

## Сопряжение кристаллических структур в сплавах с мартенситными превращениями: возможность построения габитусной плоскости методами дифференциальной геометрии

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

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

<sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, кафедра математики  
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 01.07.2022; подписана в печать 13.07.2022)

Фазовое превращение аустенит–мартенсит можно рассматривать как однородную деформацию, в результате которой сфера единичного радиуса переходит в эллипсоид деформации. Предложена методика определения положения габитусной плоскости, основанная на анализе кривизны пространственной кривой пересечения сферы и эллипсоида деформации. Алгоритм включает нахождение численными методами координат точки минимальной кривизны, определение положения спрямляющей плоскости в указанной точке, и координат центра кривизны. Вектор «центр кривизны – точка минимальной кривизны» определяет нормаль к габитусной плоскости. Сравнение расчетных значений индексов инвариантной плоскости с экспериментальными показало удовлетворительное согласие для ряда сплавов. Возможно, что отклонение расчетных данных от экспериментальных для некоторых сплавов связано с необходимостью учета отклонения от ориентационного соотношения в процессе мартенситного превращения.

PACS: 61.50.ks

УДК: 538.9

Ключевые слова: эффект памяти формы, мартенситные превращения, габитусная плоскость, эллипсоид деформации.

### ВВЕДЕНИЕ

Мартенситные превращения являются одним из основных механизмов реализации полиморфизма. Закономерности перестройки при мартенситном превращении вытекают из строгих кристаллографических соотношений между кристаллическими решетками исходной и мартенситной фаз. Как правило, в результате мартенситного превращения из одной ориентировки исходной фазы (зерна, монокристалла) может возникнуть до 48 ориентировок мартенситной фазы. В то же время, при приложении внешних напряжений количество образующихся ориентировок мартенсита уменьшается, иногда до одной, при которой ее деформация соответствует приложенному напряжению. При этом из монокристалла аустенита иногда удается получить монокристалл мартенсита.

Данных о взаимной ориентировке решеток недостаточно для полного описания перестройки при мартенситном превращении. Для установления механизма превращения необходимы также сведения о межфазной границе (габитусной плоскости) кристаллов мартенсита и исходной фаз. Получение подобных экспериментальных данных весьма трудоемко и не всегда коррелируется в разных литературных источниках. Между тем реальные индексы габитусной плоскости необ-

ходимы, в том числе и как критерий проверки истинности различных теорий, затрагивающих механизмы фазовых превращений.

К настоящему времени есть попытки расчета габитусных плоскостей в литературе. Но эти работы сложно взять за основу вычислений для конкретного мартенситного фазового превращения, поскольку они либо общие и крайне громоздкие [1, 2] либо рассматривают отдельные примеры превращения [3].

Целью настоящей работы стало создание методики расчета (и соответствующей компьютерной программы) индексов плоскости габитуса методами дифференциальной геометрии.

### 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При превращении аустенит–мартенсит сфера единичного радиуса преобразуется в эллипсоид деформации, а эллипсоид обратной деформации преобразуется в сферу. При этом инвариантная плоскость определяется как плоскость, в которой векторы исходной решетки аустенита при превращении не меняют ни длину, ни направление. В общем случае подобные векторы расположены на конической поверхности, переход от которой к конкретной габитусной плоскости представляет собой достаточно сложную и в целом до сих пор нерешенную задачу.

Итак, сфера единичного радиуса  $x^2 + y^2 + z^2 = 1$

\* khundjua@mail.ru

†

‡ el-brov@yandex.ru

преобразуется в эллипсоид деформации

$$\frac{x'^2}{(1 + \varepsilon_1)^2} + \frac{y'^2}{(1 + \varepsilon_2)^2} + \frac{z'^2}{(1 + \varepsilon_3)^2} = 1$$

. В силу сохранения объема сфера и эллипсоид пересекаются, и пространственная кривая их пересечения задает конус инвариантных линий, расстояния вдоль которых неизменны.

В простейшем случае при равенстве нулю одного из значений  $\varepsilon_i$  конус инвариантных линий вырождается в плоскость, по которой происходит сопряжение решеток аустенита и мартенсита; эта плоскость и является плоскостью габитуса. Векторы, не меняющие свое положение и длину при преобразовании решетки в мартенситную, расположены на конической поверхности, что затрудняет поиск возможной габитусной плоскости.

В данной работе предлагается решать задачу поиска габитусной плоскости в общем случае конуса инвариантных линий, посредством анализа уравнения пространственной кривой пересечения сферы и эллипсоида деформации методами дифференциальной геометрии. Необходимо определить на данной кривой координаты точек с максимальным радиусом кривизны. Можно предположить, что плоскости, касательные к кривой в этих точках, наиболее приближены к искомым габитусным плоскостям.

## 2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

### 2.1 Вычисление кривизны кривой

Для определения уравнения пространственной кривой пересечения сферы радиуса  $d$  и эллипсоида деформации  $a, b, c$  найдем решение системы уравнений:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 + z^2 = d^2 \\ \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \end{cases}$$

Выражая из первого уравнения  $z^2$  и подставляя в уравнение эллипсоида получаем уравнение кривой пересечения сферы и эллипсоида:

$$x^2 \left\{ \frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2} \right\} + y^2 \left\{ \frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2} \right\} = 1 - \frac{d^2}{c^2}$$

Параметризуем решение, принимая :

$$x(t) = \sqrt{\frac{\left\{ \frac{1 - \frac{d^2}{c^2}}{\frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2}} \right\}}{\left\{ \frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2} \right\}}} \cos t, \quad y(t) = \sqrt{\frac{\left\{ \frac{1 - \frac{d^2}{c^2}}{\frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2}} \right\}}{\left\{ \frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2} \right\}}} \sin t,$$

тогда

$$z(t) = \sqrt{\frac{\left\{ \frac{d^2}{a^2} - 1 \right\}^2 \cos^2 t - \left\{ \frac{d^2}{b^2} - 1 \right\}^2 \sin^2 t}{\left\{ \frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2} \right\}^2 \cos^2 t - \left\{ \frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2} \right\}^2 \sin^2 t}}$$

Будем рассматривать кривую на участке  $t \in [0, 2\pi]$  и введем новые обозначения:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\left\{ \frac{1 - \frac{d^2}{c^2}}{\frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2}} \right\}}{\left\{ \frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2} \right\}}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{\left\{ \frac{1 - \frac{d^2}{c^2}}{\frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2}} \right\}}{\left\{ \frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2} \right\}}},$$

$$\gamma_1 = \frac{\left\{ \frac{d^2}{a^2} - 1 \right\}^2}{\left\{ \frac{1}{a^2} - \frac{1}{c^2} \right\}^2}, \quad \gamma_2 = \frac{\left\{ \frac{d^2}{b^2} - 1 \right\}^2}{\left\{ \frac{1}{b^2} - \frac{1}{c^2} \right\}^2},$$

тогда

$$x(t) = \alpha \cos t, \quad y(t) = \beta \sin t, \quad z(t) = \sqrt{\gamma_1 \cos^2 t - \gamma_2 \sin^2 t}.$$

Обозначим через  $\mathbf{r}(t)$  вектор, проведенный в точку кривой  $L$  с координатами  $x(t), y(t), z(t)$ , а вектор, касательный к кривой, через  $\mathbf{r}'(t)$ . При этом координатами  $\mathbf{r}'(t)$  служат первые производные исходных координат  $x(t), y(t), z(t)$ .

Далее потребуется понятие кривизны кривой [4, 5], которое поясняется на рис. 1. Пусть  $P$  — произвольная фиксированная точка регулярной кривой  $L$  без особых точек и  $M$  — точка этой кривой, отличная от  $P$ . Обозначим через  $\varphi$  угол между касательными в точках  $P$  и  $M$ , а через  $l$  — длину дуги  $PM$ . Кривизной  $K$  кривой  $L$  в точке  $P$  называется предел отношения  $\varphi/l$  при  $l \rightarrow 0$  (т. е. при  $M \rightarrow P$ ) [5].

Расчет согласно данному определению кривизны  $K$  для пространственной кривой пересечения эллипсоида и сферы приводит к следующему выражению

$$K = \frac{1}{|\mathbf{r}'|^3} \sqrt{\left\{ [x''y' - x'y'']^2 + [x''z' - x'z'']^2 + [y''z' - y'z'']^2 \right\}}, \quad \text{где } |\mathbf{r}'| = \sqrt{(x')^2 + (y')^2 + (z')^2},$$

$$x' = -\alpha \sin t, \quad y' = \beta \cos t, \quad z' = \frac{1}{2} \frac{(\gamma_2 - \gamma_1) \sin 2t}{\sqrt{\gamma_1 \cos^2 t + \gamma_2 \sin^2 t}},$$

$$x'' = -\alpha \cos t, \quad y'' = -\beta \sin t, \quad z'' = \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{2} \frac{2 \cos 2t (\gamma_1 \cos^2 t + \gamma_2 \sin^2 t) - \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{2} \sin^2 2t}{(\gamma_1 \cos^2 t + \gamma_2 \sin^2 t)^{3/2}}.$$

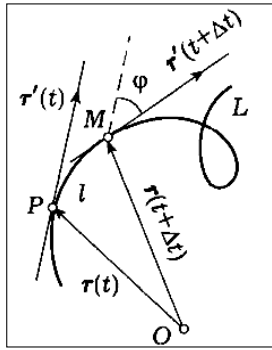


Рис. 1. К определению понятия кривизны кривой [5]

Решение уравнения  $K'(t) = 0$  численными методами позволяет найти значения параметра  $t$ , а следовательно, и координат  $\{x, y, z\}$  точек кривой с минимальным значением кривизны.

Далее нам потребуются понятия радиуса кривизны и центра кривизны. Радиусом кривизны кривой  $L$  называют величину, обратную значению кривизны:  $R = 1/K$ , а центром кривизны — точку на нормали к кривой  $L$ , которая отстоит от данной точки кривой в направлении вогнутости кривой на расстоянии  $R$  [5].

Окрестности точки с минимальной кривизной определяют наиболее «пологий» участок кривой, а «касательная» плоскость в этом случае должна быть близка к габитусной. Вектор, нормальный к данной плоскости, задает индексы искомой габитусной плоскости, которые, как правило, определяются в кристаллической системе аустенита. Поскольку аустенит в сплавах с эффектами памяти формы всегда является кубическим, то координаты вектора, проведенного из центра кривизны, непосредственно определяют индексы искомой плоскости (с учетом множителя, приводящего их к целым значениям индексов Миллера).

### 2.2. Определение координат центра кривизны

Следующим этапом решения поставленной задачи является вычисление координат центра кривизны. Для этого необходимо воспользоваться такими понятиями дифференциальной геометрии как бинормаль, главная нормаль, спрямляющая и соприкасающаяся плоскости [4].

Пусть  $PQ$  — касательная в точке  $P$  к кривой  $L$ . Через касательную  $PQ$  и точку  $M$  кривой проведем плоскость  $PQM$ . Плоскость  $\pi$ , к которой стремится плоскость  $PQM$  при  $M \rightarrow P$  называется соприкасающейся плоскостью к кривой  $L$  в точке  $P$  [5]. Справедливо

следующее утверждение: регулярная (т.е. по крайней мере дважды дифференцируемая функция) кривая  $L$  без особых точек имеет соприкасающуюся плоскость в каждой точке, в которой векторы  $\mathbf{r}'(t)$  и  $\mathbf{r}''(t)$  не коллинеарны. Нормаль, перпендикулярную касательной и соприкасающейся плоскости, называют бинормалью, а нормаль, перпендикулярную касательной, бинормали и, соответственно, лежащую в соприкасающейся плоскости — главной нормалью. Плоскость, в которой лежат касательная к кривой и бинормаль, определяют как спрямляющую плоскость (рис. 2).

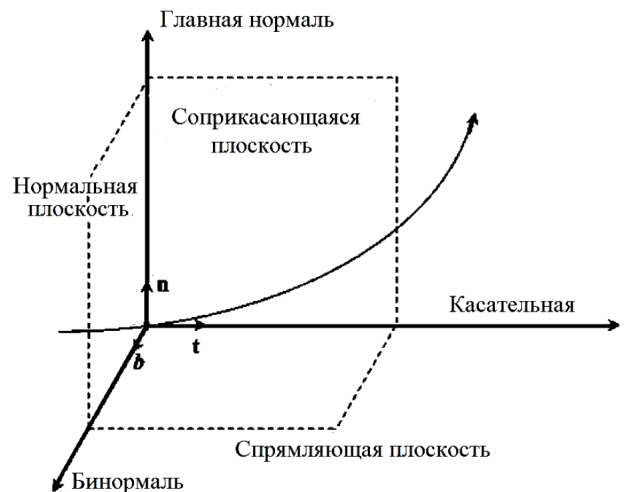


Рис. 2. Положение соприкасающейся и спрямляющей плоскостей, бинормали и главной нормали кривой

Таким образом, главная нормаль задает направление «центр кривизны–точка минимальной кривизны», а спрямляющая плоскость, перпендикулярная данному направлению, и есть искомая плоскость, которая должна быть максимально приближена к габитусной (поскольку проведена в точке минимальной кривизны кривой пересечения эллипсоида и сферы).

Если  $X, Y, Z$  — координаты вектора  $\mathbf{R}$  (координаты переменной точки соприкасающейся плоскости), а  $x(t), y(t), z(t)$  — координаты вектора  $\mathbf{r}(t)$ , то уравнение соприкасающейся плоскости запишется в виде:

$$\begin{vmatrix} X - x(t) & Y - y(t) & Z - z(t) \\ x'(t) & y'(t) & z'(t) \\ x''(t) & y''(t) & z''(t) \end{vmatrix} = 0.$$

Рассмотрим точку на кривой  $L$ , в которой кривизна  $K$  имеет наименьшее значение. Для нее уравнение соприкасающейся плоскости в точке  $\mathbf{r}(t_0)$  имеет вид:

$$(X - x(t_0)) \begin{vmatrix} y'(t_0) & z'(t_0) \\ y''(t_0) & z''(t_0) \end{vmatrix} - (Y - y(t_0)) \begin{vmatrix} x'(t_0) & z'(t_0) \\ x''(t_0) & z''(t_0) \end{vmatrix} + (Z - z(t_0)) \begin{vmatrix} x'(t_0) & y'(t_0) \\ x''(t_0) & y''(t_0) \end{vmatrix} = 0.$$

Тогда  $\mathbf{n}_B = \mathbf{i}A + \mathbf{j}B + \mathbf{k}C$  выражение для бинормали к кривой в этой точке, где

$$A = \begin{vmatrix} y'(t_0) & z'(t_0) \\ y''(t_0) & z''(t_0) \end{vmatrix}, \quad B = - \begin{vmatrix} z'(t_0) & x'(t_0) \\ z''(t_0) & x''(t_0) \end{vmatrix}, \\ C = \begin{vmatrix} x'(t_0) & y'(t_0) \\ x''(t_0) & y''(t_0) \end{vmatrix}.$$

Главная нормаль  $\mathbf{n}_\Gamma$  должна быть перпендикулярна к бинормали  $\mathbf{n}_B$  кривой  $L$  (т.к. лежит в плоскости, которая перпендикулярна бинормали) и вектору, касающемуся кривой в заданной точке.

Следовательно, выражение для главной нормали имеет вид:

$$\mathbf{n}_\Gamma = [\mathbf{r}'[\mathbf{r}', \mathbf{r}'']] = \mathbf{r}'(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') - \mathbf{r}''(\mathbf{r}', \mathbf{r}') = \\ = \mathbf{r}'(x' \cdot x'' + y' y'' + z' z'') + \mathbf{r}''(x'^2 + y'^2 + z'^2) = \mathbf{r}' \cdot D_1 - \mathbf{r}'' \cdot D_2,$$

где  $D_1 = x' \cdot x'' + y' y'' + z' z''$ ;  $D_2 = x'^2 + y'^2 + z'^2$ .

Можно записать  $\mathbf{n}_\Gamma = \mathbf{i}E_1 + \mathbf{j}E_2 + \mathbf{k}E_3$ , где  $E_1 = x' D_1 - x'' D_2$ ,  $E_2 = y' D_1 - y'' D_2$ ,  $E_3 = z' D_1 - z'' D_2$ .

Проведем через точку  $P$  плоскость, которая будет перпендикулярна главной нормали:

$$(X - x(t_0))E_1 + (Y - y(t_0))E_2 + (Z - z(t_0))E_3 = 0. \quad (1)$$

Пусть

$$E = |\mathbf{n}_\Gamma| = \sqrt{E_1^2 + E_2^2 + E_3^2} = \\ = \sqrt{(x' D_1 - x'' D_2)^2 + (y' D_1 - y'' D_2)^2 + (z' D_1 - z'' D_2)^2}.$$

Поделим уравнение (1) на  $E$ :

$$X \frac{E_1}{E} + Y \frac{E_2}{E} + Z \frac{E_3}{E} - (x(t_0) \frac{E_1}{E} + y(t_0) \frac{E_2}{E} + z(t_0) \frac{E_3}{E}) = 0$$

Преобразуем это уравнение в нормальное уравнение плоскости:

$$X \cdot \cos \alpha + Y \cdot \cos \beta + Z \cdot \cos \gamma - P = 0, \quad \text{где } P > 0. \quad (2)$$

Обозначим  $\tilde{P} = x(t_0) \frac{E_1}{E} + y(t_0) \frac{E_2}{E} + z(t_0) \frac{E_3}{E}$ .

Тогда,

если  $\text{sign } \tilde{P} > 0$ , то  $P = \tilde{P}$ ,  $\cos \alpha = \frac{E_1}{E}$ ,  $\cos \beta = \frac{E_2}{E}$ ,  $\cos \gamma = \frac{E_3}{E}$ ,

если  $\text{sign } \tilde{P} < 0$ , то  $P = -\tilde{P}$ ,  $\cos \alpha = -\frac{E_1}{E}$ ,

$\cos \beta = -\frac{E_2}{E}$ ,  $\cos \gamma = -\frac{E_3}{E}$ .

Расстояние от любой точки кривой  $L$  до плоскости (2) определяется по формуле:

$$\delta(t) = X(t) \cos \alpha + Y(t) \cos \beta + Z(t) \cos \gamma - P = \\ = [X(t) \frac{E_1}{E} + Y(t) \frac{E_2}{E} + Z(t) \frac{E_3}{E} - \tilde{P}] \cdot \text{sign } \tilde{P},$$

где  $\mathbf{N} = \mathbf{i} \cdot \cos \alpha + \mathbf{j} \cdot \cos \beta + \mathbf{k} \cdot \cos \gamma$  — единичный вектор главной нормали кривой  $L$  [5].

Воспользуемся следующей теоремой [6]: пусть вторая производная функции  $\delta(t)\delta''(t) = X''(t) \cos \alpha + Y''(t) \cos \beta + Z''(t) \cos \gamma$  непрерывна и положительна (отрицательна) в точке  $t_0$ . Тогда существует такая окрестность точки  $t_0$ , в которой  $\delta(t)$  имеет выпуклость, направленную в сторону (противоположную сторону) от начала координат.

Если выпуклость направлена в сторону начала координат ( $\delta''(t_0) > 0$ ), то это означает, что кривая  $L$  в окрестности точки  $\mathbf{r}(t_0)$  и начало координат находятся по разные стороны от соприкасающейся плоскости. Координаты центра кривизны в этом случае вычисляются по формулам:

$$x_{Ц} = x(t_0) + \cos \alpha \cdot \frac{1}{k} = x(t_0) + \frac{1}{k} \cdot \frac{E_1}{E} \cdot \text{sign}(\tilde{P}), \\ y_{Ц} = y(t_0) + \cos \beta \cdot \frac{1}{k} = y(t_0) + \frac{1}{k} \cdot \frac{E_2}{E} \cdot \text{sign}(\tilde{P}), \\ z_{Ц} = z(t_0) + \cos \alpha \cdot \frac{1}{k} = z(t_0) + \frac{1}{k} \cdot \frac{E_3}{E} \cdot \text{sign}(\tilde{P}).$$

Если выпуклость направлена в сторону от начала координат ( $\delta''(t_0) < 0$ ), то это означает, что кривая  $L$  в окрестности точки  $\mathbf{r}(t_0)$  и начало координат находятся по одну сторону от соприкасающейся плоскости. В этом случае координаты центра кривизны вычисляются по другим формулам:

$$x_{Ц} = x(t_0) - \cos \alpha \cdot \frac{1}{k} = x(t_0) - \frac{1}{k} \cdot \frac{E_1}{E} \cdot \text{sign}(\tilde{P}), \\ y_{Ц} = y(t_0) - \cos \beta \cdot \frac{1}{k} = y(t_0) - \frac{1}{k} \cdot \frac{E_2}{E} \cdot \text{sign}(\tilde{P}), \\ z_{Ц} = z(t_0) - \cos \alpha \cdot \frac{1}{k} = z(t_0) - \frac{1}{k} \cdot \frac{E_3}{E} \cdot \text{sign}(\tilde{P}).$$

### 3. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА

Таким образом, решение задачи по поиску индексов габитусной плоскости сводится к следующим этапам:

- вычисление положения и построение графика пространственной кривой пересечения сферы и эллипсоида деформации,
- расчет значения кривизны кривой и их производных,
- определение параметра  $t$  и координат точки с минимальным значением кривизны,
- вычисление радиуса кривизны и координаты центра,
- расчет координат вектора «центр кривизны–точка минимальной кривизны», что непосредственно (с точностью до общего множителя) и определяет индексы искомой плоскости.

По вышеизложенному алгоритму была создана компьютерная программа в среде Maple. В качестве начальных данных используются значения полуосей эллипсоида деформации и радиуса сферы, что соответствует параметрам орторомбического или тетрагонального мартенсита (эллипсоид) и кубического аустенита

Таблица. Сравнение результатов компьютерного расчета индексов инвариантной плоскости с экспериментальными данными для различных сплавов

Состав сплавов	Параметр эл. яч. аустенита, Å	Параметры эл. яч. мартенсита, Å			Расчетные значения индексов			Экспериментальные значения индексов	Литература
	$a_a$	$a_m$	$b_m$	$c_m$	$h$	$k$	$l$	$hkl$	
Mn-17%Ni	3.70	3.68	3.69	3.74	0	1.00	1.11	(110)	[7]
Mn-15%Ga	3.77	3.78	3.78	3.70	0	1.31	1.00	(110)	[8]
Cu-38.2%-39.8%Zn	6.11	4.46	2.67	19.33	0	1.00	2.13	(2 11 12) (155) (166)	[7, 9, 10]
Cu-14.5%Al-3%Ni	2.92	2.16	2.67	3.62	0	1.19	1.00	(155)	[11, 12]
Ag-47%Cd	4.18	4.91	3.11	4.78	0	1.00	1.85	(133)	[13, 14]
Au-20.7%Cu-30.9%Zn	4.88	4.60	5.65	4.48	0	1.00	1.17	(011)	[15]
Cu-24.5%Sn	4.78	4.58	5.33	4.36	0	1.00	1.08	(144)	[15, 16]
Cu-20.4%Zn-17.5%Ga	9.95	4.40	38.2	5.86	0	1.41	1.00	(110) (551)	[17]

(сфера). Проводится 3D визуализация взаимного расположения сферы и эллипсоида с заданными параметрами и общим центром в начале координат. Результаты расчетов выводятся в виде графиков кривой пересечения эллипсоида и сферы и зависимости кривизны от параметра  $t$ , координат точек минимальной кривизны и центров кривизны, которые на соответствующем графике соединяются отрезками (рис. 3).

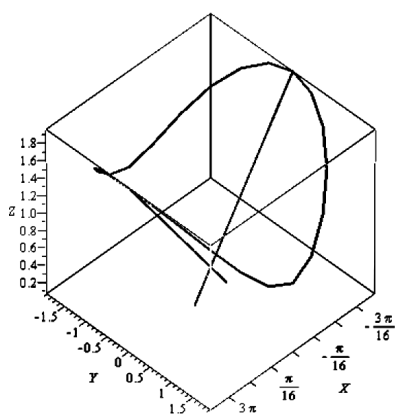


Рис. 3. Пространственная кривая пересечения эллипсоида деформаций и сферы, полученная с помощью компьютерной программы. Отрезками соединены точки минимальной кривизны и соответствующие им центры кривизны

Для проверки правильности наших предположений и корректности работы программы был рассмотрен случай, для которого помимо численного существует и аналитическое решение. Данный вариант предполагает равенство нулю одной из главных деформаций

в уравнении эллипсоида  $\frac{x_1^2}{\eta_1^2} + \frac{x_2^2}{\eta_2^2} + \frac{x_3^2}{\eta_3^2} = 1$ . Если одна из главных деформаций равна нулю ( $\eta_1 = 1$ ), а две другие имеют разные знаки ( $\eta_2 > 1$ ,  $\eta_3 < 1$ ) (что необходимо для сохранения объема элементарной ячейки в результате мартенситного превращения), то уравнение кривой пересечения эллипсоида в виде и сферы единичного радиуса  $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$  будет иметь вид  $(1 - \frac{1}{\eta_2^2})x_2^2 + (1 - \frac{1}{\eta_3^2})x_3^2 = 0$ .

Соответствующая инвариантная плоскость определяется уравнением  $\sqrt{(\eta_2^2 - 1)}x_2 = \pm \sqrt{(1 - \eta_3^2)}x_3$ .

В качестве примера были взяты модельные аустенит с параметром  $a=3.00\text{Å}$  и мартенсит с орторомбической решеткой с параметрами  $a=3.00\text{Å}$ ,  $b=2.94\text{Å}$ ,  $c=3.06\text{Å}$ . В результате аналитического расчета получены индексы (0, 1.00, 1.03), компьютерного моделирования — индексы (0, 1.00, 1.01), что позволяет сделать вывод о корректной работе программы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Был проведен подробный анализ литературы, в которой представлены экспериментальные данные, относящиеся к параметрам кристаллических решеток аустенита и мартенсита, а также индексам габитузной плоскости. Для расчетов были отобраны сплавы с орторомбической и тетрагональной решетками мартенсита, поскольку в настоящем виде программа может учесть лишь ортогональную дисторсию ячейки мартенсита. В таблице представлены экспериментальные и расчетные данные для сплавов различного состава. В первых столбцах указаны параметры фаз, которые и служили исходными данными для компьютерных вычислений.

Сравнение расчетных значений индексов инвариантной плоскости с экспериментальными показало удовлетворительное согласие лишь для части сплавов (строки 1, 4, 6, 7).

Возможно, что отклонение расчетных данных от экспериментальных для некоторых сплавов связано с необходимостью учета случая разворота решеток в процессе мартенситного превращения. В связи с этим предполагается в дальнейшем дополнить программу

блоком, позволяющим учитывать ориентационное соотношение решеток аустенит–мартенсит (т.е. разворот мартенситного кристалла как целого) и обратный эллипсоид деформации. Математически это выражается в возможности введения преобразования поворота эллипсоида вокруг заданной оси и дальнейшее приведение уравнения эллипсоида к каноническому виду. Данные изменения позволят рассчитывать габитусные плоскости и для мартенситных фаз с неортогональной дисторсией.

- 
- [1] *Wechsler M.S., Lieberman D.S., Read T.A.* // Trans. AIME. 1953. **197**. P. 1503.  
[2] *Bowles J.S., Machenzie J.K.* // Acta Metall. 1954. **2**. P. 129.  
[3] *Верещагин В.П., Горелов Е.Н.* Геометрическое обоснование моделей однородного деформационного преобразования кристаллических решеток, допускающего инвариантную плоскость. Екатеринбург, 2003.  
[4] *Фиников С.П.* Курс дифференциальной геометрии. Серия: Классический учебник МГУ. М., 2020.  
[5] *Ильин В.А., Позняк Э.Г.* Основы математического анализа. Ч 2. М., 2002.  
[6] *Ильин В.А., Позняк Э.Г.* Основы математического анализа. Ч 1. М., 2002.  
[7] *Лободюк В.А., Эстрин Э.И.* Мартенситные превращения. М., 2009.  
[8] *Винтайкин Е.З., Удовенко В.А., Литвин Д.Ф. и др.* // Изв. ВУЗов. Физика. 1985. № 5. С. 104.  
[9] *Pops H., Massalski T.B.* // Trans. AIME. 1964. **230**, N 12. P. 1662.  
[10] *Cornelis I., Wayman C.M.* // Acta met. 1974. **22**, N 3. P. 301.  
[11] *Hull D., Garwood R.D.* // J. Inst. Met. 1957/58. **86**, N 4. P. 485.  
[12] *Курдюмов Г.В., Лободюк В.А., Хандрос Л.Г.* // Кристаллография. 1961. **6**, N 2. С. 210.  
[13] *Duggin M.J.* // Acta met. 1964. **12**, N 5. P. 529.  
[14] *Murakami Y., Asano H., Nakanishi N., Kachi Y.* // J. Appl. Phys. 1967. **6**, N 3. P. 1265.  
[15] *Nishiyama Z., Shimizu K., Morikawa H.* // Trans. JIM. 1967. **8**, N 2. P. 145.  
[16] *Soejima T., Hagiwara H., Nakanishi N.* // Trans. JIM. 1964. **5**, N 4. P. 273.  
[17] *Saburi T., Nenno S., Kato S., Takata K.* // J. Less. Common Metals. 1976. 50, N 2. P. 223.

---

## Conjugation of crystal structures in alloys with martensitic transformations: the possibility of constructing a habitus plane by methods of differential geometry

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

<sup>1</sup>Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

<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 phase transformation austenite-martensite can be considered as a homogeneous deformation, as a result of which a sphere of unit radius turns into an ellipsoid of deformation. A method for determining the position of the habitus plane based on the analysis of the curvature of the spatial curve of the intersection of the sphere and the deformation ellipsoid is proposed. The algorithm includes finding the coordinates of the point of minimum curvature by numerical methods, determining the position of the straightening plane at the specified point, and the coordinates of the center of curvature. The vector "center of curvature – the point of minimum curvature" defines the normal to the habitus plane. Comparison of the calculated values of the invariant plane indices with the experimental ones showed satisfactory agreement for a number of alloys. It is possible that the deviation of the calculated data from the experimental data for some alloys is due to the need to take into account the deviation from the orientation relationship in the process of martensite transformation. PACS: 61.50.ks

*Keywords:* shape memory effect, martensite transformations, habitus plane, ellipsoid of deformation.

*Received 01 July 2022.*

### Сведения об авторах

- Хунджуа Андрей Георгиевич — доктор физ.-мат наук, профессор; тел.: (495) 939-23-87, e-mail: khundjua@mail.ru.
- Володин Борис Алексеевич — канд. физ.-мат. наук, доцент, тел.: (495) 939-39-47, e-mail: volodinba@mail.ru.
- Бровкина Елена Анатольевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-23-87, e-mail: el-brov@yandex.ru.