин и определению кристаллографических характеристик в сплавах с мартенситными превращениями. Добавлен блок расчета габитусных плоскостей мартенситных кристаллов с использованием эллипсоида однородной деформации.

PACS: 61.50.ks

УДК: 538.9

Ключевые слова: компьютерное моделирование, эффект памяти формы, мартенситные превращения, габитусные плоскости, эллипсоид деформации.

На кафедре физики твердого тела физического факультета МГУ разработан пакет программ по расчету кристаллографических характеристик фазовых превращений.

В учебной работе на базе этих программ функционирует компьютерный практикум по кристаллографии [1], являющийся частью спецпрактикума КФТТ и включающий в себя два раздела:

- *дифракция на монокристаллах* — моделирование и анализ микроэлектроннограмм, лауэграмм, эпиграмм, рентгенограмм вращения;
- *дифракция на поликристаллах* — задачи на построение и анализ дифрактограмм от поликристаллических образцов.

В научной работе программы ориентированы на моделирование дифракционных картин от двухфазных объектов (аустенит + мартенсит) и расчет характеристик мартенситных превращений в сплавах с эффектами памяти формы [2]. Непосредственная расшифровка экспериментальных рентгено- и электроннограмм с индексацией рефлексов матричной и выделяющейся фазы, определением параметров решетки мартенсита, матрицы ориентационного соотношения между решетками двух фаз и плоскостей двойникования кристаллов мартенсита представляет собой обратную задачу теории рассеяния и далеко не всегда решается. Трудности такого расчёта 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 моде-

лирование дифракционных картин для известных заранее или гипотетических ориентационных соотношений и плоскостей двойникования и сопоставление их с экспериментальными рентгенограммами и (или) электроннограммами.

Основой пакета является программа по моделированию точечных картин дифракции на монокристалле (зерне поликристалла), в котором в результате фазового превращения сформировалась двухфазная структура. Картина дифракции на таком объекте содержит в себе информацию о кристаллической структуре исходной фазы (аустенита) и фазы выделения (мартенсита) — параметры решетки, ориентационное соотношение, и соответствующий расчет позволяет извлечь данную информацию из экспериментальных точечных картин дифракции.

Имеющийся в наличии пакет программ предусматривает:

- расчет матрицы \hat{A} ориентационного соотношения (перехода между базисами решеток аустенита и мартенсита);
- учет кристаллографически эквивалентных вариантов ориентационного соотношения с помощью группы операторов симметрии аустенита \hat{S}_i (в сплавах с эффектами памяти формы аустенит всегда имеет кубическую решетку);
- моделирование рентгенограмм двухфазных кристаллов на смешанном излучении (рефлексы основной фазы формируются на белом излучении, рефлексы фазы выделения — на характеристическом);
- учет двойникования кристаллов мартенситной фазы, характерного для всех мартенситных сплавов и играющего в механизме эффекта памяти формы не меньшую роль, чем перестройка кристаллической решетки;

*E-mail: khundjua@mail.ru

†E-mail: volodinba@mail.ru

‡E-mail: el-brov@yandex.ru

§E-mail: xenomorpha@list.ru

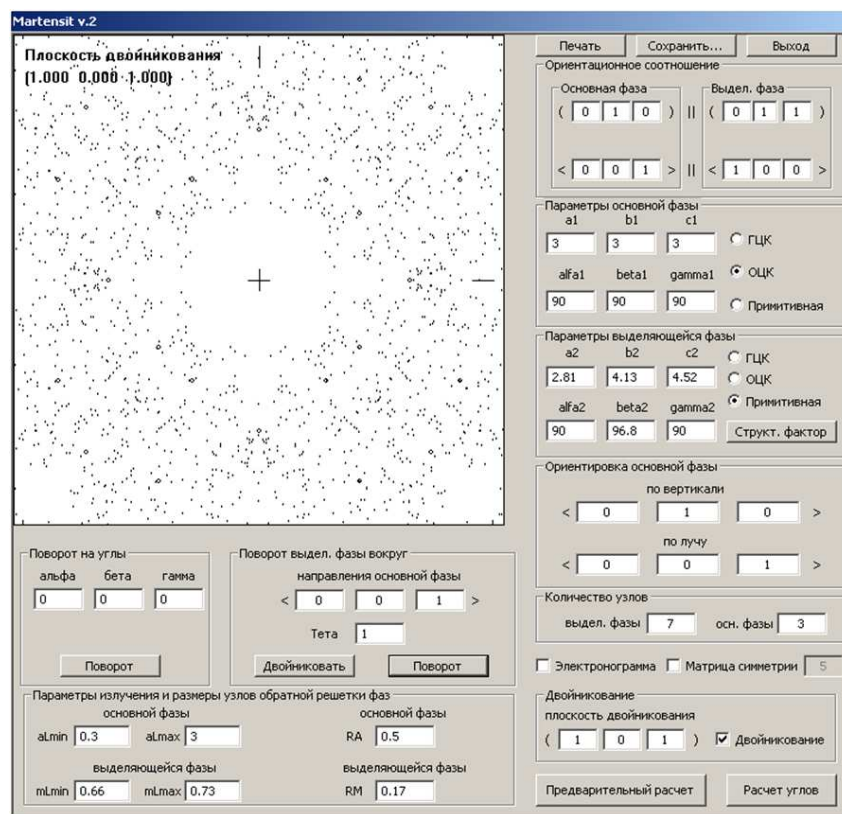


Рис. 1: Интерактивное окно программы моделирования дифракционных картин от сплава с мартенситными выделениями

- разворот кристаллической решетки мартенсита на некоторый угол относительно первоначально заданной ориентации (разворот кристаллов мартенсита как целого), вызванный релаксацией упругой энергии.

Посредством интерактивного окна (рис. 1) вводятся исходные данные моделирования: геометрия съемки, длина волны характеристического излучения, интервал длин волн спектра сплошного излучения, параметры кристаллических решеток основной фазы и мартенсита, ориентационное соотношение, плоскость двойникования, направление оси и величина поворота кристалла мартенсита. Кроме того, в главное меню программы включен еще ряд настроек моделирования, которые дают возможность изменять размер узла обратной решетки основной и выделяющейся фаз, пределы перебора индексов узлов обратной решетки мартенсита, закон погасания.

После введения исходных данных практически мгновенно рассчитанная рентгенограмма или микроэлектроннограмма выводится на экран, и может быть распечатана в масштабе, соответствующем эксперименту. На рис. 2 в качестве примера приведена экспериментальная и модельная рентгенограммы монокристалла β — фазы сплава $Ti_{45}Zr_{45}Nb_{10}$ с выделениями кристаллов α'' -мартенсита.

Кроме построения точечной дифракционной картины программа позволяет получить сведения, касающиеся возможности самоаккомодации мартенситных кристаллов — т.е. наличие плоскостей двойникования мартенсита, параллельных плоскостям симметрии аустенита. Это условие является необходимым для реализации эффектов памяти формы в мартенситных сплавах с атомно-неупорядоченной решеткой.

В настоящей работе осуществлено дальнейшее расширение возможностей пакета программ, нацеленное на расчет габитуса мартенситных кристаллов. Габитусная плоскость определяется как плоскость, в которой мартенситное превращение не изменяет протяженность линейных объектов. В соответствии с феноменологической теорией мартенситных превращений габитусные поверхности в общем случае являются коническими и определяются пересечением сферической поверхности исходной области аустенита с прямым и обратным эллипсоидами деформации [3–5].

Элементарные ячейки решеток аустенита и мартенсита преобразуются друг в друга путем однородной деформации, которая математически описывается с помощью матричного уравнения $|r'\rangle = \hat{E} |r\rangle$, где $\hat{E} = \hat{1} + \hat{\varepsilon}$ — матрица с элементами $E_{ij} = \delta_{ij} + \varepsilon_{ij}$, $\hat{\varepsilon}$ — тензор деформаций. Матрицы \hat{E} и матрица ориентационного соотношения \hat{A} связаны простым уравнением $\hat{E} = \hat{A}^{-1}$.

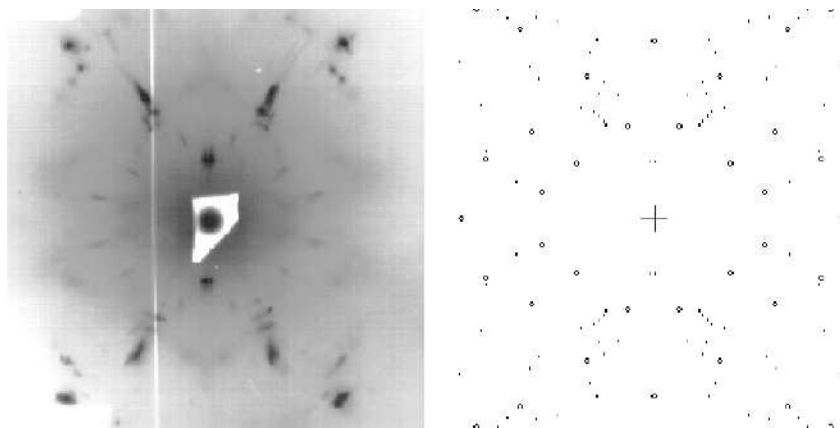


Рис. 2: Экспериментальная и модельная рентгенограммы монокристалла β -фазы сплава $\text{Ti}_{45}\text{Zr}_{45}\text{Nb}_{10}$ с выделениями кристаллов α'' -мартенсита

При однородной деформации сфера единичного радиуса превращается в трехосный эллипсоид деформации (рис. 3). Деформация раскладывается на составляющие — чистую деформацию и вращение. При чистой деформации главные оси без поворота меняют свою длину в η_1, η_2, η_3 раз. Соответствующие удлинения $\{(\eta_1 - 1); ((\eta_2 - 1)); ((\eta_3 - 1))\}$ являются главными деформациями. Интерес представляет собой и эллипсоид обратных деформаций — эллипсоид, который однородная деформация преобразует в сферу единичного радиуса (пунктирный эллипс на рис. 3).

В системе координат, связанной с главными осями деформации, уравнения единичной сферы, эллипсоида деформации и эллипсоида обратной деформации соответственно имеют вид:

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 &= 1, \\ \frac{x_1^2}{\eta_1^2} + \frac{x_2^2}{\eta_2^2} + \frac{x_3^2}{\eta_3^2} &= 1, \\ \eta_1^2 x_1^2 + \eta_2^2 x_2^2 + \eta_3^2 x_3^2 &= 1. \end{aligned}$$

Решение систем уравнений выявляет направления, вдоль которых деформация не меняет длин векторов. Эти направления лежат на конических поверхностях, проходящих через пересечения единичной сферы с эллипсоидом деформации и эллипсоидом обратной деформации, т. е. удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{1}{\eta_1^2}\right) x_1^2 + \left(1 - \frac{1}{\eta_2^2}\right) x_2^2 + \left(1 - \frac{1}{\eta_3^2}\right) x_3^2 &= 0, \\ (1 - \eta_1^2) x_1^2 + (1 - \eta_2^2) x_2^2 + (1 - \eta_3^2) x_3^2 &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Поверхности становятся плоскими, если одна из главных деформаций равна нулю, и конические поверх-

ности вырождаются в плоскости, которые, в конечном счёте, и определяют инвариантную плоскость, не меняющую своей ориентации при превращении.

Например, если $\eta_1 = 1$; $\eta_2 > 1$; $\eta_3 < 1$, то уравнение (1) принимает вид $(\eta_2^2 - 1) x_2^2 = -(1 - \eta_3^2) x_3^2$

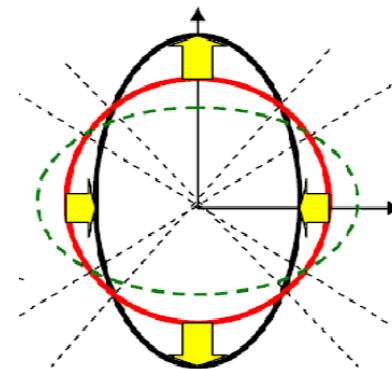


Рис. 3: Сфера исходной области аустенита, прямой и обратный эллипсоиды деформации мартенсита

или $\sqrt{(\eta_2^2 - 1)} x_2 = \pm \sqrt{(1 - \eta_3^2)} x_3$ — уравнение плоскости.

Программа, исходя из матрицы ориентационного соотношения, приводит уравнение эллипсоида деформации к главным осям. При этом наибольшая ось эллипсоида определяет максимальную величину обратной неупругой деформации мартенситного превращения. Где это возможно, программа вычисляет индексы габитусных плоскостей. Кроме того, ориентация главных осей эллипсоида деформации определяет минимальное число доменов мартенсита в самоаккомодационном комплексе.

[1] Хунджуа А. Г., Бровкина Е. А., Мельников М. М. Физическое образование в ВУЗах. 2012. **18**. № 4. С. 133.

[2] Хунджуа А. Г., Бровкина Е. А., Мельников М. М.

- Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. 2012. № 5, С. 35. (*Khundzhua A.G., Brovkina E.A., Melnikov M.M.* *Mosc. Univ. Phys. Bull.* 2012. **67**. № 5. P. 448)
- [3] Лободюк В.А., Эстрин Э.И. Мартенситные превращения. М., 2009.
- [4] *Bhattacharya K.* Theory of Martensitic Microstructure and the Shape-Memory Effect. Division of Engineering & Applied Science. California Institute of Technology. Pasadena. 2004.
- [5] *Otsuka K., Wayman C.M.* Shape Memory Materials. Cambridge University Press. 2002.

The extension of the software package for the calculation of the crystallographic characteristics of martensite transformations

A.G. Khundjua^{1,a}, B.A. Volodin^{2,b}, E.A. Brovkina^{1,c}, M.M. Melnikov^{1,d}

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

¹*Department of Solid State Physics*

²*Department of mathematics*

Moscow 119991, Russia

E-mail: ^akhundjua@mail.ru, ^bvolodinba@mail.ru, ^cel-brov@yandex.ru, ^dxenomorpha@list.ru

In the paper the extension of the software package for the simulation of diffraction patterns and determination of crystallographic characteristics of alloys with martensite transformations is presented. The block of calculation of martensite crystals habitus planes using ellipsoid of homogeneous deformation is added.

PACS: 61.50.ks

Keywords: computer simulation; shape memory effect, martensite transformations, habitus plane, ellipsoid of deformation.

Received 04 July 2017.

Сведения об авторах

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