

## Матричное описание самоаккомодации мартенситных кристаллов в сплавах с эффектами памяти формы

А. Г. Хунджуа<sup>1,\*</sup>, Е. А. Бровкина<sup>1,†</sup>, М. М. Мельников<sup>1</sup>, А. Г. Птицын<sup>1</sup>, Б. А. Володин<sup>2</sup>

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,*

*физический факультет,*

<sup>1</sup>*кафедра физики твердого тела*

<sup>2</sup>*кафедра математики*

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

(Статья поступила 25.06.2018; Подписана в печать 06.07.2018)

В работе представлен метод классификации самоаккомодационных комплексов, сочетающий групповой анализ с учетом минимизации деформации формы.

При фазовом превращении мартенситного типа элементарные ячейки решёток аустенита и мартенсита преобразуются друг в друга путём однородной деформации, которая в применении к сфере единичного радиуса превращает её в трёхосный эллипсоид (эллипсоид деформации). Двойникование решетки мартенсита изменяет уравнение эллипсоида в соответствии с преобразованием координат. Суммируя уравнения эллипсоидов для нескольких двойников, можно получить представление об усредненной по соответствующей совокупности доменов деформации и оценить суммарное формоизменение самоаккомодационного комплекса.

PACS: 61.50.ks

УДК: 538.9

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

### ВВЕДЕНИЕ

Отличительной чертой мартенситных превращений в сплавах с эффектами памяти формы (ЭПФ) является формирование самоаккомодационных комплексов (СК) — системы доменов мартенситных кристаллов, разделённых (и в тоже время связанных) плоскостями двойникования [1–3]. При формировании мартенсита охлаждения в отсутствие полей внешних напряжений СК имеют вполне определённую внешнюю огранку и внутреннее строение, по которому и следует проводить их классификацию. Строение СК определяется числом входящих в него доменов и конфигурацией междоменных границ. Вышеупомянутые домены представляют собой эквивалентные варианты ориентационного соотношения (ОС) между решетками аустенита и мартенсита.

Симметрия СК как целого связана в первую очередь с симметрией решетки аустенита. В сплавах с ЭПФ аустенит всегда имеет кубическую решетку, что и определяет число кристаллографически эквивалентных вариантов ОС — от 3-х до 24-х (максимальное значение фактора повторяемости). Переход от одного варианта ОС к другому описывается с помощью одного из 24-х операторов симметрии куба: единичный оператор  $\hat{S}_1$  и 23 оператора поворота вокруг осей симметрии 4-го, 2-го и 3-го порядка на  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  и  $120^\circ$  или кратные им углы.

Двойникование (зеркальное отражение), описывае-

мое оператором  $\hat{D}$ , для многих задач эквивалентно повороту на  $180^\circ$  вокруг нормали к плоскости двойникования. Т.е. действие некоторых операторов симметрии, а именно, — операторов поворота на  $180^\circ$  вокруг осей 2-го и 4-го порядка, эквивалентно операции двойникования.

Среди всевозможных пар кристаллографически эквивалентных вариантов ОС лишь часть находится в двойниковой связи, что ограничивает число возможных вариантов доменной структуры СК, количество и конфигурацию доменов в комплексе. Если два домена разделены плоскостью двойникования, то  $\hat{S}_i \hat{A} = \hat{A} \hat{D}_i$ , откуда  $\hat{D}_i = \hat{A}^{-1} \hat{S}_i \hat{A}$ , где  $\hat{A}$  — матрица ОС, столбцы которой — суть проекции базисных векторов решетки мартенсита на базис решетки аустенита. Из замкнутости СК, т.е. возврата к исходному домену после  $n$ -кратного двойникования, следует:  $\hat{E} = \hat{D}_1 \hat{D}_2 \hat{D}_3 \dots \hat{D}_n = \hat{A}^{-1} \hat{S}_1 \hat{S}_2 \dots \hat{S}_n \hat{A} = \hat{S}_1 \hat{S}_2 \dots \hat{S}_n$ .

Полученное соотношение  $\hat{S}_1 \hat{S}_2 \dots \hat{S}_n = \hat{E}$  будет выполняться, например, если входящие в него операторы образуют подгруппу группы операторов симметрии решетки кубического кристалла. В первую очередь интересны подгруппы, содержащие двойникующие операторы  $\hat{S}_1 - \hat{S}_{10}$ . Итак, произведение операторов двойникования, вид которых зависит от сингонии решетки мартенсита, можно заменить произведением операторов симметрии решетки аустенита, всегда кубической.

Используя таблицу умножения операторов [4], можно выявить все подходящие подгруппы и, опираясь на них, построить соответствующие им СК. Однако у такого чисто математического подхода имеется существенный недостаток: отсутствие связи с причиной формирования СК — минимизацией деформации формы путём двойникования. Целью настоящей

\*E-mail: khundjua@mail.ru

†E-mail: el-brov@yandex.ru

работы является построение классификации СК, сочетающей групповой анализ с учетом минимизации деформации формы.

### 1. ЭЛЛИпсоИДЫ ДЕФОРМАЦИИ И ДВОЙНИКОВАНИЕ МАРТЕНСИТА

Самоаккомодация возможна далеко не всегда — она требует наличия нескольких (по крайней мере, двух) плоскостей двойникования мартенсита, параллельных плоскостям симметрии аустенита, что в случае низко симметричной решётки мартенсита выполняется далеко не всегда. С этих позиций понятно, что наиболее благоприятен для выполнения условий параллельности соответствующих плоскостей (хотя бы приблизительной, с точностью до 1–2°) случай мартенситного превращения дисторсионного типа. Малая дисторсии кубической решётки оставляет практически параллельными системы плоскостей типа (110) и (100) в решётках аустенита и мартенсита, открывая, одновременно, возможность двойникования решётки мартенсита по некоторым из этих плоскостей. Например, в сплавах на основе  $\gamma$ -марганца при превращении ГЦК аустенита в тетрагональный мартенсит (ось «с» параллельна [001]) имеется возможность двойникования мартенсита по плоскостям (101), (10 $\bar{1}$ ), (011), (01 $\bar{1}$ ).

При фазовом превращении мартенситного типа элементарные ячейки решёток аустенита и мартенсита преобразуются друг в друга путём однородной деформации, которая в применении к сфере единичного радиуса превращает её в трёхосный эллипсоид (эллипсоид деформации). Сфера  $x^2 + y^2 + z^2 = 1$  переходит в эллипсоид, описываемый (после приведения к главным осям) уравнением

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1.$$

В общем случае кристаллография мартенситного превращения описывается матрицей ОС:

$$\begin{aligned} |r'\rangle &= \hat{A}|r\rangle, & |r\rangle &= \hat{A}^{-1}|r'\rangle; \\ \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix}, \\ \begin{vmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} a_1x' + b_1y' + c_1z' \\ a_2x' + b_2y' + c_2z' \\ a_3x' + b_3y' + c_3z' \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

а уравнение эллипсоида деформации имеет вид

$$(a_1x' + b_1y' + c_1z')^2 + (a_2x' + b_2y' + c_2z')^2 + (a_3x' + b_3y' + c_3z')^2 = 1.$$

Двойникование решетки мартенсита по плоскости, параллельной плоскости решетки аустенита (100)<sub>A</sub>

(оператор двойникования  $\hat{D}_{100} = \hat{S}_2, \hat{D}_{010} = \hat{S}_3$ ), изменяет и уравнение эллипсоида в соответствии с преобразованием координат

$$\begin{aligned} |r'\rangle &= \hat{D}_{010}\hat{A}|r\rangle = \hat{S}_3\hat{A}|r\rangle, \\ |r\rangle &= (\hat{S}_3\hat{A})^{-1}|r'\rangle = \hat{A}^{-1}\hat{S}_3^{-1}|r'\rangle = \hat{A}^{-1}\hat{S}_3|r'\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} a_1x' - b_1y' - c_1z' \\ a_2x' - b_2y' - c_2z' \\ a_3x' - b_3y' - c_3z' \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

$$(a_1x' - b_1y' - c_1z')^2 + (a_2x' - b_2y' - c_2z')^2 + (a_3x' - b_3y' - c_3z')^2 = 1.$$

Суммируя уравнения (варианты 1 и 2) двух эллипсоидов можно получить представление об усредненной по двум доменам деформации. Складывая, раскрывая скобки и группируя, получаем:

$$(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2)x'^2 + (b_1^2 + b_2^2 + b_3^2)y'^2 + (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)z'^2 + 2(b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3)y'z' = 1.$$

Двойникование по плоскости (010) дает еще два варианта 3 и 4 с уравнением второго усредненного эллипсоида (3–4):

$$(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2)x'^2 + (b_1^2 + b_2^2 + b_3^2)y'^2 + (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)z'^2 - 2(b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3)y'z' = 1.$$

Усреднение по четырем вариантам дает трехосный эллипсоид, полуоси которого направлены вдоль координатных осей:

$$(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2)x'^2 + (b_1^2 + b_2^2 + b_3^2)y'^2 + (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)z'^2 = 1.$$

Двойникуя домены мартенсита по плоскостям, параллельным (110)<sub>A</sub> и усредняя, получаем эллипсоид вращения (1–8):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}[a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + b_1^2 + b_2^2 + b_3^2][x'^2 + y'^2] + \\ + (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)z'^2 = 1. \end{aligned}$$

Двойникование по плоскостям, параллельным (101)<sub>A</sub> и (011)<sub>A</sub>, дает еще 16 вариантов ОС, и последующее усреднение полностью устраняет деформацию формы:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}[a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + b_1^2 + b_2^2 + b_3^2][x'^2 + z'^2] + \\ + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2)y'^2 = 1, \end{aligned}$$

Суммируя последние три уравнения, получаем

$$[a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2] \times [x'^2 + y'^2 + z'^2] = 3,$$

или

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = 1,$$

т.к.  $a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 \approx 3$  в силу сохранения объема элементарной ячейки при мартенситном превращении.

Итак, усреднение по комплексу из 24 доменов, полученных путем двойниковогоания по пяти плоскостям, полностью компенсирует формоизменение.

Описанную выше процедуру можно проиллюстрировать с помощью стереографической проекции (рис. 1). Стереографическая проекция направления, параллельного оси «с» исходного эллипсоида (точка 1), занимает несимметричную позицию относительно направлений базисных векторов аустенита. Двойникование исходного варианта ОС по плоскости, параллельной  $(010)_A$ , переводит ось «с» двойника в положение (2). Тогда ось «с» усредненного эллипсоида — точка (1-2) на стереографической проекции — лежит в плоскости  $(010)$ . Последовательное двойникование имеющихся вариантов ОС по плоскостям, параллельным  $(010)_A$  и  $(110)_A$ , дает еще 6 доменов (3-8). Усредненный по 8 доменам эллипсоид деформации (точка 1-8) является эллипсоидом вращения. Двойникование вариантов (1-8) по плоскостям, параллельным  $(011)_A$  и  $(101)_A$ , дает оставшиеся варианты (9-16) и (17-24). И только усреднение по всем 24 вариантам ОС путем двойникования по пяти плоскостям полностью устраняет деформацию формы, что не требует дополнительных доказательств, т.к. задействованы в усреднении все кристаллографически эквивалентные варианты ОС.

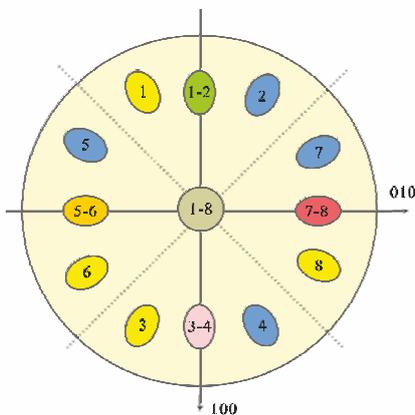


Рис. 1: Стереографическая проекция выхода оси «с» для исходного и двойникованных доменов

Для решетки мартенсита более высокой сингонии, как правило, число различных вариантов ОС (число доменов в СК) уменьшается. Например, если полуоси

исходного эллипсоида параллельны базисным векторам или лежат в плоскостях симметрии решетки аустенита, строение СК упрощается.

Обратимся к конкретным примерам.

## 2. МОРФОЛОГИЯ МАРТЕНСИТНЫХ КРИСТАЛЛОВ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ $\gamma$ -MN

Наименьшее число вариантов ОС имеет место при мартенситном превращении в сплавах на основе  $\gamma$ -Mn, в которых превращение со структурной точки зрения представляет собой тетрагональное (Mn-Cu) или орторомбическое (Mn-Ni) искажение ГЦК решетки аустенита. Матрицы тензоров деформации при превращениях имеют соответственно вид:

$$\hat{A}_{\text{тетр}} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}, \quad \hat{A}_{\text{орт}} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix},$$

где  $a, b, c$  — отношение соответствующих параметров решетки мартенсита к параметру решетки аустенита.

### 2.1. Орторомбический мартенсит

Действуя на матрицу  $\hat{A}_{\text{орт}}$  операторами симметрии, получим 24 матрицы ОС, которые соответствуют шести различным ориентациям решетки мартенсита:

1.  $\hat{A}_1 - \hat{A}_4$  ;
2.  $\hat{A}_5, \hat{A}_6, \hat{A}_{21}, \hat{A}_{24}$  ;
3.  $\hat{A}_7, \hat{A}_8, \hat{A}_{20}, \hat{A}_{23}$  ;
4.  $\hat{A}_9, \hat{A}_{10}, \hat{A}_{19}, \hat{A}_{22}$  ;
5.  $\hat{A}_{11}, \hat{A}_{14}, \hat{A}_{16}, \hat{A}_{18}$  ;
6.  $\hat{A}_{12}, \hat{A}_{13}, \hat{A}_{15}, \hat{A}_{17}$  .

Суммарная средняя деформация трёх доменов (по одному из 1-ой, 5-ой и 6-ой (или 2-ой, 3-ой, 4-ой) обращается в ноль, следовательно, из них можно попытаться построить СК. Однако, из таблицы умножения операторов [4] следует, что перейти от доменов группы 1 к доменам группы 5 или 6 путём двойникования невозможно — следовательно, невозможно и построение трёхдоменных СК для орторомбического мартенсита в сплавах Mn-Ni.

Попытаемся построить СК из 6 доменов. Для орторомбического мартенсита все базисные векторы имеют разную длину:

$$x' = ax; \quad y' = by; \quad z' = cz.$$

В результате превращения сфера единичного радиуса переходит в эллипсоид:

$$\frac{x^2}{1} + \frac{y^2}{1} + \frac{z^2}{1} = 1 \rightarrow \frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1;$$

Далее путем последовательного двойничкования по плоскостям  $(\bar{1}01)$ ,  $(1\bar{1}0)$ ,  $(01\bar{1})$ , пользуясь операторами симметрии  $\hat{S}_8$ ,  $\hat{S}_{10}$  и  $\hat{S}_6$ , находим уравнения эллипсоида для соответствующих доменов:

$$8 \Rightarrow \frac{x'^2}{c^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{a^2} = 1, \quad 10 \Rightarrow \frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{c^2} + \frac{z'^2}{b^2} = 1,$$

$$11 \Rightarrow \frac{x'^2}{c^2} + \frac{y'^2}{a^2} + \frac{z'^2}{b^2} = 1, \quad 12 \Rightarrow \frac{x'^2}{b^2} + \frac{y'^2}{c^2} + \frac{z'^2}{a^2} = 1,$$

$$6 \Rightarrow \frac{x'^2}{b^2} + \frac{y'^2}{a^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1.$$

Просуммировав 6 эллипсоидов деформации, получим:

$$\frac{2(x'^2 + y'^2 + z'^2)}{a^2} + \frac{2(x'^2 + y'^2 + z'^2)}{b^2} + \frac{2(x'^2 + y'^2 + z'^2)}{c^2} = 6,$$

что эквивалентно уравнению исходной сферы при выполнении условия:  $\frac{2}{a^2} + \frac{2}{b^2} + \frac{2}{c^2} = 6$ , вытекающего из сохранения объема при мартенситном превращении.

Таким образом, для мартенсита с орторомбической сингонией можно получить СК, состоящий из 6 доменов, так называемый «шестерик» (рис. 2,а).

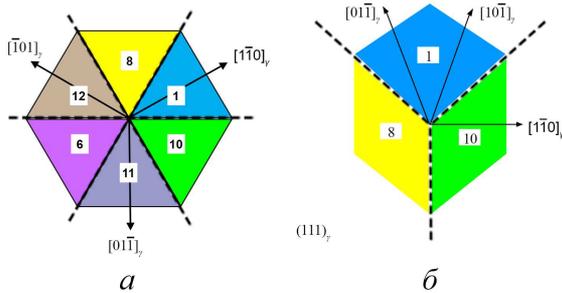


Рис. 2: Расположение доменов мартенсита в СК: а — «шестерик», б — «тройник»

### 2.2. Тетрагональный мартенсит

Аналогично запишем матрицы для тетрагонального мартенсита — 24 оператора описывают в этом случае три различных ориентации эллипсоида в пространстве — по 8 операторов на каждую:

1.  $\hat{A}_1 - \hat{A}_6, \hat{A}_{21}, \hat{A}_{24}$ ;
2.  $\hat{A}_7, \hat{A}_8, \hat{A}_{11}, \hat{A}_{14}, \hat{A}_{16}, \hat{A}_{18}, \hat{A}_{20}, \hat{A}_{23}$ ;
3.  $\hat{A}_9, \hat{A}_{10}, \hat{A}_{12}, \hat{A}_{13}, \hat{A}_{15}, \hat{A}_{17}, \hat{A}_{19}, \hat{A}_{22}$

Попытаемся построить СК из трех доменов.

Для тетрагонального мартенсита два базисных вектора имеют одну длину  $x' = ax, y' = ay, z' = cz$ . В результате превращения сфера единичного радиуса переходит в эллипсоид вращения :

$$\frac{x^2}{1} + \frac{y^2}{1} + \frac{z^2}{1} = 1 \rightarrow \frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{a^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1.$$

Далее путем последовательного двойничкования по плоскостям  $(10\bar{1})$  и  $(01\bar{1})$ , пользуясь операторами симметрии  $\hat{S}_8, \hat{S}_{10}$ , находим уравнения эллипсоида для соответствующих доменов:

$$8 \Rightarrow \frac{x'^2}{c^2} + \frac{y'^2}{a^2} + \frac{z'^2}{a^2} = 1,$$

$$10 \Rightarrow \frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{c^2} + \frac{z'^2}{a^2} = 1.$$

Просуммировав 3 эллипсоида деформации, получим:

$$\frac{2(x'^2 + y'^2 + z'^2)}{a^2} + \frac{(x'^2 + y'^2 + z'^2)}{c^2} = 3,$$

что эквивалентно уравнению исходной сферы при выполнении условия:  $\frac{2}{a^2} + \frac{1}{c^2} = 3$ , вытекающего из сохранения объема при мартенситном превращении. Таким образом, для тетрагонального мартенсита можно получить СК, состоящий из трех доменов, так называемый «тройник» (рис. 2,б).

Мы получили «тройник», конфигурация которого полностью компенсирует деформацию в СК. Все операторы симметрии, используемые для построения комплекса должны быть двойничковыми. «Синий» домен на рис. 2,б может быть представлен одним из первых шести полученных операторов симметрии, тогда как для «жёлтого» домена возможны операторы 7 и 8, а для «зелёного» — 9 и 10. Переход из «желтого» домена в «зеленый» реализуется оператором 5 или 6.

Однако, на практике СК типа «тройник» и «шестерик» в сплавах на основе  $\gamma$ -марганца не обнаруживаются; «тройники» наблюдались в сплавах на основе никелида титана при мартенситном превращении  $B2 \rightarrow B19'$  [5–7]

### 3. РОМБОЭДРИЧЕСКИЙ R-МАРТЕНСИТ В НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

Ромбоэдрическая структура R-мартенсита в никелиде титана может быть получена растяжением исходной кубической решетки аустенита вдоль пространственной диагонали куба (направления  $\langle 111 \rangle$ ). У куба четыре пространственных диагонали, тогда и эквивалентных вариантов ОС между решетками аустенита и мартенсита также будет четыре. Решетка R-мартенсита может двойничковаться по плоскостям типа  $\{100\}_M$ , практически параллельным (в силу малости ромбоэдрической дисторсии) плоскостям аустенита с теми же индексами  $\{100\}_A$ .

Проведем последовательное двойникование исходного мартенситного кристалла (вариант 1) по двум плоскостям, параллельным плоскостям симметрии аустенита (100) и (010). Стереографическая проекция конца оси «с» занимает позицию ( $R_1$ ), которая при двойниковании по плоскости (100)А переходит в позицию ( $R_2$ ), а после повторного двойникования этих двух доменов по плоскости (010) формируются еще два домена ( $R_3$ ) и ( $R_4$ ) – рис. 3.

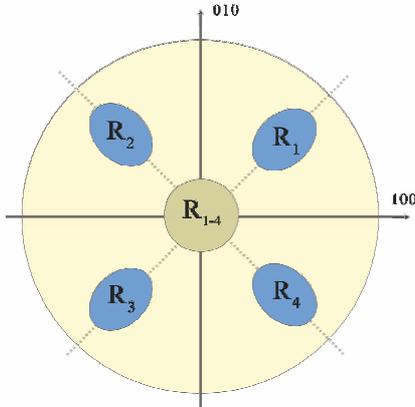


Рис. 3: Стереографическая проекция выхода оси «с» для доменов ромбоэдрического мартенсита

Для ромбоэдрической дисторсии характерны следующие соотношения:

$$l = \sqrt{3}a_A(1 + \varepsilon), \quad a = b = c, \\ \alpha = \beta = \gamma, \quad \varphi = 90^\circ - \gamma, \\ \hat{A}_R = \begin{pmatrix} (1 + \varepsilon) \cos \varphi & \sin \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & (1 + \varepsilon) \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & \sin \varphi & (1 + \varepsilon) \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

Ввиду малости ромбоэдрической дисторсии ( $\sim 1 - 2^\circ$ ,  $\sin \varphi < 0.04$ ) 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:

$$(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(x'y' + y'z' + z'x') = 1.$$

Применяя операторы симметрии  $\hat{S}_2$ ,  $\hat{S}_3$  и снова  $\hat{S}_2$  получим четыре уравнения эллипсоидов для соответствующих ориентаций мартенсита, с помощью которых можно сформировать СК:

$$(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(x'y' + y'z' + z'x') = 1;$$

$$(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(-x'y' - y'z' + z'x') = 1;$$

$$(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(-x'y' + y'z' - z'x') = 1;$$

$$(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) - 2(2\varphi - \varphi^2)(x'y' - y'z' - z'x') = 1.$$

Суммируя уравнения, получим уравнение сферы:

$$4(1 + 2\varphi^2)(x'^2 + y'^2 + z'^2) = 4.$$

Итак, средняя деформация формы по четырем доменам оказывается сферой, т.е. эти четыре домена образуют СК «четверик».

«Четверик», содержит 4 домена, отвечающих четырем вариантам ОС. Схема расположения доменов в СК – «четверик», приведена на рис. 4. (плоскости двойникования перпендикулярны плоскости рисунка). Но имеется ещё одна возможная плоскость двойникования – параллельная плоскости симметрии аустенита (001) (эта плоскость лежит в плоскости рис. 4,а). Двойникование «четверика» по этой плоскости разделяет комплекс на две части – нижнюю и верхнюю, но не добавляет новых вариантов ОС, а приводит лишь к повороту одной части относительно другой на  $180^\circ$  (рис. 4,б). Поскольку все возможные варианты ОС включены в комплекс, то он с неизбежностью будет самоаккомодационным.

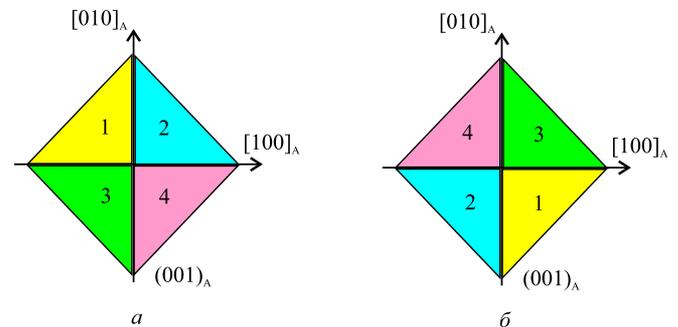


Рис. 4: Схема расположения доменов в СК «четверик»

СК типа «четверик» наблюдались экспериментально не только при формировании ромбоэдрического R-мартенсита в никелиде титана [8], но и при формировании моноклинного мартенсита 18R в сплавах Cu-Ni-Al [9].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ литературных данных по формированию СК в сплавах с ЭПФ показывает, что реализуются комплексы двух типов: «тройник» и «четверик». Определяющим фактором являются плоскости двойникования мартенситных кристаллов. При двой-

никовании по плоскостям, параллельным плоскостям аустенита типа  $\{100\}$  (возможно только в ромбоэдрической и моноклинной решетках), формируются комплексы типа «четверик»; при двойниковании по плоскостям, параллельным плоскостям аустенита типа  $\{110\}$  формируются комплексы типа «тройник».

- [1] Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Шаотао Чжэн *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон.* 2010. № 3, С. 27. (*Khundjua A.G., Brovkina E.A., Shaotao Zheng Mosc. Univ. Phys. Bull.* 2010. **65**, N 3. P. 184).
- [2] Хунджуа А.Г., Птицын А.Г., Бровкина Е.А., Шаотао Чжэн *ФММ*, 2012. **113**, № 11, С. 1093. (*Khundzhua A.G., Ptitsyn A.G., Brovkina E.A., Chzhen S. Physics of Metals and Metallography.* 2012. **113**, № 11, P. 1035).
- [3] Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Мельников М.М., Птицын А.Г. *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. 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. Сер. 3. Физ. Астрон.* 2018. № 1, С. 90 (*Khundjua A.G., Ptitsyn A.G., Brovkina E.A. Mosc. Univ. Phys. Bull.* 2018. **73**, N 1, P. 101).
- [5] Nishida M., Nishiura T., Kawano H., Inamura T. *Philos. Mag.* 2012. **92**. P. 2215.
- [6] Nishida M., Okunishi E., Nishiura T. et al. *Philos. Mag.* 2012. **92**. P. 2234.
- [7] Inamura T., Nishiura T., Kawano H. et al. *Philos. Mag.* 2012. **92**. P. 2247.
- [8] Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч. 1. Структура, фазовые превращения и свойства / Под ред. В.Г. Пушина. Екатеринбург, 2006.
- [9] Otsuka K., Wayman C.M. *Shape Memory Materials.* Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1998.

## Matrix description of martensitic crystals self-accommodation in alloys with shape memory effects

A. G. Khundjua<sup>1,a</sup>, E. A. Brovkina<sup>1,b</sup>, M.M. Melnikov<sup>1</sup>, A.G. Ptitsyn<sup>1</sup>, B.A. Volodin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Solid State Physics,

<sup>2</sup>Department of mathematics,

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

E-mail: <sup>a</sup>khundjua@mail.ru, <sup>b</sup>el-brov@yandex.ru

The paper presents a method of classification of self-accommodation complexes, combining group analysis with the minimization of the deformation of the form.

During the phase transformation of the martensitic type, the unit cells of the austenite and martensitic lattice are transformed into each other by homogeneous deformation, which, when applied to the sphere of radius equal to one, turns it into a three-axis ellipsoid (ellipsoid of deformation). Twinning of the martensite lattice changes the ellipsoid equation in accordance with the coordinate transformation. By summing the ellipsoid equation for several twins, one can get an idea of the strain averaged over domains and estimate the total form change of the self-accommodating complex.

PACS: 61.50.ks

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

*Received 25 June 2018.*

### 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. Мельников Максим Михайлович — вед. программист, тел.: (495) 939-30-26, e-mail: xenomorpha@list.ru.
4. Птицын Арсений Григорьевич — вед. электроник; тел.: (495) 939-30-26, e-mail: senyabird@yandex.ru.
5. Володин Борис Алексеевич — канд. физ.-мат. наук, доцент, тел.: (495) 939-39-47, e-mail: volodinba@mail.ru.