

СТРУКТУРА,
ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 669.24'74'871:548.73

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И МЕХАНИЗМ
МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$

© 2019 г. В. М. Гундырев^{а, *}, Ю. В. Калетина^{а, **}

^аИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

*e-mail: gundyrev@imp.uran.ru

**e-mail: kaletina@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 30.04.2019 г.

После доработки 15.05.2019 г.

Принята к публикации 23.05.2019 г.

Определены параметры элементарной ячейки матрицы модулированного кристалла мартенсита сплава $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$. На основе феноменологической кристаллографической теории мартенситных превращений рассчитаны ориентационные соотношения между кристаллическими решетками матрицы мартенсита и исходной фазой, а также определены величина и направление макроскопического сдвига, плоскость габитуса, угол и ось поворота пластины мартенсита. Установлен механизм деформации при мартенситном превращении.

Ключевые слова: мартенситное превращение, матрица мартенсита, феноменологическая теория мартенситных превращений, деформация решетки, деформация формы, средняя структура модулированного кристалла

DOI: 10.1134/S0015323019110044

ВВЕДЕНИЕ

Исследования ферромагнитных сплавов привлекают внимание исследователей в связи с особенностями фазовых превращений, формирования структуры и появлением новых подходов в изучении таких материалов. Сплавы на основе системы Ni–Mn–In можно выделить в отдельную группу сплавов Гейслера благодаря последовательности структурно-фазовых превращений [1–6] и потенциальному использованию в различных технологических устройствах. В последние годы большое внимание уделяется исследованию сплавов Гейслера нестехиометрических составов Ni–Mn–In, в которых реализуются управляемые магнитным полем эффекты памяти формы [4, 7]. Изучение структурных и кристаллографических особенностей мартенситных превращений представляет интерес для выяснения влияния структурного и магнитного упорядочения на функциональные характеристики сплавов Гейслера Ni–Mn–In.

Феноменологическая теория мартенситных превращений (ФТМП) описывает образование кристалла мартенсита производением трех матриц: деформации Бейна (*B*), деформации (двойникованием или скольжением) при инвариантной решетке (*P*) и поворота (*R*) [8, 9]. Деформация Бейна, являющаяся чистой деформацией, преобразует кристаллическую решетку аустенита в решетку мартенсита и поэтому называется де-

формацией решетки. Деформация при инвариантной решетке необходима для получения габитусной плоскости кристалла мартенсита. Матрица поворота мартенситной пластины описывает вращение, происходящее главным образом при деформации решетки аустенита в решетку мартенсита. Если брать реальный механизм деформации решетки исходной фазы до параметров решетки мартенсита, который происходит в основном сдвиговым путем, то в этом случае матрица *R* будет описывать лишь небольшой поворот, имеющий место при деформации мартенсита при инвариантной решетке. Это было показано в работах [10–13].

Для расчетов кристаллографических характеристик с помощью ФТМП необходимо знать параметры элементарных ячеек аустенита и матрицы мартенсита. На рис. 1а представлено схематичное изображение мартенситной пластины железоникелевого сплава с двойникованным мартенситом. На рис. 1б изображена элементарная ячейка 6*M*-модулированной структуры мартенсита сплава $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$ [14] (как видим, шестислойная структура состоит из четырех слоев матрицы и двух слоев, находящихся в двойниковом положении). Если мы сделаем схематичное изображение мартенситной пластины этого сплава, то получим точно такое же изображение, как на рис. 1а. Однако при этом толщина участков матрицы и двой-

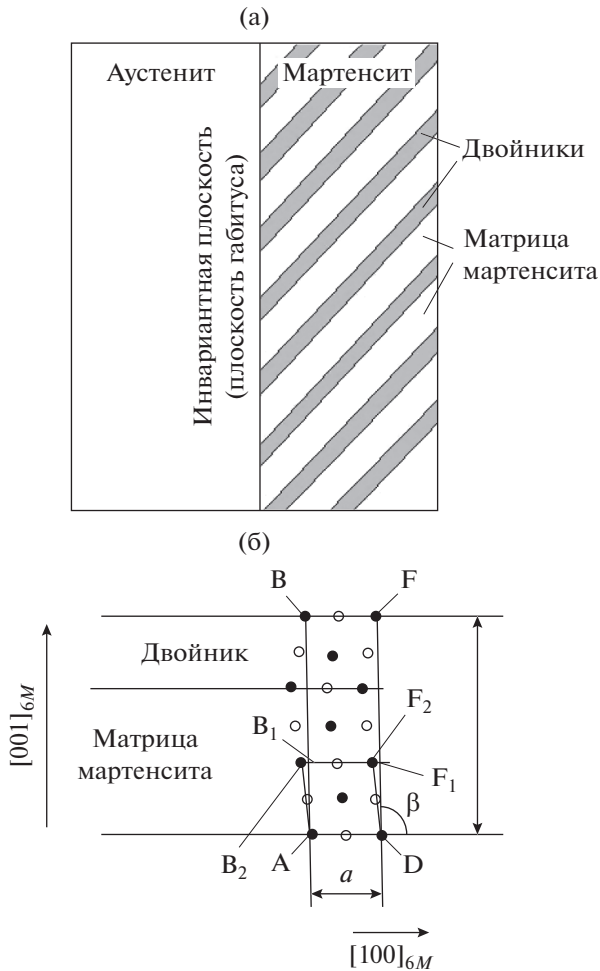


Рис. 1. Схематичное изображение мартенситной пластины Fe–Ni-сплава (а) и элементарная ячейка решетки мартенсита 6M-сплава $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$ (б). AB_2F_2D – элементарная ячейка матрицы мартенсита, AB_1F_1D – элементарная ячейка средней структуры мартенсита (базисная ячейка), (B_1 – точка пересечения линий AB и B_2F_2 , F_1 – точка пересечения линии DF и прямой B_2F_2), $ABFD$ – элементарная ячейка модулированной структуры мартенсита 6M.

ников в двойникованном мартенсите железо-никелевого сплава примерно в 100–1000 раз больше, чем в модулированном. В двойникованном мартенсите двойники и участки матрицы мартенсита, расположенные между двойниками, рассеивают рентгеновские лучи независимо друг от друга, и экспериментально определяемая при рентгеноструктурном анализе элементарная решетка мартенсита является элементарной ячейкой матрицы мартенсита. В случае модулированного мартенсита область когерентного рассеивания (ОКР) захватывает большое количество чередующихся участков матрицы и двойников. Дифракционная карти-

на от такой ОКР соответствует кристаллической решетке с новой элементарной ячейкой (элементарная ячейка модулированной структуры мартенсита), включающей как минимум один участок матрицы и один двойник. Если исключить из рассмотрения сателлиты на рентгенограммах, то получим дифракционную картину, соответствующую средней структуре. Элементарная ячейка средней структуры (базисная ячейка) существенно отличается от элементарной ячейки матрицы мартенсита, как это видно на рис. 1б. По известным параметрам элементарной ячейки модулированной структуры мартенсита, либо по параметрам базисной ячейки, можно найти кристаллографические характеристики мартенсита, используя ФТМП, как это сделано в работе [15] для модулированного сплава 63.0 ат. % Ni–Al, но нельзя определить механизм деформации решетки при мартенситном превращении. Для определения данного механизма с помощью ФТМП необходимо знать параметры элементарной ячейки матрицы мартенсита, которые напрямую из рентгеноструктурных измерений получить нельзя, но можно рассчитать по известным параметрам элементарной ячейки модулированной структуры.

Целью данной работы является определение элементарной ячейки матрицы мартенсита и механизма деформации решетки при мартенситном превращении в сплаве $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$, а также определение кристаллографических характеристик мартенсита с помощью ФТМП.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ МАТРИЦЫ МАРТЕНСИТА

В работе [14] нами были определены параметры элементарной ячейки модулированной моноклинной структуры сплава $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{42}\text{In}_{11}$: $a = 0.4406$ нм, $b = 0.5601$ нм, $c = 1.3024$ нм и $\beta = 93.51^\circ$. Как видно из рис. 1б, ячейка содержит 6 слоев, при этом четыре слоя атомов принадлежат матрице, а два слоя принадлежат двойнику. На рис. 2 приведен вспомогательный чертеж для нахождения параметров ячейки матрицы мартенсита. Для этого воспользуемся прямоугольными треугольниками OLK и OAB . Из треугольника OLK находим $OK = c \cos \delta$, $LK = c \sin \delta$. Учитывая, что $AB = LK$ и $OB = OK/3$ находим c_1 и δ_1 : $c_1 = c \sqrt{\sin^2 \delta + (\cos^2 \delta)/9}$ и $\delta_1 = \arctg(3 \operatorname{tg} \delta)$. В результате расчетов получаем: $a_1 = a = 0.44053$ нм, $b_1 = b = 0.56013$ нм, $c_1 = 0.44064$ нм, $\beta_1 = (90^\circ + \delta_1) = 100.43^\circ$. Таким образом находим параметры моноклинной ячейки матрицы мартенсита: $a_1 = c_1 = 0.4406 \pm 0.0001$ нм, $b_1 = 0.5601 \pm 0.0001$ нм, $\beta_1 = 100.43^\circ \pm 0.01^\circ$. Как видим, $a_1 = c_1$. Это указывает на то, что решетка матрицы

мартенсита является орторомбической. Поэтому перейдем к орторомбическим осям $\bar{a}_2, \bar{b}_2, \bar{c}_2$, как это показано на рис. 2, и находим элементарную ячейку матрицы мартенсита: $a_2 = 0.5601 \pm 0.0001$ нм, $b_2 = 0.5639 \pm 0.0001$ нм, $c_2 = 0.6771 \pm 0.0001$ нм. Ожидалось, что элементарная ячейка матрицы мартенсита будет более симметричная, чем элементарная ячейка модулированной структуры мартенсита, так как последняя включает в себя структурный дефект в виде двойника. Действительно, получили более симметричную (орторомбическую) ячейку, близкую к тетрагональной ячейке.

РАСЧЕТ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАРТЕНСИТА С ПОМОЩЬЮ ФТМП

Для расчетов берем параметр решетки исходной кубической фазы $a_0 = 0.5998$ нм, параметры решетки конечной орторомбической фазы: $a = 0.5601$ нм, $b = 0.5639$ нм, $c = 0.6771$ нм. Чистую деформацию кубической решетки для получения данной орторомбической решетки выберем из эквивалентных вариантов следующим образом:

$$B_0 = \begin{pmatrix} 0.5601 & 0 & 0 \\ 0.5998 & & \\ 0 & 0.5639 & 0 \\ 0 & 0 & 0.6771 \\ & & 0.5998 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Такая чистая деформация решетки может быть получена сдвигом по плоскости (112) в направлении $[\bar{1}\bar{1}1]$ на величину 0.18503 и последующим растяжением вдоль направления $[\bar{1}\bar{1}1]$ на 0.5%, сжатия вдоль $[1\bar{1}0]$ на 6.4% и растяжения вдоль $[112]$ на 5.3%. Матрица, описывающая сдвиг Γ в этом случае, имеет вид:

$$\Gamma = T^{-1} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0.18503 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times T, \quad (2)$$

где $T = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}$ – матрица поворота координатных осей, T^{-1} – обратная матрица.

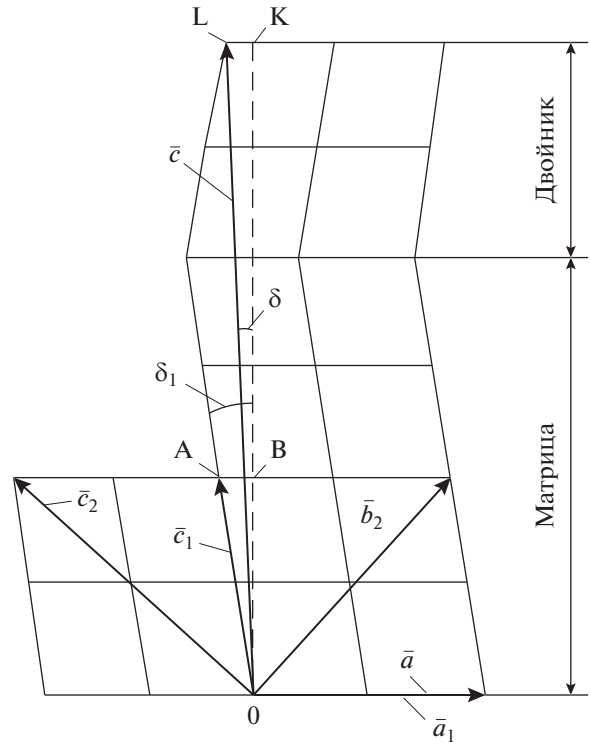


Рис. 2. Схема для нахождения параметров решетки матрицы мартенсита. Схема дана в плоскости перпендикулярной единичному вектору \bar{b} ; $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$, $\beta = (90^\circ + \delta)$ – параметры элементарной ячейки модулированной структуры мартенсита; $\bar{a}_1, \bar{b}_1, \bar{c}_1$, $\beta_1 = (90^\circ + \delta_1)$ – параметры моноклинной ячейки матрицы мартенсита; $\bar{a}_2, \bar{b}_2, \bar{c}_2$ – параметры орторомбической ячейки матрицы мартенсита. $\bar{b} = \bar{b}_1 = -\bar{a}_2$, $\bar{a} = \bar{a}_1$.

Матрица дополнительной деформации B_1 имеет вид:

$$B_1 = T^{-1} \times \begin{pmatrix} 1.00505 & 0 & 0 \\ 0 & 0.93700 & 0 \\ 0 & 0 & 1.05247 \end{pmatrix} \times T.$$

Отсюда можно вычислить деформацию решетки:

$$B = B_2 B_1 \Gamma. \quad (3)$$

Здесь $B_2 = \begin{pmatrix} 0.99668 & 0 & -0.00021 \\ 0 & 1.00333 & 0.00021 \\ -0.00021 & 0.00021 & 1 \end{pmatrix}$ – поправка, связанная с орторомбическими искажениями решетки.

Для получения габитусной плоскости вводим в расчеты деформацию P при инвариантной решетке путем двойникования мартенсита, как это делается в ФТМП. Выбираем из систем двойникования такую, при которой получается минимальная дефор-

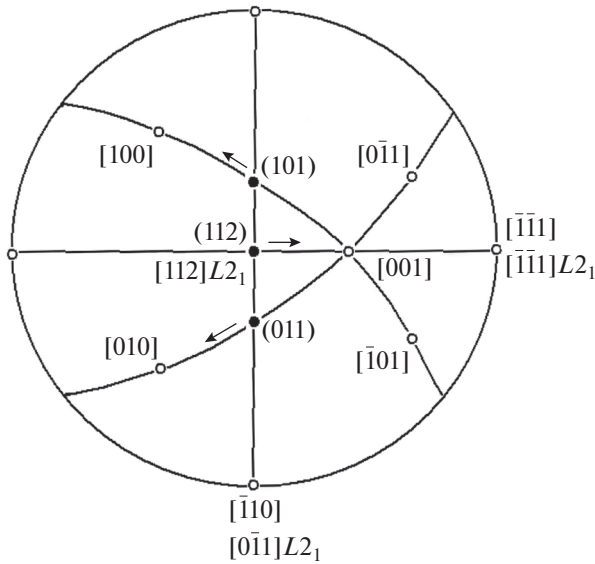


Рис. 3. Стереографическая проекция систем двойникования в орторомбической решетке матрицы мартенсита для варианта сдвига, при котором выполняются ориентационные соотношения $[111]L_{2_1} \parallel [111]R$, $(\bar{1}\bar{1}2)L_{2_1} \parallel (\bar{1}\bar{1}2)R$.

мация формы (P_1) пластины мартенсита. На рис. 3 видно, что для выбранной деформации решетки при мартенситном превращении путем сдвига по плоскости $(112)L_{2_1}$ в направлении $[\bar{1}\bar{1}1]L_{2_1}$ имеется две равноценные системы двойникования: $(101)[10\bar{1}]$ и $(011)[01\bar{1}]$. Таким образом, для каждого из 12 вариантов деформации решетки имеем два варианта деформации мартенсита при инвариантной решетке, в итоге получается 24 ориентировки мартенсита, представленные в табл. 1.

Кристаллографический анализ проводится относительно ориентировки № 5, так как для этой ориентировки расчеты получаются более простые. Матрица деформации мартенсита P имеет вид:

$$P = S^{-1} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & g \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times S. \quad (4)$$

Выбираем двойникование по системе $(011)[01\bar{1}]$, в

этом случае $S = \begin{pmatrix} 0.04761 & 0.68754 & -0.72458 \\ -0.99797 & 0.00203 & -0.06365 \\ -0.04229 & 0.72614 & 0.68624 \end{pmatrix}$ –

матрица поворота координатных осей от исходных координат решетки аустенита к ортогональным координатам, выбранных в орторомбической решетке мартенсита так, что ось X совпадает с направлением сдвига $[01\bar{1}]R$, ось Z совпадает с нормалью к плоскости $(011)R$, а ось Y им перпендикулярна.

Как сказано выше, рентгеноструктурные исследования позволяют напрямую найти в модулированном кристалле мартенсита базисную ячейку. Из рис. 2 видно, что базисная ячейка не совпадает с элементарной ячейкой матрицы мартенсита. Из-за этого получается два ориентационных соотношения относительно исходной фазы: одно для решетки матрицы мартенсита, второе для решетки средней структуры модулированного кристалла мартенсита. Первая матрица (θ_1) для определения индексов направления $[uvw]$ в L_{2_1} -решетке, параллельного направлению $[UVW]$ в орторомбической решетке матрицы мартенсита вычисляется следующим образом: $\theta_1 = RB$. Вторая матрица (θ_2) для определения индексов направления $[uvw]$ в L_{2_1} -решетке, параллельного направлению $[UVW]$ в усредненной решетке мартенсита равна: $\theta_2 = RDB$. Где

$$D = S^{-1} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & g_1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times S. \quad \text{Значение } g_1 \text{ находим из}$$

рис. 2:

$$g_1 = \text{tg}(\delta_1) - \text{tg}(\delta) = 0.12268. \quad (5)$$

Матрица D является деформацией мартенсита при инвариантной решетке в пределах ОКР. Дальнейшие расчеты кристаллографических характеристик мартенсита сделаны в полном соответствии с ФТМП [1, 2].

Результаты по трем вариантам расчетов кристаллографических характеристик мартенситного превращения представлены в табл. 2.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

ФТМП позволяет найти различные кристаллографические параметры превращения, как, например, плоскость габитуса, ориентационные соотношения, деформацию формы и др. Для этого достаточно знать параметры элементарной ячейки исходной фазы, параметры ячейки конечной фазы и механизм деформации мартенсита при инвариантной решетке. В первом и втором вариантах расчета в качестве ячейки конечной фазы выбрана элементарная ячейка матрицы мартенсита. В третьем варианте такой ячейкой является элементарная ячейка модулированной структуры мартенсита, которая помимо матрицы содержит еще двойник. Такой выбор ячейки конечной фазы использовался в работе [15] для кристаллографического анализа мартенситного превращения $B2 \rightarrow 7R$ в сплаве Ni–37.0 ат. % Al.

В первом варианте однородная деформация решетки описывается уравнением (3). Во втором варианте в качестве механизма однородной деформации решетки используется деформация Бейна, содержащая только чистую деформацию решетки без элементов вращения. Это позволяет получить кристаллографические характеристики

Таблица 1. Ориентировки и соответствующие им системы сдвига в исходной фазе и системы двойникования в мартенсите

| № ориентировки | Исходная фаза | | Мартенсит | |
|----------------|-------------------------|-------------------------|-------------------|-------------------|
| | (hkl) $L2_1$ | $[uvw]$ $L2_1$ | (HKL) R | $[UVW]$ R |
| 1 | 211 | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | 101 | $\bar{1}01$ |
| 2 | $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}01$ | 101 |
| 3 | $1\bar{2}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ |
| 4 | $\bar{1}\bar{2}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ |
| 5 | 112 | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | 011 | $0\bar{1}\bar{1}$ |
| 6 | $\bar{1}\bar{2}\bar{1}$ | 111 | $\bar{1}10$ | $\bar{1}\bar{1}0$ |
| 7 | $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ | 011 |
| 8 | $\bar{1}\bar{2}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}0$ | $\bar{1}10$ |
| 9 | 121 | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | 110 | $\bar{1}\bar{1}0$ |
| 10 | $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ | 111 | $0\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ |
| 11 | $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ |
| 12 | $1\bar{2}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}0$ | 110 |
| 13 | $2\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | 110 | $\bar{1}\bar{1}0$ |
| 14 | $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}01$ | $\bar{1}0\bar{1}$ |
| 15 | $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}10$ | 110 |
| 16 | $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ | 111 | $\bar{1}0\bar{1}$ | $\bar{1}01$ |
| 17 | $2\bar{1}\bar{1}$ | 111 | $\bar{1}\bar{1}0$ | $\bar{1}\bar{1}0$ |
| 18 | $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | 101 | $10\bar{1}$ |
| 19 | $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}0$ | $\bar{1}\bar{1}0$ |
| 20 | $1\bar{1}\bar{2}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $10\bar{1}$ | 101 |
| 21 | $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $\bar{1}0\bar{1}$ | $10\bar{1}$ |
| 22 | $2\bar{1}\bar{1}$ | 111 | $10\bar{1}$ | $\bar{1}0\bar{1}$ |
| 23 | $\bar{1}\bar{2}\bar{1}$ | 111 | 011 | $0\bar{1}\bar{1}$ |
| 24 | $\bar{1}\bar{2}\bar{1}$ | $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ | $0\bar{1}\bar{1}$ | 011 |

мартенситного превращения, однако не позволяет найти реальный механизм мартенситного превращения в отличие от первого варианта. При выборе реального механизма мартенситного превращения угол ϕ должен получаться небольшим. В первом варианте угол ϕ равен всего 0.36 градусов. Во втором и третьем вариантах получаем нереально большие значения угла ϕ . Следовательно, только в первом варианте заложен реальный механизм деформации решетки. Этот механизм, как это видно из расчетов, состоит из сдвига по плоскости (112) в направлении $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ на 0.185 и дополнительной чистой деформации, заключаю-

щейся в растяжении на 5.3% в направлении нормали к плоскости сдвига, растяжении на 0.5% в направлении сдвига и сжатии на 6.4% в третьем направлении $[0\bar{1}\bar{1}]$, перпендикулярном первым двум. Как известно, системы сдвига семейства $\{112\}\langle\bar{1}\bar{1}\bar{1}\rangle$ типичны для ОЦК-кристаллов. Всего имеем 12 таких эквивалентных систем сдвига.

Принимая во внимание уравнение (5), находим для первого варианта $g_2 = g - g_1 = 0.00374$. Так как g_1 является деформацией сдвига при инвариантной решетке матрицы мартенсита в пределах ОКР, то g_2 получается величиной сдвига ОКР от-

Таблица 2. Расчетные кристаллографические параметры мартенситного превращения

| Параметры | Сдвиговый механизм ¹ | Механизм Бейна ¹ | Механизм Бейна ² |
|-----------------------|---|--|---|
| <i>B</i> | $\begin{pmatrix} 0.93197 & -0.00191 & -0.07186 \\ -0.0019 & 0.93821 & -0.07185 \\ 0.05944 & 0.05984 & 1.12431 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0.93386 & 0 & 0 \\ 0 & 0.94011 & 0 \\ 0 & 0 & 1.12889 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0.93386 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99889 & -0.03991 \\ 0 & 0.02276 & 1.06156 \end{pmatrix}$ |
| <i>P</i> | $\begin{pmatrix} 0.99975 & 0.00437 & 0.00413 \\ -0.00366 & 1.0631 & 0.05965 \\ 0.00387 & -0.0665 & 0.93714 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.06217 & 0.05177 \\ 0 & -0.07465 & 0.93783 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.00187 & 0.00187 \\ 0 & -0.00187 & 0.99813 \end{pmatrix}$ |
| <i>R</i> | $\begin{pmatrix} 0.99998 & 0.00616 & 0.00046 \\ -0.00616 & 0.99998 & 0.00113 \\ -0.00044 & -0.00113 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0.99797 & 0.00415 & -0.06358 \\ -0.00811 & 0.99803 & -0.06214 \\ 0.06319 & 0.06253 & 0.99604 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0.99797 & 0.0099 & -0.06294 \\ -0.0081 & 0.99955 & 0.0288 \\ 0.0632 & -0.02824 & 0.9976 \end{pmatrix}$ |
| <i>g</i> | 0.12642 | | 0.00374 |
| <i>P</i> ₁ | $\begin{pmatrix} 0.93196 & 0.00860 & -0.06707 \\ -0.00757 & 1.00096 & -0.00746 \\ 0.05902 & -0.00746 & 1.05818 \end{pmatrix}$ | | |
| Плоскость габитуса | (0.7093; -0.0897; 0.6992) | | |
| Направление сдвига | [-0.7527; -0.0837; 0.6529] | | |
| Величина сдвига | 0.12743 | | |
| θ_1 | $\begin{pmatrix} 0.93196 & 0.00390 & -0.07178 \\ -0.00757 & 0.93827 & -0.07015 \\ 0.05902 & 0.05878 & 1.12443 \end{pmatrix}$ | | |
| θ_2 | $\begin{pmatrix} 0.93196 & 0.00846 & -0.06721 \\ -0.00757 & 0.99910 & -0.00932 \\ 0.05902 & -0.00550 & 1.06014 \end{pmatrix}$ | | |
| <i>u</i> | [-0.179; 0.073; -0.981] | [0.699; -0.711; -0.069] | [-0.409; -0.904; -0.129] |
| φ , град | 0.36 | 5.11 | 4.00 |

¹Расчет делается относительно элементарной ячейки матрицы мартенсита. ²Расчет делается относительно базисной ячейки мартенсита. *u* – направление оси поворота пластины мартенсита на угол φ в системе координат $L2_1$ -решетки.

носительно друг друга. Для третьего варианта видим, что $g = g_2$, которое составляет лишь 3% от g для первого варианта.

В работе [14] экспериментально определены ориентационные соотношения базисной решетки мартенсита относительно исходной фазы: $(110)L2_1 \parallel (12\bar{1})6M$ и $[\bar{1}10]L2_1 \parallel [\bar{1}11]6M$, погрешность определения 0.5 градуса. Данные ориентационные соотношения относятся к ориентировке № 2 в табл. 1. Для данной ориентировки расчетная плоскость $(12\bar{1})6M$ отклонена от плоскости $(110)L2_1$ на 0.13°, а расчетное направление $[\bar{1}11]6M$ отклонено от направления $[\bar{1}10]L2_1$ на 0.08°. Таким образом, расчетные ориентационные соотношения базисной решетки полностью соответствуют

экспериментально найденным. Аналогичный вывод также можно сделать из сравнения расчетной картины с экспериментальной на рис. 4.

ВЫВОДЫ

1. Определены параметры элементарной ячейки матрицы модулированного кристалла мартенсита в сплаве Гейслера $Ni_{47}Mn_{42}In_{11}$: $a = 0.5601$ нм, $b = 0.5639$ нм, $c = 0.6771$ нм, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$.
2. На основе феноменологической кристаллографической теории мартенситных превращений рассчитаны ориентационные соотношения между кристаллическими решетками матрицы мартенсита и исходной фазы $L2_1$, а также между решетками усредненной структуры мартенсита и исходной фазы. Определены величина и направ-

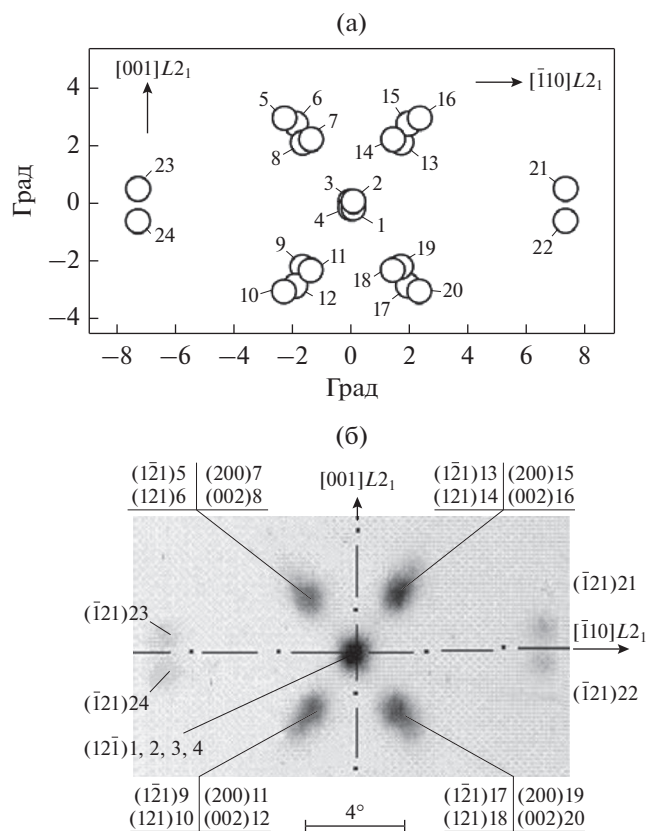


Рис. 4. Фрагмент стереографической проекции, на котором изображены полюса кристаллографических плоскостей мартенсита, возникших из плоскости $(110)L_{21}$ при мартенситном превращении (а) и рентгеновский снимок текстурных максимумов, полученных в окрестностях полюса $(110)L_{21}$ (б). Цифры от 1 до 24 соответствуют номеру ориентировки.

ление макроскопического сдвига, плоскость габитуса, угол и ось поворота пластины мартенсита.

3. Установлен механизм деформации при мартенситном превращении: сдвиг по плоскости (112) в направлении $[\bar{1}11]$ на 0.185 в исходной L_{21} фазе, а также дополнительное растяжение на 5.3% в направлении нормали к плоскости сдвига, растяжение на 0.5% в направлении сдвига и сжатие на 6.4% в поперечном направлении.

Таким образом, используемый нами сдвиговый механизм, как и деформация Бейна, позволяет получить решетку мартенсита. Преимуществом сдвигового механизма является то, что он не только деформирует решетку, но и поворачивает ее на угол, который соответствует углу поворота решетки при мартенситном превращении.

Авторы выражают благодарность доктору физ.-мат. наук В.И. Зельдовичу за обсуждение результатов и ценные советы.

Работа выполнена в рамках государственного задания по темам “Структура” № АААА-А18-

118020190116-6 и “Давление” № АААА-А18-118020190104-3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sutou Y., Imano Y., Koeda N., Omori T., Kainuma R., Ishida K., Oikawa K.* Magnetic and martensitic transformations of NiMnX (X = In, Sn, Sb) ferromagnetic shape memory alloys // *Appl. Phys. Lett.* 2004. V. 85. № 19. P. 4358–4360.
2. *Krenke T., Acet M., Wassermann E., Moya X., Manosa L., Planes A.* Ferromagnetism in the austenitic and martensitic states of Ni–Mn–In alloys // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73. P. 174413.
3. *Krenke T., Duman E., Acet M., Wassermann E.F., Moya X., Manosa L., Planes A.* Magnetic superelasticity and inverse magnetocaloric effect in Ni–Mn–In // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 74. P. 104414.
4. *Buchelnikov V.D., Sokolovskiy V.V.* Magnetocaloric Effect in Ni–Mn–X (X = Ga, In, Sn, Sb) Heusler Alloys // *Phys. Met. Metallogr.* 2011. V. 112. № 7. P. 633–665.
5. *Счастливец В.М., Калетина Ю.В., Фокина Е.А.* Мартенситное превращение в магнитном поле. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322 с.
6. *Счастливец В.М., Калетина Ю.В., Фокина Е.А., Казанцев В.А.* Мартенситные и магнитные превращения в сплавах системы Ni–Mn–In // *ФММ.* 2011. Т. 112. № 1. С. 64–74.
7. *Калетина Ю.В., Герасимов Е.Г.* Мартенситные превращения и магнитные свойства в нестехиометрических сплавах Ni–Mn–In // *ФТТ.* 2014. № 8. С. 1583–1588.
8. *Wechsler M.S., Lieberman D.S., Read T.A.* On the Theory of the Formation of Martensite // *Trans. AIME.* 1953. V. 197. P. 1503.
9. *Wayman C.M.* Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations. N.Y.–London, 1964. 193 p.
10. *Гундырев В.М., Зельдович В.И.* Кристаллографический анализ мартенситного превращения $B2-B19'$ в никелиде титана // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2012. Т. 76. № 1. С. 24–29.
11. *Гундырев В.М., Зельдович В.И.* Кристаллографический анализ мартенситного превращения в железоникелевом сплаве с двойникованным мартенситом // *Известия РАН, серия физическая,* 2013. Т. 77. № 11. С. 1638–1643.
12. *Гундырев В.М., Зельдович В.И.* Кристаллографический анализ мартенситного ГЦК → ОЦТ-превращения в высокоуглеродистой стали // *ФММ.* 2014. Т. 115. № 10. С. 1035–1042.
13. *Гундырев В.М., Зельдович В.И., Счастливец В.М.* Кристаллографический анализ мартенситного превращения в среднеуглеродистой стали с пакетным мартенситом // *ФММ.* 2016. Т. 117. № 10. С. 1052–1062.
14. *Гундырев В.М., Калетина Ю.В.* Рентгеноструктурное исследование структуры мартенсита сплава $Ni_{47}Mn_{42}In_{11}$ // *ФММ.* 2018. Т. 119. № 10. С. 1018–1024.
15. *Murakami Y., Otsuka K., Hanada S., Watanabe S.* Crystallography of stress-induced $B2-7R$ martensitic transformation in a Ni–37.0 at % Al alloy // *Mater. Trans. JIM.* 1992. V. 33. P. 282–288.