УДК 539.52

# Микроструктурная модель процессов двойникования и раздвойникования мартенситной фазы в сплавах с памятью формы

# А. А. Роговой

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Россия, 614018, Пермь, ул. Академика Королева, 1.

### Аннотация

В статье на примере сплава с памятью формы Cu–Al–Ni обоснован подход к описанию на микроструктурном уровне процессов двойникования и раздвойникования мартенситной фазы. Согласованная двойни-KOBAS MADTEHCUTHAS CTDVKTVDA ONUCHBAETCS VDABHEHUEM COBMECTHOCTU Адамара для деформаций, решение которого позволило определить поверхности, вдоль которых происходит сдвиг, направления и величину скольжения в орторомбической кристаллической ячейке, соответствующей рассматриваемому материалу в мартенситном состоянии, приводящих к появлению и исчезновению двойниковой структуры. Показано, что в сплаве с памятью формы одновременно и неразрывно существуют двойники двух видов: деформационный и структурный. Первый связан с деформацией простого сдвига, возникающей в соответствии с условием совместности Адамара в мартенситной пластине, что приводит к излому этой прямой пластины и возникновению двух элементов, повернутых на определенный угол друг относительно друга, которые и формируют этот двойник. Структурный двойник формируется из двух частей, в каждой из которых орторомбические кристаллические ячейки мартенсита одинаково ориентированы, но одна из осей этих ячеек меняет свое направление на  $90^{\circ}$  при переходе в другую часть двойника. Формирование деформационного двойника инициирует возникновение в среде деформации простого сдвига, а структурного двойника — структурной деформации. Показано, что определенное положение структурного двойника в деформационном приводит к равенству этих деформаций.

Ключевые слова: микроструктурное моделирование, анизотропный материал, условие совместности Адамара, поверхности скольжения и направления сдвига.

Механика деформируемого твердого тела Научная статья

© Коллектив авторов, 2024

© СамГТУ, 2024 (составление, дизайн, макет)

∂ @ Контент публикуется на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru)

### Образец для цитирования

Роговой А. А. Микроструктурная модель процессов двойникования и раздвойникования мартенситной фазы в сплавах с памятью формы // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 2024. Т. 28, № 3. С. 516–542. EDN: NDDMCS. DOI: 10.14498/vsgtu2089.

### Сведения об авторе

Анатолий Алексеевич Роговой 🖄 🗅 https://orcid.org/0000-0003-1723-0067

доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник; лаб. нелинейной механики деформируемого твердого тела; e-mail: rogovoy@icmm.ru



Получение: 6 марта 2024 г. / Исправление: 18 сентября 2024 г. / Принятие: 27 сентября 2024 г. / Публикация онлайн: 28 октября 2024 г.

1. Введение. В статье на примере сплава с памятью формы (СПФ) Сu– Al–Ni обоснован подход к описанию на микроструктурном уровне процессов двойникования и раздвойникования мартенситной фазы. Сплавы этого типа относятся к классу функциональных (интеллектуальных, умных) материалов, которые значительно меняют свою форму и размер под действием внешних силовых полей (деформации могут достигать 6–10%). С помощью этих полей можно контролировать форму и размер образца, изготовленного из таких материалов, и управлять его геометрией.

Поведение СПФ в силовом поле определяется их структурой, возникшей в результате прямого фазового перехода первого рода, реализуемого только за счет изменения температуры (охлаждения) из аустенитного состояния (высокотемпературная фаза) в мартенситное состояние (низкотемпературная фаза). В таком процессе кубическая кристаллическая ячейка аустенита сплава Cu–Al–Ni с одинаковой длиной ребер преобразуется в шесть вариантов орторомбической ячейки мартенсита (прямоугольный параллелепипед) с ребрами *a*, *b* и *c*. Шесть тензоров второго ранга  $U_i$ , i = 1, 2, ..., 6, называемые тензорами деформации Бейна, соответствуют такому преобразованию (см. [1–6]) и могут быть представлены как в ортонормированном базисе  $e_k$ , k = 1, 2, 3, с векторами, параллельными ребрам кубической ячейки аустенита (исходная конфигурация), так и в ортонормированном базисе  $\tilde{e}_k$ , k = 1, 2, 3, с векторами, параллельными ребрам прямоугольного параллелепипеда, представляющего собой ячейку мартенсита (текущая конфигурация).

Согласно микроструктурным экспериментальным данным, отдельные тонкие прямоугольные мартенситные пластины (прямоугольные параллелепипеды) с одним из вариантов орторомбической ячейки, который соответствует, например, деформации Бейна  $U_1$ , сначала появляются внутри исходной аустенитной фазы монокристалла. При дальнейшем охлаждении в материале, оставшемся еще в аустенитном состоянии, образуются новые мартенситные пластины с другими, в общем случае, вариантами деформации Бейна. Этот процесс продолжается до тех пор, пока все участки аустенита между уже сформированными мартенситными пластинами не перейдут в мартенситную фазу. В ходе такого процесса недеформированный и ненапряженный материал становится деформированным и напряженным. Но в то же время в материале инициируются процессы, направленные на компенсацию результатов этого фазового перехода (принцип Ле Шателье-Брауна), и для компенсации напряжений, возникших в этом случае, сплав образует двойниковую структуру. Такая самоаккомодация приводит лишь к объемной деформации незначительной величины и, как следствие, к минимальному уровню возникающих в этом процессе напряжений.

Теория, описывающая формирование двойников при образовании мартенсита в СПФ, основана на условии совместности Адамара [7], и решение соответствующего этой теории уравнения двойникования позволяет определить поверхности, вдоль которых происходит сдвиг (направление единичной нормали N к этой поверхности), направление скольжения (единичный вектор  $\tau$ ) и величину этого скольжения *s* в кристаллической ячейке, соответствующей рассматриваемому материалу в мартенситном состоянии, приводящих к появлению, развитию и исчезновению двойниковой структуры. Сдвиг же на величину *s* возникает при приложении к поверхности сдвига касательного усилия  $p_{\tau}$ , действующего в направлении вектора скольжения  $\tau$  и имеющего достаточную величину. Достаточная (критическая) величина этого усилия  $p_{\tau}$  разная для разных СПФ и определяется из эксперимента.

Основы микроструктурного моделирования изложены в работах В. А. Лихачева и В. Г. Малинина [8], В. Е. Панина [9,10] и получили дальнейшее развитие в научных школах этих авторов и научной школе П. В. Трусова [11–13]. Подходы микроструктурного моделирования применительно к материалам с памятью формы (и подходы, и такие материалы являются предметом нашего исследования) систематически используются в работах А. Е. Волкова с соавторами (см., например, [14, 15])<sup>1</sup>. Но по какой-то причине в российских работах, посвященных микроструктурному моделированию поведения материалов с памятью формы, не используется уравнение совместности (или двойникования) Адамара [1,2]. Решение этого уравнения позволяет определить, как уже отмечалось выше, плоскость скольжения вариантов мартенсита, образующих двойник, направление и величину этого скольжения, т.е. кинематику процесса двойникования.

В работах [16-20] с использованием уравнения совместности Адамара обоснован подход к описанию процессов двойникования и раздвойникования мартенситной структуры в ферромагнитном сплаве Ni<sub>2</sub>MnGa с памятью формы, которые могут происходить при определенных условиях только в магнитном поле (поля другой физической природы отсутствуют), а в работе [21] при совместном действии магнитного и силового полей. В этом материале в мартенситном состоянии возникают тетрагональные кристаллические ячейки, имеющие две оси симметрии второго порядка и одну ось симметрии четвертого порядка. Этим определяются магнитная и механическая анизотропии ячейки. Анизотропия же материала (его представительного объема) определяется взаимным расположением этих ячеек в каждом из элементов двойника. Преобразование кубической ячейки в тетрагональную сопровождается в этом материале возникновением только трех независимых тензоров деформации Бейна. В указанных работах [16-21] дифференциальным уравнениям магнитомеханической задачи поставлены в соответствие вариационные уравнения, для чего использован наиболее общий подход, основанный на процедуре Галеркина (см., например, [22]). Заметим, что построить с помощью этой процедуры вариационное уравнение можно всегда. Но далеко не всегда можно из этого уравнения вывести интегральный функционал, исследование которого на выпуклость и коэрцитивность позволяет сделать вывод о существовании и единственности решения данной краевой задачи. Вариационная постановка позволяет не только на порядок снизить требования к гладкости искомого решения, но и построить определяющее уравнение, описывающее поведение материала, в том числе анизотропное.

В настоящей работе условие совместности Адамара привлекается для опи-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Необходимо отметить, что сплавы с памятью формы являются предметом глубокого исследования школы А. А. Мовчана. Но в работах этой школы строится феноменологическая модель на макроуровне, в отличие от рассматриваемого в настоящей статье.

сания кинематики процесса двойникования сплава с памятью формы Cu–Al– Ni. В этом материале в мартенситном состоянии возникают орторомбические кристаллические ячейки, отличные от рассмотренных ранее в указанных предыдущих работах, что приводит к другой анизотропии механических свойств ячейки и материала (представительного объема). Процесс сопровождается возникновением шести независимых тензоров деформации Бейна.

Работа состоит из пяти разделов. В разделе 2 описывается структура сплава с памятью формы Cu–Al–Ni и определяются структурные деформации Бейна, возникающие при переходе этого сплава из аустенитного в мартенситное состояние. В разделе 3 излагаются основные положения теории двойникования, основанной на уравнении совместности Адамара, а в разделе 4 приводится общее решение этого уравнения для СПФ Cu–Al–Ni, имеющего орторомбическую кристаллическую ячейку мартенсита. Решение получено в работах [1–6], с его использованием в разделе 5 анализируются процессы двойникования и раздвойникования в этом сплаве.

В этой статье векторы обозначаются жирным курсивным шрифтом, A, тензоры — жирным прямым шрифтом, A. Скалярное произведение тензоров и/или векторов обозначается как  $A \cdot B$ , векторное произведение — как  $A \times B$  и тензорное произведение, для которого иногда используется обозначение  $A \otimes B$ , — как AB. При действии оператора Гамильтона  $\nabla = r^i \partial/\partial q^i$  базисный вектор этого оператора всегда находится на первом месте слева,  $\nabla * \mathbf{A} = r^i * \partial \mathbf{A}/\partial q^i$ , где \* — скалярное, векторное или тензорное произведение, в отличие от некоторых зарубежных работ, в которых действие оператора Гамильтона представляется в виде  $\nabla * \mathbf{A} = \partial \mathbf{A}/\partial q^i * r^i$ . В статье рассматриваются только малые деформации, поэтому между операторами Гамильтона начальной и текущей конфигураций не делается различия и используется оператор, представленный выше. Выражение  $\mathbf{A}^{\top}$  означает транспонирование тензора второго ранга  $\mathbf{A}$ , а  $\mathbf{g}$  — единичный тензор второго ранга.

2. Структура сплава с памятью формы Cu–Al–Ni в аустенитном и мартенситном состояниях. Структурные деформации. В процессе получения сплава с памятью формы Cu–Al–Ni происходит ряд полиморфных превращений (фазовых переходов первого рода), приводящих к изменению типа кристаллической решётки. Сначала при охлаждении в области высоких температур (аустенитное состояние сплава) образуется кристаллическая структура в виде объемно-центрированных кубических (ОЦК) ячеек, которая при дальнейшем охлаждении переходит в D0<sub>3</sub> упорядоченную кубическую структуру<sup>2</sup> [3,23].

Последующее охлаждение до комнатной температуры переводит D0<sub>3</sub> структуру в орторомбическую ячейку (прямоугольный параллелепипед) мартенсита (низкотемпературное состояние). В результате этого фазового перехода первого рода в мартенситном состоянии при определенных условиях могут образовываться двойники, кинематика возникновения и исчезновения которых и является предметом данного исследования. В связи с этим в аустенитном состоянии рассматривается только кубическая структура D0<sub>3</sub>, а в мартенситном — структура, образованная орторомбическими ячейками.

Кубическая структура D03 показана на рис. 1 и представляет собой гране-

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Относительно структуры D0<sub>3</sub> см., например, Crystal Structure Descriptions, 2nd edition, https://som.web.cmu.edu/StructuresAppendix2.pdf.

и реброцентрированный куб с длиной ребра  $a_0$ , в центре которого расположен объемно-центрированный куб меньшего размера (рис. 1, а). Для наглядности атомы, расположенные в узлах и центре этого малого куба, выделены голубым цветом. Атомная структура на диагональных плоскостях, имеющих длину ребра  $\sqrt{2}a_0$  и содержащих векторы  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{e}_3$  или векторы  $\tilde{e}_2$  и  $\tilde{e}_3$ , показана на рис. 1, b. Расположение атомов химических элементов сплава Cu–Al–Ni в узлах ячейки удовлетворяет всем приведенным ниже условиям симметрии. Поэтому при решении поставленной задачи нет необходимости в их идентификации.

Кубическая ячейка аустенита в сплаве Cu–Al–Ni преобразуется в орторомбическую ячейку мартенсита и, следуя [1,5], этот процесс удобно продемонстрировать, используя рис. 2. Здесь внутри двух примыкающих друг к другу кубических ячеек структуры D0<sub>3</sub> (тонкие сплошные линии) выделяется тетрагональная ячейка (толстые сплошные линии) и показано расположение в них атомов в соответствии с рис. 1.

Так как длина любого ребра кубической ячейки  $a_0$  (см. рис. 1), в тетрагональной ячейке длина ребра вдоль вектора  $\tilde{e}_3$  ( $l_3$ ) тоже  $a_0$ , а вдоль векторов  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{e}_2$   $l_1 = l_2 = (\sqrt{2}/2)a_0$ , что равно половине длины диагонали грани куба.



Рис. 1. Кубическая D0<sub>3</sub> ячейка (a) и диагональная плоскость, содержащая векторы  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{e}_3$  или векторы  $\tilde{e}_2$  и  $\tilde{e}_3$  (b); атомы показаны не на всех гранях и ребрах рис. (a)

[Figure 1. Cubic D0<sub>3</sub> unit cell (a) and the diagonal plane containing vectors  $\tilde{e}_1$  and  $\tilde{e}_3$  or vectors  $\tilde{e}_2$  and  $\tilde{e}_3$  (b); atoms are shown not on all faces and edges in figure (a)]



Рис. 2. Расположение тетрагональной кристаллической ячейки в кубических ячейках; атомы показаны не на всех гранях и ребрах кубов тетрагональной ячейки

[Figure 2. The arrangement of the tetragonal crystal cell in cubic cells; atoms are shown not on all faces and edges of the tetragonal cell cubes] Эти тетрагональные ячейки, у которых длины ребер основания  $l_1$  и  $l_2$  равны, растягиваются или сжимаются вдоль векторов  $\tilde{e}_i$ , i = 1, 2, 3, на разную величину, превращаясь в орторомбические ячейки. Коэффициент растяжения (сжатия) определяется соотношением  $\xi_i = \tilde{l}_i/l_i$ , где  $\tilde{l}_i$ , i = 1, 2, 3 — текущие длины элементов ячейки вдоль соответствующих векторов  $\tilde{e}_i$ , i = 1, 2, 3, a  $l_i$ , i = 1, 2, 3 — первоначальные длины этих элементов. В литературе (см. [1,3–6]) приняты следующие обозначения:  $\alpha = \xi_1$ ,  $\beta = \xi_3$ ,  $\gamma = \xi_2$ . Учитывая первоначальные длины элементов, будем иметь:  $\alpha = \sqrt{2\tilde{l}_1/a_0}$ ,  $\beta = \tilde{l}_3/a_0$ ,  $\gamma = \sqrt{2\tilde{l}_2/a_0}$ .

Превращение кристаллической ячейки аустенита (куба) в кристаллическую ячейку мартенсита (орторомбическую ячейку для сплава Cu–Al–Ni) описывается тензором второго ранга U, называемым тензором деформации Бейна, который является симметричным положительно определенным тензором чистой деформации в полярном разложении градиента деформации  $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$ , где  $\mathbf{R}$  – собственно ортогональный тензор.<sup>3</sup> В ортонормальном базисе  $\tilde{\boldsymbol{e}}_i$ , i = 1, 2, 3, связанном с орторомбической ячейкой как показано на рис. 2, этот тензор принимает вид

$$\mathbf{U} = \alpha \tilde{\boldsymbol{e}}_1 \tilde{\boldsymbol{e}}_1 + \gamma \tilde{\boldsymbol{e}}_2 \tilde{\boldsymbol{e}}_2 + \beta \tilde{\boldsymbol{e}}_3 \tilde{\boldsymbol{e}}_3. \tag{1}$$

По данным работ [3, 24], кубическая и орторомбическая ячейки для сплава Cu–Al–Ni имеют следующие размеры для структур, представленных на рис. 1 и 2:  $l_1 = l_2 = l_3 = a_0 = 0.2918$  нм,  $\tilde{l}_1 = 0.2194$  нм,  $\tilde{l}_2 = 0.2111$  нм,  $\tilde{l}_3 = 0.2678$  нм, и тогда в выражении (1)  $\alpha = 1.0619$ ,  $\beta = 0.9178$ ,  $\gamma = 1.0231$  (коэффициент больше единицы — растяжение, меньше единицы — сжатие). Эти значения полностью соответствуют приведенным в работах [3, 5, 6].

Примечание 1. Диады в выражении (1) состоят из одинаковых базисных векторов. Поэтому тензор **U** не изменится, если любой из этих векторов заменить на обратный. При этом нужно отслеживать, чтобы полученная тройка векторов была правой, т.к. только тогда будет справедливым известное правило  $\varepsilon_{ijk}\tilde{e}_i = \tilde{e}_j \times \tilde{e}_k$ , где  $\varepsilon_{ijk}$ —символ Леви—Чивита.

Тетрагональная ячейка, показанная на рис. 2, может занимать четыре положения относительно фиксированной (основной) кубической. Эти положения показаны на рис. 3, где ситуация под номером 1 соответствует виду по стрелке A на рис. 2 (вид сверху). В ситуациях 2, 3 и 4 положение векторов  $e_1$  и  $e_2$ , связанных с основной кубической ячейкой (толстые сплошные линии), неизменно в пространстве (такое же как в ситуации 1), а тетрагональная ячейка выделяется из двух кубических ячеек, из которых одна основная, а вторая, ограниченная тонкими сплошными линиями на рис. 3, примыкает к ней сверху в ситуации 2, слева в ситуации 3 и снизу в ситуации 4.

Каждой из этих ситуаций соответствует свой тензор Бейна, записанный в своем локальном базисе, и чтобы иметь возможность оценить или сравнить

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Тензор **Q**, для которого **Q**<sup> $\top$ </sup> = **Q**<sup>-1</sup>, называется ортогональным тензором. Этот тензор при скалярном умножении на вектор поворачивает последний в пространстве, сохраняя его модуль. При аналогичном воздействии на два вектора он, поворачивая их в пространстве, сохраняет также и угол между ними. Определитель ортогонального тензора равен ±1. Определитель собственно ортогонального тензора равен +1.





[Figure 3. The arrangement of the tetragonal crystal cell relative to a fixed cubic cell]

эти тензоры, их необходимо представить в одном общем базисе, за который удобно принять векторы  $e_1, e_2$  и  $e_3$ , связанные с основной кубической ячейкой (базис начальной конфигурации). Учитывая, что векторы  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{e}_2$  направлены по диагоналям грани куба и составляют с его сторонами углы в 45°, для ситуации 1 из рис. 2 и 3 имеем

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_{1}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{e}_{1} + \boldsymbol{e}_{2}), \quad \tilde{\boldsymbol{e}}_{2}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{e}_{1} - \boldsymbol{e}_{2}), \quad \tilde{\boldsymbol{e}}_{3}^{(1)} = \boldsymbol{e}_{3},$$
 (2)

и выражение (1) принимает вид

$$\mathbf{U}^{(1)} = \zeta \mathbf{e}_{1} \mathbf{e}_{1} + \eta (\mathbf{e}_{1} \mathbf{e}_{2} + \mathbf{e}_{2} \mathbf{e}_{1}) + \zeta \mathbf{e}_{2} \mathbf{e}_{2} + \beta \mathbf{e}_{3} \mathbf{e}_{3}, \quad \zeta = \frac{\alpha + \gamma}{2}, \quad \eta = \frac{\alpha - \gamma}{2}.$$
 (3)

Как следует из рис. 3, векторы  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{e}_2$  в ситуациях 2, 3 и 4 повернуты по отношению к этим же векторам в ситуации 1 на углы  $\pi/2$ ,  $\pi$  и  $-\pi/2$  соответственно. Вращение осуществляется вокруг оси  $e_3$ , векторы сохраняют свою длину и внутренний угол в 90°. Как известно, такая операция осуществляется собственно ортогональным тензором, который имеет вид (см. [22,25])

$$\mathbf{O}(\varphi, \boldsymbol{p}) = \mathbf{g} \cos \varphi + \boldsymbol{p} \boldsymbol{p} (1 - \cos \varphi) + (\boldsymbol{p} \times \mathbf{g}) \sin \varphi$$
(4)

и осуществляет поворот на угол  $\varphi$  вокруг единичного вектора p против часовой стрелки, если смотреть с конца вектора p.

В нашем случае  $p = e_3$  и тогда для ситуации 2 из соотношения (4) следует, что

$$\mathbf{O}^{(2)}(\pi/2, \boldsymbol{e}_3) = \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_2$$

Учитывая выражения (2), получаем

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_{1}^{(2)} = \mathbf{O}^{(2)} \cdot \tilde{\boldsymbol{e}}_{1}^{(1)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{e}_{1} - \boldsymbol{e}_{2}), \quad \tilde{\boldsymbol{e}}_{2}^{(2)} = \mathbf{O}^{(2)} \cdot \tilde{\boldsymbol{e}}_{2}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{e}_{1} + \boldsymbol{e}_{2}),$$

$$\tilde{e}_3^{(2)} = \mathbf{O}^{(2)} \cdot \tilde{e}_3^{(1)} = e_3$$

в результате чего тензор (1) принимает вид

$$\mathbf{U}^{(2)} = \zeta \, \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 - \eta \, (\boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_1) + \zeta \, \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 + \beta \, \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3. \tag{5}$$

Для ситуации 3 из (4) имеем

$$\mathbf{O}^{(3)}(\pi, \mathbf{e}_3) = -\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3,$$

учитывая (2), получаем

$$\tilde{e}_1^{(3)} = \mathbf{O}^{(3)} \cdot \tilde{e}_1^{(1)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}(e_1 + e_2), \quad \tilde{e}_2^{(3)} = \mathbf{O}^{(3)} \cdot \tilde{e}_2^{(1)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}(e_1 - e_2),$$

$$\tilde{e}_3^{(3)} = \mathbf{O}^{(3)} \cdot \tilde{e}_3^{(1)} = e_3,$$

в результате чего соотношение (1) принимает вид

$$\mathbf{U}^{(3)} = \zeta \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 + \eta (\boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_1) + \zeta \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 + \beta \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3,$$

что полностью совпадает с  $\mathbf{U}^{(1)}$  (см. (3)).

Наконец, в ситуации 4

$$\mathbf{O}^{(4)}(3\pi/2, \mathbf{e}_3) = \mathbf{O}^{(4)}(-\pi/2, \mathbf{e}_3) = \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2,$$

тогда

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_{1}^{(4)} = \mathbf{O}^{(4)} \cdot \tilde{\boldsymbol{e}}_{1}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{2} (\boldsymbol{e}_{1} - \boldsymbol{e}_{2}), \quad \tilde{\boldsymbol{e}}_{2}^{(4)} = \mathbf{O}^{(4)} \cdot \tilde{\boldsymbol{e}}_{2}^{(1)} = -\frac{\sqrt{2}}{2} (\boldsymbol{e}_{1} + \boldsymbol{e}_{2}),$$
$$\tilde{\boldsymbol{e}}_{3}^{(4)} = \mathbf{O}^{(4)} \cdot \tilde{\boldsymbol{e}}_{3}^{(1)} = \boldsymbol{e}_{3},$$

и выражение (1) представляется как

$$\mathbf{U}^{(4)} = \zeta \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 - \eta (\boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_1) + \zeta \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 + \beta \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3,$$

что полностью совпадает с  $\mathbf{U}^{(2)}$  (см. (5)).

В результате независимыми остаются только два тензора деформаций Бейна (3) и (5), которые далее будем обозначать  $U_1$  и  $U_2$ :

$$\mathbf{U}_{1} = \zeta \mathbf{e}_{1} \mathbf{e}_{1} + \eta (\mathbf{e}_{1} \mathbf{e}_{2} + \mathbf{e}_{2} \mathbf{e}_{1}) + \zeta \mathbf{e}_{2} \mathbf{e}_{2} + \beta \mathbf{e}_{3} \mathbf{e}_{3}, \\
 \mathbf{U}_{2} = \zeta \mathbf{e}_{1} \mathbf{e}_{1} - \eta (\mathbf{e}_{1} \mathbf{e}_{2} + \mathbf{e}_{2} \mathbf{e}_{1}) + \zeta \mathbf{e}_{2} \mathbf{e}_{2} + \beta \mathbf{e}_{3} \mathbf{e}_{3}.$$
(6)

Напоминаем, что здесь и далее  $\zeta = (\alpha + \gamma)/2, \eta = (\alpha - \gamma)/2.$ 

Примечание 2. В соответствии со сказанным в примечании 1, векторы  $\tilde{e}_1$  и  $\tilde{e}_2$ , показанные на рис. 3 для каждой из четырех ситуаций, можно одновременно заменить на обратные. Вектор  $\tilde{e}_3$  не меняет своего направления и тройка векторов  $\tilde{e}_i$ , i = 1, 2, 3, остается правой. Такая замена является еще

одним объяснением совпадения результатов в ситуациях 1 и 3, а также 2 и 4.

В рассмотренных выше и показанных на рис. 2 и 3 расположениях тетрагональной ячейки в двух кубических, вектор  $\tilde{e}_3$ , связанный с тетрагональной ячейкой, совпадает с вектором  $e_3$ , связанным с кубической ячейкой. Но ситуации, совершенно аналогичные проанализированным, могут возникать, когда вектор  $\tilde{e}_3$  совпадает с вектором  $e_1$  или с вектором  $e_2$ . В каждом из этих случаев также существуют два независимых тензора Бейна (будем обозначать их  $\mathbf{U}_3$ ,  $\mathbf{U}_4$ ,  $\mathbf{U}_5$ ,  $\mathbf{U}_6$ ) и, как легко понять, это будут выражения (6), в которых коэффициенты, стоящие при векторах  $e_1$ ,  $e_2$ ,  $e_3$ , будут относиться теперь в первом случае к векторам  $e_2$ ,  $e_3$ ,  $e_1$  соответственно, а во втором к векторам  $e_3$ ,  $e_1$ ,  $e_2$ :

$$U_{3} = \beta e_{1}e_{1} + \zeta e_{2}e_{2} + \eta(e_{2}e_{3} + e_{3}e_{2}) + \zeta e_{3}e_{3}, 
U_{4} = \beta e_{1}e_{1} + \zeta e_{2}e_{2} - \eta(e_{2}e_{3} + e_{3}e_{2}) + \zeta e_{3}e_{3}, 
U_{5} = \zeta e_{1}e_{1} + \eta(e_{1}e_{3} + e_{3}e_{1}) + \beta e_{2}e_{2} + \zeta e_{3}e_{3}, 
U_{6} = \zeta e_{1}e_{1} - \eta(e_{1}e_{3} + e_{3}e_{1}) + \beta e_{2}e_{2} + \zeta e_{3}e_{3}.$$
(7)

Примечание 3. Осуществив на рис. 3 замены  $e_1 \Rightarrow e_2, e_2 \Rightarrow e_3, e_3 \Rightarrow e_1$ (векторы  $\tilde{e}_i, i = 1, 2, 3$ , остаются без изменения), приходим к тому, что ситуациям 1 и 3 соответствует тензор U<sub>3</sub>, а ситуациям 2 и 4 — тензор U<sub>4</sub>. Осуществив на рис. 3 замены  $e_1 \Rightarrow e_3, e_2 \Rightarrow e_1, e_3 \Rightarrow e_2$  (векторы  $\tilde{e}_i, i = 1, 2, 3$ , опять остаются без изменения), приходим к тому, что ситуациям 1 и 3 соответствует тензор U<sub>5</sub>, а ситуациям 2 и 4 — тензор U<sub>6</sub>. Сказанное легко проверить, используя соотношение (1) и очевидные для любого из случаев связи векторов  $\tilde{e}_i$  и  $e_i, i = 1, 2, 3$ .

Приведеные выражения (6), (7) для тензоров  $\mathbf{U}_i$ ,  $i = 1, 2, 3, \ldots, 6$ , совпадают (с точностью до нумерации этих тензоров) с соотношениями, представленными в [1, 4-6]. Если  $\alpha = \gamma$ , т.е. тетрагональная ячейка при деформировании остается тетрагональной, то  $\zeta = \alpha$ ,  $\eta = 0$  и из шести тензоров Бейна независимыми остаются только три. Такая ячейка являлась предметом рассмотрения в упомянутых во введении публикациях [16–21], посвященных описанию процессов двойникования и раздвойникования мартенситной структуры в ферромагнитном сплаве Ni<sub>2</sub>MnGa с памятью формы при действии магнитного и/или силового полей.

Симметрия кристалла характеризуется собственно ортогональными тензорами **R**, описывающими повороты этого кристалла вокруг таких осей и на такие углы, при которых форма кристалла остается неизменной: куб превращается в куб, параллелепипед в точно такой же параллелепипед и т.д. Таких тензоров может быть несколько и они образуют группу вращений  $\mathcal{P}$ ,  $\mathbf{R} \in \mathcal{P}$ . Кристаллическая ячейка сплава Cu–Al–Ni в аустенитном состоянии есть куб и группа вращения  $\mathcal{P}_a$  его состоит из 24 ортогональных тензоров  $\mathbf{R}_a$ ,  $\mathcal{V}_{\mathcal{P}_a} = 24$  (см. [2,4,6]). Куб остается неизменным при  $\mathbf{R}_a = \mathbf{g}$ . Куб превращается снова в куб при вращении на углы  $\pi/2$ ,  $\pi$ ,  $2\pi/3$  вокруг его различных трех главных осей, проходящих через центры граней и параллельных векторам  $\mathbf{e}_i$ , i = 1, 2, 3, направленным вдоль ребер (см. рис. 1), и образующих ортонормированный базис начальной конфигурации (9 ортогональных тензоров) при вращении вокруг его четырех главных диагоналей на углы  $\pm 2\pi/3$  (8 ортогональных тензоров) и при вращении вокруг его двух диагоналей на трех разных поверхностях куба на угол  $\pi$  (6 ортогональных тензоров). Кристаллическая ячейка этого сплава в мартенситном состоянии представляет собой прямоугольный параллелепипед (орторомбическая ячейка) и группа вращения для такой ячейки  $\mathcal{P}_m$  состоит из 4 ортогональных тензоров  $\mathbf{R}_m$ ,  $\mathcal{V}_{\mathcal{P}_m} = 4$ . Прямоугольный параллелепипед остается неизменным при  $\mathbf{R}_m = \mathbf{g}$ и при вращениях на угол  $\pi$  вокруг его различных трех главных осей, проходящих через центры граней и параллельных векторам  $\tilde{\boldsymbol{e}}_i$ , i = 1, 2, 3, направленным вдоль ребер и образующим ортонормированный локальный базис, в котором представлена эта ячейка [4]. Количество независимых вариантов мартенсита при фазовом переходе определяется соотношением  $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{\mathcal{P}_m}/\mathcal{V}_{\mathcal{P}_m}$ и для СПФ Сu-Al-Ni  $\mathcal{V} = 6$ . Именно для этих шести вариантов и получены тензоры деформации Бейна, представленные соотношениями (6), (7).

**3.** Уравнение совместности деформаций (уравнение двойникования). Как уже отмечалось во введении, в результате прямого фазового перехода первого рода, который происходит в сплаве Cu–Al–Ni только путем изменения температуры (охлаждения) из аустенитного состояния (высокотемпературная фаза) в мартенситное состояние (низкотемпературная фаза), кубическая кристаллическая ячейка аустенита с одинаковой длиной ребер преобразуется в шесть вариантов орторомбической ячейки мартенсита с ребрами *a*, *b* и *c*. В ходе такого процесса недеформированный и ненапряженный материал становится деформированным и напряженным. Но в то же время в материале инициируются процессы, направленные на компенсацию результатов этого фазового перехода (принцип Ле Шателье—Брауна), и для компенсации напряжений, возникших в этом случае, сплав образует двойниковую структуру.

Кинематика процессов образования двойника и его исчезновения (раздвойникования) описывается условием совместности Адамара, суть которого следующая [7]. Пусть поверхность *S* является частью внутренней поверхности тела, разделяющей его на объемы (обозначим их  $V_+$  и  $V_-$ ), в каждом из которых некоторый вектор, обозначим его a, непрерывен и дифференцируем вдоль любого пути, лежащего на *S*. Тогда существуют непрерывные производные, имеющие в наших обозначениях (см. конец введения) вид  $da_+ = (\nabla a)_+^\top \cdot dl$  и  $da_- = (\nabla a)_-^\top \cdot dl$ , которые характеризуют изменения вектора a в направлении любого вектора l, лежащего на *S* при стремлении к поверхности *S* со стороны объемов  $V_+$  и  $V_-$ . Вычитая одно из другого, получаем условие совместности Адамара:  $[da] = [\nabla a]^\top \cdot dl$ , где  $[da] = da_+ - da_$ и  $[\nabla a]^\top = (\nabla a)_+^\top - (\nabla a)_-^\top$ . Если вектор a непрерывен в теле, включая поверхность *S*, то [da] = 0, из чего следует, что  $[\nabla a]^\top \cdot dl = 0$ , и, как следствие, тензор второго ранга  $[\nabla a]^\top$  должен иметь диадное представление в виде  $[\nabla a]^\top = b n$ , где n — нормаль к поверхности *S*, которую можно положить единичной, а b является некоторым вектором, определяющим проекцию  $[\nabla a]^\top$ на нормаль, как это следует из условия  $[\nabla a]^\top \cdot n = bn \cdot n = b$ .

На плоскости, разделяющей два варианта мартенсита с тензорами деформации Бейна  $\mathbf{U}_i$  и  $\mathbf{U}_j$ , это условие совместности Адамара должно выполняться для градиентов деформации  $\mathbf{F}_i$  и  $\mathbf{F}_j$  [2]:

$$\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j = \boldsymbol{a} \, \boldsymbol{n}. \tag{8}$$

525

Здесь  $\mathbf{F}_k = (\nabla \mathbf{R}_k)^\top$ , где  $\nabla$ — оператор Гамильтона относительно начальной конфигурации, а  $\mathbf{R}_k$ — радиус-вектор положения точки k в текущей конфигурации,  $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к поверхности, разделяющий варианты мартенсита в исходном, недеформированном состоянии, а вектор  $\mathbf{a} = (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j) \cdot \mathbf{n}$  в данном случае представляет собой проекцию на нормаль скачка градиента деформации при прохождении через разделяющую поверхность. Переписав (8) в виде  $\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{U}_i - \mathbf{R}_j \cdot \mathbf{U}_j = \mathbf{a} \mathbf{n}$ , выполнив скалярное умножение этого выражения слева на  $\mathbf{R}_i^\top$  и введя вектор  $\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{R}_i^\top \cdot \mathbf{a}$ , получим

$$\mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{U}_i - \mathbf{U}_j = \hat{\boldsymbol{a}} \, \boldsymbol{n},\tag{9}$$

где  $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_{j}^{\top} \cdot \mathbf{R}_{i}$ . Представляя (9) как

$$\mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{U}_i = (\mathbf{g} + \hat{\boldsymbol{a}} \, \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{U}_j^{-1}) \cdot \mathbf{U}_j, \tag{10}$$

заключаем, что  $\det(\mathbf{g} + \hat{a} \mathbf{n} \cdot \mathbf{U}_j^{-1}) = 1$ , так как определитель произведения равен произведению определителей,  $\det \mathbf{R}_{ij} = 1$  и  $\det \mathbf{U}_i = \det \mathbf{U}_j$  для всех iи j в соотношениях (6), (7). Отсюда следует, что тензор  $\mathbf{g} + \hat{a} \mathbf{n} \cdot \mathbf{U}_j^{-1}$  описывает процессы без изменения объема, а именно простой сдвиг, как показано в [18]. Следуя [1,2], представим (10) в виде

$$\mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{U}_i = (\mathbf{g} + s \,\boldsymbol{\tau} \, \boldsymbol{N}) \cdot \mathbf{U}_j,\tag{11}$$

где  $s = |\hat{a}||\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{n}|$  — величина сдвига,  $\boldsymbol{\tau} = \hat{a}/|\hat{a}|$  — единичный вектор направления сдвига и  $\boldsymbol{N} = (\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{n})/|\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{n}|$  (суть этого вектора выясним ниже). В последнем выражении симметрия тензора  $\mathbf{U}_{j}^{-1}$  принята во внимание:  $\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{U}_{j}^{-1}$ . Отметим также, что в левой части этого уравнения тензор  $\mathbf{U}_{i}$  переводит начальную конфигурацию  $\kappa_{0}$  в промежуточную  $\kappa_{i}$ , которая затем переводится в текущую конфигурацию  $\kappa$  тензором  $\mathbf{R}_{ij}$ . В правой же части тензор  $\mathbf{U}_{j}$  переводит начальную конфигурацию  $\kappa_{0}$  в промежуточную  $\kappa_{j}$ , которая затем переводится в текущую конфигурацию  $\kappa_{0}$  в промежуточную  $\kappa_{j}$ , которая затем переводится в текущую конфигурацию  $\kappa_{i}$  не совпадают в общем случае. Последняя будет использована в следующем абзаце.

Как известно [25], градиент места, описывающий процесс простого сдвига, представляется в виде  $\mathbf{g} + s \, \boldsymbol{\delta}_1 \boldsymbol{\delta}_2$ , где s — величина сдвига ( $s = \operatorname{tg} \psi, \psi$  — угол сдвига),  $\boldsymbol{\delta}_1$  — единичный вектор направления сдвига,  $\boldsymbol{\delta}_2$  — единичный вектор нормали к поверхности сдвига. Сравнивая это выражение с представленным в правой части (11) в скобках, заключаем, что

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \boldsymbol{\tau} = \hat{\boldsymbol{a}}/|\hat{\boldsymbol{a}}|, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \boldsymbol{N} = (\mathbf{U}_j^{-1} \cdot \boldsymbol{n})/|\mathbf{U}_j^{-1} \cdot \boldsymbol{n}|, \quad s = |\hat{\boldsymbol{a}}||\mathbf{U}_j^{-1} \cdot \boldsymbol{n}|.$$
(12)

Как отмечено ранее,  $\tau$  является единичным вектором направления сдвига, и это находится в полном соответствии со смыслом вектора  $\delta_1$ . Вектор  $N = (\mathbf{U}_j^{-1} \cdot \boldsymbol{n})/|\mathbf{U}_j^{-1} \cdot \boldsymbol{n}|$  – единичный вектор нормали к поверхности, на которой градиент места испытывает скачок, но не в начальной конфигурации  $\kappa_0$ , в которой эта нормаль была  $\boldsymbol{n}$ , а в конфигурации  $\kappa_j$ . Действительно, ориентированные элементарные площадки  $\boldsymbol{n} dS_0$  в начальной конфигурации  $\kappa_0$  и N dS в какой-либо другой конфигурации  $\kappa_*$  связаны соотношением  $N dS = Jn \cdot \mathbf{F}_*^{-1} dS_0 = J\mathbf{F}_*^{-\top} \cdot n dS_0$  (см., например, [22,25]), где  $J = I_3(\mathbf{F}_*)$  третий главный инвариант градиента места  $\mathbf{F}_*$ , описывающий относительное изменение объема  $dV_*/dV_0$  в конфигурации  $\kappa_*$ . Тогда  $|\mathbf{N} dS| = J |\mathbf{F}_*^{-\top} \cdot n| dS_0$ , откуда следует, что  $\mathbf{N} = \mathbf{N} dS/|\mathbf{N} dS| = \mathbf{F}_*^{-\top} \cdot n/|\mathbf{F}_*^{-\top} \cdot n|$ , и полагая, что  $\mathbf{F}_* = \mathbf{U}_*, \kappa_*$  совпадает с  $\kappa_j$  ( $\mathbf{U}_* = \mathbf{U}_j$ ) и учитывая симметрию тензора  $\mathbf{U}_j$ , имеем  $\mathbf{N} = \mathbf{U}_j^{-1} \cdot n/|\mathbf{U}_j^{-1} \cdot n|$ . В общем случае вектор n не ортогонален вектору  $\boldsymbol{\tau}$ , в отличие от вектора  $\mathbf{N}$ . Последнее следует из ортогональности векторов  $\delta_1$  and  $\delta_2$ . Ортогональность векторов  $\boldsymbol{\tau}$  и  $\mathbf{N}$  будет также продемонстрирована ниже.

4. Общие решения уравнения двойникования. В этом разделе показано, что для пары вариантов мартенсита, рассматриваемых в статье, существует решение уравнения двойникования, в результате чего определяются плоскость сдвига, направление сдвига и величина сдвига, т.е. параметры, характеризующие сдвиг, происходящий в мартенситной пластине при возникновении двойника. Здесь также обсуждается еще одна особенность сплава, которая по какой-то причине почти не нашла отражения в публикациях, а именно расположение орторомбических ячеек в элементах двойника, образованного из мартенситной пластины.

Вернемся к уравнениям (9), (10), которые называются уравнениями совместности деформаций, или уравнениями двойникования. Пара из двух различных вариантов мартенсита с деформациями Бейна  $\mathbf{U}_i$  и  $\mathbf{U}_j$ , образующих двойник, обозначается как (i:j). Причем j — элемент, из которого образуется двойник (формируется элемент i), или к которому присоединяется элемент i, образуя двойник; j — основной, материнский элемент. Если существует симметричный ортогональный тензор  $\mathbf{O}$ ,  $\mathbf{O} = \mathbf{O}^{\top}$ , выполняющий вращение на 180° вокруг оси  $\mathbf{p}$ ,  $|\mathbf{p}| = 1$ ,  $\mathbf{O} = \mathbf{O}(180^\circ, \mathbf{p})$ , и принадлежащий группе симметрии структурной ячейки аустенита  $\mathcal{P}_a$ ,  $\mathbf{O} \in \mathcal{P}_a$ , такой, что  $\mathbf{U}_i = \mathbf{O} \cdot \mathbf{U}_j \cdot \mathbf{O}$ ( $\mathbf{U}_j = \mathbf{O} \cdot \mathbf{U}_i \cdot \mathbf{O}$ ), тогда уравнение двойникования (9) имеет следующие два решения (см. [1,2]):

$$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{p}, \ \hat{\boldsymbol{a}} = 2\left(\frac{\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{p}}{|\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{p}|^{2}} - \mathbf{U}_{j} \cdot \boldsymbol{p}\right), \ \mathbf{R}_{ij} = \left[-\mathbf{g} + 2\frac{(\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{p})(\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{p})}{|\mathbf{U}_{j}^{-1} \cdot \boldsymbol{p}|^{2}}\right] \cdot \mathbf{O}, \ (13)$$

$$\boldsymbol{n} = \frac{2}{\rho} \left( \boldsymbol{p} - \frac{\mathbf{U}_j^2 \cdot \boldsymbol{p}}{|\mathbf{U}_j \cdot \boldsymbol{p}|^2} \right), \ \hat{\boldsymbol{a}} = \rho(\mathbf{U}_j \cdot \boldsymbol{p}), \ \mathbf{R}_{ij} = \left[ -\mathbf{g} + 2\frac{(\mathbf{U}_j \cdot \boldsymbol{p})(\mathbf{U}_j \cdot \boldsymbol{p})}{|\mathbf{U}_j \cdot \boldsymbol{p}|^2} \right] \cdot \mathbf{O}.$$
(14)

Здесь  $\rho$  — константа, определяемая из условия, что вектор n — единичный вектор. Эти решения единственные с точностью до одновременной замены  $\hat{a}$  на  $-\hat{a}$  и n на -n. Двойник, описываемый соотношениями (13), называется двойником типа I, а описываемый соотношениями (14) — типа II. Как показано в [26] и отмечено в [1], если существуют два 180° вращения, удовлетворяющих условию  $\mathbf{U}_i = \mathbf{O} \cdot \mathbf{U}_j \cdot \mathbf{O}$ , то решение первого типа, соответствующие одному вращению, совпадает с решением второго типа, соответствующим другому вращению.

Примечание 4. У двойника типа I, который называется нормальным двойником [27], нормаль к плоскости S, разделяющей его элементы, совпадает с осью вращения p указанного выше тензора  $\mathbf{O} = \mathbf{O}(180^\circ, p)$ . Кристаллическая ячейка одного элемента двойника преобразуется в кристаллическую ячейку другого элемента двойника поворотом на  $180^{\circ}$  вокруг нормали к поверхности, разделяющей эти элементы [5]. У двойника типа II, который называется параллельным двойником [27], ось p тензора O параллельна плоскости S. Кристаллическая ячейка одного элемента двойника преобразуется в кристаллическую ячейку другого элемента двойника поворотом на  $180^{\circ}$  вокруг вектора, параллельного плоскости, разделяющей эти элементы [5]. Если решетки связаны между собой обоими вращениями, то двойник называется смешанным.

В работе [4] приведены тензоры  $\mathbf{O} = \mathbf{O}(180^{\circ}, \boldsymbol{p})$ , преобразующие  $\mathbf{U}_i$  в  $\mathbf{U}_j$  в соответствии с выражением  $\mathbf{U}_i = \mathbf{O} \cdot \mathbf{U}_j \cdot \mathbf{O}$ , и ниже они представлены в таблице. Из таблицы следует, что теоретически возможно образование 30 двойников.

(		(*					
p	0	$\mathbf{U}_1$	$\mathbf{U}_2$	$\mathbf{U}_3$	$\mathbf{U}_4$	$\mathbf{U}_5$	$\mathbf{U}_6$
$(e_1 + e_2)/\sqrt{2}$	$e_1e_2 + e_2e_1 - e_3e_3$	1	2	6	5	4	3
$(e_1 - e_2)/\sqrt{2}$	$-e_1e_2 - e_2e_1 - e_3e_3$	1	2	5	6	3	4
$(\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_3)/\sqrt{2}$	$e_1e_3 - e_2e_2 + e_3e_1$	4	3	2	1	5	6
$(e_1 - e_3)/\sqrt{2}$	$-e_1e_3 - e_2e_2 - e_3e_1$	3	4	1	2	5	6
$(oldsymbol{e}_2+oldsymbol{e}_3)/\sqrt{2}$	$-e_1e_1+e_2e_2+e_3e_2$	6	5	3	4	2	1
$(\boldsymbol{e}_2-\boldsymbol{e}_3)/\sqrt{2}$	$-e_1e_1 - e_2e_2 - e_3e_2$	5	6	3	4	1	2
$oldsymbol{e}_1$	$e_1e_1 - e_2e_2 - e_3e_3$	2	1	3	4	6	5
$oldsymbol{e}_2$	$-e_1e_1+e_2e_2-e_3e_3$	2	1	4	3	5	6
$oldsymbol{e}_3$	$-e_1e_1 - e_2e_2 + e_3e_3$	1	2	4	3	6	5

Векторы  $\boldsymbol{p}$  и тензоры  $\mathbf{O} = \mathbf{O}(180^{\circ}, \boldsymbol{p})$ , преобразующие  $\mathbf{U}_{j}$  (из заголовка) в  $\mathbf{U}_{i}$ (*i*— номер в таблице) [Vectors  $\boldsymbol{p}$  and tensors  $\mathbf{O} = \mathbf{O}(180^{\circ}, \boldsymbol{p})$ , transforming  $\mathbf{U}_{j}$ (from the header) into  $\mathbf{U}_{i}$  (*i*— index in the table)]

## 5. Примеры решения уравнения двойникования.

5.1. Двойник (i:j) = (3:4). Рассмотрим двойник (i:j) = (3:4)(восьмая после заголовка строка в таблице, шестой столбец) и построим решение первого типа (13). Из выражений (7)

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_3 &= \beta \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 + \zeta \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 + \eta (\boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_2) + \zeta \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3, \\ \mathbf{U}_4 &= \beta \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 + \zeta \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 - \eta (\boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_2) + \zeta \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3; \end{aligned}$$

из выражения (4) ортогональный тензор **O**, осуществляющий поворот на 180° вокруг вектора  $p = e_2$ , принимает вид  $\mathbf{O} = -e_1e_1 + e_2e_2 - e_3e_3$ , и тогда тензор  $\mathbf{U}_4$  переводится в тензор  $\mathbf{U}_3$  соотношением  $\mathbf{U}_3 = \mathbf{O} \cdot \mathbf{U}_4 \cdot \mathbf{O}$ , что легко показать простой подстановкой. Это полностью соответствует данным, приведенным в указанных выше строке и столбце таблицы. Составляющие  $U_{ij}^{(-1)}$  тензора  $\mathbf{U}_4^{-1}$ , обратного тензору  $\mathbf{U}_4$  с составляющими  $U_{ij}$ , определяются известным соотношением  $U_{ij}^{(-1)} = (1/U)(\partial U/\partial U_{ij})$ , где  $U = \det U_{ij}$ . В нашем случае U = $= U_{11}(U_{22}U_{33} - U_{23}U_{32}) = \beta(\zeta^2 - \eta^2)$  и

$$\mathbf{U}_{4}^{-1} = \frac{1}{\beta} \boldsymbol{e}_{1} \boldsymbol{e}_{1} + \frac{\zeta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{e}_{2} + \frac{\eta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} (\boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{e}_{3} + \boldsymbol{e}_{3} \boldsymbol{e}_{2}) + \frac{\zeta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{3} \boldsymbol{e}_{3}.$$

В результате в  $(13)^4$ 

$$\mathbf{U}_{4} \cdot \boldsymbol{p} = \zeta \boldsymbol{e}_{2} - \eta \boldsymbol{e}_{3}, \qquad \mathbf{U}_{4}^{-1} \cdot \boldsymbol{p} = \frac{\zeta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{2} + \frac{\eta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{3}, \\ |\mathbf{U}_{4}^{-1} \cdot \boldsymbol{p}| = \frac{\sqrt{\zeta^{2} + \eta^{2}}}{|\zeta^{2} - \eta^{2}|}, \quad \hat{\boldsymbol{a}} = 4 \frac{\zeta \eta}{\zeta^{2} + \eta^{2}} (-\eta \boldsymbol{e}_{2} + \zeta \boldsymbol{e}_{3}), \quad |\hat{\boldsymbol{a}}| = 4 \frac{\zeta |\eta|}{\sqrt{\zeta^{2} + \eta^{2}}}$$
(15)

и, в соответствии с (12),

$$oldsymbol{\delta}_1 = oldsymbol{ au} = rac{-\eta oldsymbol{e}_2 + \zeta oldsymbol{e}_3}{\sqrt{\zeta^2 + \eta^2}}, \quad oldsymbol{\delta}_2 = oldsymbol{N} = rac{\zeta oldsymbol{e}_2 + \eta oldsymbol{e}_3}{\sqrt{\zeta^2 + \eta^2}}, \quad s = rac{4\zeta |\eta|}{|\zeta^2 - \eta^2|}$$

Поскольку  $\zeta = (\alpha + \gamma)/2, \eta = (\alpha - \gamma)/2$  (см. (3)), эти выражения принимают вид

$$\delta_1 = \boldsymbol{\tau} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(\gamma - \alpha)\boldsymbol{e}_2 + (\alpha + \gamma)\boldsymbol{e}_3}{\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2}}, \quad \delta_2 = \boldsymbol{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(\alpha + \gamma)\boldsymbol{e}_2 + (\alpha - \gamma)\boldsymbol{e}_3}{\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2}},$$
$$s = \frac{|\alpha^2 - \gamma^2|}{\alpha\gamma}.$$

Учитывая, что начальные длины  $l_1$  и  $l_2$ , к которым относятся конечные длины  $\tilde{l}_1$  и  $\tilde{l}_2$  для величин  $\alpha = \tilde{l}_1/l_1$  и  $\gamma = \tilde{l}_2/l_2$ , одни и те же  $(l_1 = l_2 = l, \text{ см. текст после рис. 2})$ , полученные соотношения можно переписать так:

$$\delta_{1} = \boldsymbol{\tau} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(\tilde{l}_{2} - \tilde{l}_{1})\boldsymbol{e}_{2} + (\tilde{l}_{1} + \tilde{l}_{2})\boldsymbol{e}_{3}}{\sqrt{\tilde{l}_{1}^{2} + \tilde{l}_{2}^{2}}},$$
  

$$\delta_{2} = \boldsymbol{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(\tilde{l}_{1} + \tilde{l}_{2})\boldsymbol{e}_{2} + (\tilde{l}_{1} - \tilde{l}_{2})\boldsymbol{e}_{3}}{\sqrt{\tilde{l}_{1}^{2} + \tilde{l}_{2}^{2}}}, \quad s = \frac{|\tilde{l}_{1}^{2} - \tilde{l}_{2}^{2}|}{\tilde{l}_{1}\tilde{l}_{2}}.$$
(16)

Отсюда следует, что плоскость, разделяющая элементы двойника, и кинематика сдвига полностью определяются размерами сечения орторомбической ячейки, перпендикулярного оси  $\tilde{e}_3$ . Рис. 4 является повернутой в плоскости частью рис. 3. На нем представлены ситуация [2], но не для тензора U<sub>2</sub>, а для тензора U<sub>4</sub>, и ситуация [1], но не для тензора U<sub>1</sub>, а для тензора U<sub>3</sub>. Тензору U<sub>4</sub> здесь соответствует прямоугольное сечение *ABCD* орторомбической ячейки, а тензору U<sub>3</sub> сечение -A'B'C'D'. При этом, согласно сказанному для этих тензоров в примечании 3, осуществлена следующая замена векторов, изображенных на рис. 3:  $e_1 \Rightarrow e_2$ ,  $e_2 \Rightarrow e_3$ ,  $e_3 \Rightarrow e_1$ . Векторы  $\tilde{e}_i$ , i = 1, 2, 3, на рис. 4 не показаны, т.к. согласно примечанию 1 они могут занимать два противоположных направления, но указаны размеры ячейки:  $\tilde{l}_1 -$ длина вдоль вектора  $\tilde{e}_1$ . По

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Ниже в статье рассматриваются деформации Коши—Грина, при определении которых тензор  $\mathbf{R}_{ij}$  не используется (в отличие от деформаций Альманзи). Поэтому конкретное выражение для  $\mathbf{R}_{ij}$  в статье не приводится.



Рис. 4. Положение сечений орторомбических кристаллических ячеек мартенсита относительно сечения кубической ячейки аустенита, нормали к плоскости сдвига и направление вектора сдвига в орторомбических ячейках

[Figure 4. The position of sections of orthorhombic crystal cells of martensite relative to the section of the cubic cell of austenite, the normal to the slip plane, and the direction of the slip vector in orthorhombic cells]

угол  $\varphi$ , получаем, что  $\tilde{l}_1/\sqrt{\tilde{l}_1^2 + \tilde{l}_2^2} = \sin \varphi$ ,  $\tilde{l}_2/\sqrt{\tilde{l}_1^2 + \tilde{l}_2^2} = \cos \varphi$ ,  $\tilde{l}_1/\tilde{l}_2 = \operatorname{tg} \varphi$ , и выражения (16) принимают вид

$$\boldsymbol{\delta}_{1} = \boldsymbol{\tau} = \frac{C-S}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_{2} + \frac{S+C}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_{3}, \ \boldsymbol{\delta}_{2} = \boldsymbol{N} = \frac{S+C}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_{2} + \frac{S-C}{\sqrt{2}}\boldsymbol{e}_{3}, \ s = 2|\operatorname{ctg} 2\varphi|,$$
(17)

где  $C = \cos \varphi, \ S = \sin \varphi.$ 

Отсюда, во-первых, сразу следует, что  $\delta_1 \cdot \delta_2 = \tau \cdot N = 0$ , т.е. эти векторы ортогональны, а во-вторых, — что вектор  $\delta_1 = \tau$  направлен по диагонали прямоугольника *ABCD* из точки *D* в точку *B*. Действительно, учитывая, что показанная на рис. 4 ось прямоугольника (вектор  $\mathbf{k}_2$ ) направлена под углом в 45° к векторам  $\mathbf{e}_2$  и  $\mathbf{e}_3$ , единичный вектор  $\overrightarrow{DB}/|\overrightarrow{DB}|$  можно представить так:

$$\frac{\overrightarrow{DB}}{|\overrightarrow{DB}|} = \cos(45^\circ + \varphi) \, \boldsymbol{e}_2 + \sin(45^\circ + \varphi) \, \boldsymbol{e}_3 = \frac{C - S}{\sqrt{2}} \, \boldsymbol{e}_2 + \frac{S + C}{\sqrt{2}} \, \boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{\delta}_1 = \boldsymbol{\tau}.$$

Здесь учитываются известные соотношения для  $\sin(\theta_1 + \theta_2)$  и  $\cos(\theta_1 + \theta_2)$ , а также, что  $\sin 45^\circ = \cos 45^\circ = 1/\sqrt{2}$ . Поворачивая единичный вектор  $\overrightarrow{DB}/|\overrightarrow{DB}|$  вокруг вектора  $e_1$  на 90° по часовой стрелке, получаем единичный вектор  $\delta_2 = N$ . Действительно, из (4) имеем  $\mathbf{O}(-90^\circ, e_1) = e_1e_1 + e_2e_3 - e_3e_2$  и тогда  $\mathbf{O}(-90^\circ, e_1) \cdot \boldsymbol{\tau} = N$ .

Как экспериментально обосновано, но без должного математического доказательства, сдвиг в кристалле обычно происходит вдоль атомных плоскостей с наиболее плотной упаковкой атомов, когда действующие на этих плоскостях тангенциальные силы достигают определенных значений. Плоскость, разделяющая элементы двойника (диагональ прямоугольника ABCDна рис. 4), и есть одна из таких плоскостей орторомбической ячейки. Сдвиг произойдет, когда касательное усилие на поверхности с внешней нормалью Nдостигнет критической величины, определяемой для конкретного материала из эксперимента, и будет направлено по вектору  $\tau$ .

Как уже отмечалось ранее, градиент места  $\mathbf{f}$ , описывающий процесс простого сдвига, представляется в виде  $\mathbf{f} = \mathbf{g} + \hat{a} \mathbf{n} \cdot \mathbf{U}_{j}^{-1}$  (см. (10)) или в виде  $\mathbf{f} = \mathbf{g} + s \boldsymbol{\tau} \mathbf{N}$  (см. (11)), или как  $\mathbf{f} = \mathbf{g} + s \boldsymbol{\delta}_1 \boldsymbol{\delta}_2$  (см. абзац перед соотношением (12)). Только первое из этих выражений не содержит модуль величины, что удобно в дальнейших математических преобразованиях. Поэтому при построении тензора деформаций Коши—Грина  $\mathbf{E} = (\mathbf{f}^\top \cdot \mathbf{f} - \mathbf{g})/2$  для данного процесса используется именно первое соотношение. Кроме того, для этих математических построений оказалось очень эффективным осуществленное выше введение угла  $\varphi$ , что позволило оперировать с тригонометрическими функциями и известными связями между ними. В результате для присутствующих в (10) величин, определенных выражениями (15), получаем

$$\mathbf{f} = \mathbf{g} + Ct_2[C_2(-\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3) + (S - C)^2\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 - (S + C)^2\mathbf{e}_3\mathbf{e}_2],$$
  
$$\mathbf{E} = Ct_2^2(\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3) - \frac{Ct_2}{S_2}(\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_2).$$
 (18)

Здесь  $Ct_2 = \operatorname{ctg} 2\varphi$ ,  $S_2 = \sin 2\varphi$  и, как было введено ранее,  $S = \sin \varphi$ ,  $C = \cos \varphi$ . Учитывая, что  $S = \tilde{l}_1 / \sqrt{\tilde{l}_1^2 + \tilde{l}_2^2}$ ,  $C = \tilde{l}_2 / \sqrt{\tilde{l}_1^2 + \tilde{l}_2^2}$  (см. текст перед (17)), приходим к тому, что  $Ct_2 = (\tilde{l}_2^2 - \tilde{l}_1^2)/(2\tilde{l}_1\tilde{l}_2)$ ,  $Ct_2/S_2 = (\tilde{l}_2^4 - \tilde{l}_1^4)/(4\tilde{l}_1^2\tilde{l}_2^2)$ . Тогда тензор деформаций **E** в (18) определяется размерами показанного на рис. 4 сечения орторомбической ячейки:

$$\mathbf{E} = \frac{(\tilde{l}_2^2 - \tilde{l}_1^2)^2}{4\tilde{l}_1^2\tilde{l}_2^2} (\boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3) + \frac{(\tilde{l}_1^4 - \tilde{l}_2^4)}{4\tilde{l}_1^2\tilde{l}_2^2} (\boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_2).$$
(19)

Эта деформация, полученная в рамках теории двойникования, соответствует простому сдвигу материала среды. Среда же в данном случае состоит из орторомбических ячеек кристалла, изменение положения которых относительно начального и вызывает деформацию. Поэтому, чтобы эта структурная деформация совпадала с деформацией простого сдвига (19), кристалл, в который преобразуется материнский его образ при деформации сдвига, должен занимать определенное положение по отношению к своему начальному образу. Именно такое взаимное расположение кристаллов, привязанное к конкретному пространству, представлено на рис. 4. Здесь кристаллическая орторомбическая ячейка мартенсита — материнская ячейка (прямоугольник ABCD) преобразуется в результате простого сдвига в кристаллическую орторомбическую ячейку мартенсита (прямоугольник A'B'C'D'). Сдвиг же произойдет, когда касательное усилие на диагонали прямоугольника ABCD с внешней нормалью N достигнет определенной величины и будет направлено по вектору  $\tau$ . Покажем, что тензор деформации при преобразовании орторомбической ячейки ABCD в орторомбическую ячейку A'B'C'D' такой же, как и при простом сдвиге, и представляется выражением (19). Действительно, учитывая показанное на рис. 4 взаимное положение упомянутых двух кристаллических ячеек, вытекающее из сказанного при обсуждении рис. 2 и в примечании 3, а также из того, что прямоугольник A'B'C'D' есть повернутый на  $180^{\circ}$  вокруг оси  $e_2$  прямоугольник ABCD (вектор p в соотношениях (15) есть вектор  $e_2$ ), заключаем, что элементы, которые в материнской ячейке ABCDимели в направлении  $k_1$  длину  $\tilde{l}_1$ , а в направлении  $k_2$  длину  $\tilde{l}_2$ , в ячейке A'B'C'D' имеют в тех же направлениях длины  $\tilde{l}_2$  и  $\tilde{l}_1$ , соответственно. Такое изменение в длинах определяет в базисе  $k_i$ , i = 1, 2, тензор деформации

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{11} \boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_1 + \varepsilon_{22} \boldsymbol{k}_2 \boldsymbol{k}_2, \quad \varepsilon_{11} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{l}_2^2 - \tilde{l}_1^2}{\tilde{l}_1^2}, \quad \varepsilon_{22} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{l}_1^2 - \tilde{l}_2^2}{\tilde{l}_2^2}. \tag{20}$$

Учитывая, что  $\mathbf{k}_1 = (1/\sqrt{2})(\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3), \mathbf{k}_2 = (1/\sqrt{2})(\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3)$ , приходим к тому, что в базисе  $\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$  координатные составляющие тензоров  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и **E** полностью совпадают (тензор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  принимает вид (19)), т.е. тензоры  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и **E** равны как тензорные объекты.

Из изложенного вытекает, что одновременно и нераздельно в материале существуют два двойника: деформационный, связанный с деформацией простого сдвига, и структурный, связанный со взаимным положением в пространстве ячеек орторомбического кристалла, оси которых (векторы  $k_1$  и  $k_2$ , показанные на рис. 4 штриховыми линиями) составляют угол в 90°. Элементы структурного двойника определенным образом должны быть расположены в элементах деформационного двойника. Деформационный же двойник удобно трактовать как излом первоначально прямой мартенситной пластины, направленной вдоль вектора N (материнской пластины), на угол  $\psi = \arctan g s$ относительно этого вектора в сторону вектора  $\tau$ , являющегося границей излома (см. рис. 5). Длины сторон прямоугольника — нужного нам сечения орторомбической ячейки,  $\tilde{l}_1 = 0.2194$  нм и  $\tilde{l}_2 = 0.2111$  нм (см. текст после соотношения (1)). Тогда (см. (16))  $s = |\tilde{l}_1^2 - \tilde{l}_2^2|/(\tilde{l}_1\tilde{l}_2) = 0.07715$  и излом первоначально прямой мартенситной пластины происходит на угол  $\psi \approx 4.4^\circ$ , как представлено на рис. 5. Угол излома совпадает с углом сдвига, что, как будет показано ниже, выполняется только для рассматриваемого случая. Деформация, возникающая при этом, определяется соотношением

$$\mathbf{E} = (s/2)(\tau N + N\tau) + (s^2/2)NN = 0.0386(\tau N + N\tau) + 0.003NN.$$
(21)

Элементами структурного двойника являются прямоугольники (сечения орторомбической ячейки), оси которых повернуты на 90° друг относительно друга. Каждый из этих элементов определенным образом расположен в соответствующем элементе деформационного двойника. Угол, определяющий положение диагонали в прямоугольнике рассматриваемого сечения орторомбической ячейки (см. рис. 4 и 5), определяется из выражения tg  $\varphi = \tilde{l}_1/\tilde{l}_2$ . Для указанных выше значений длин tg  $\varphi = 1.0393$  и  $\varphi \approx 46.1^\circ$ . Это позволяет

ориентировать прямоугольник (вектор  $k_2$ , являющийся его осью) относительно вектора  $\tau$  (а значит и относительно оси N) в материнской мартенситной пластине. Учитывая, что ось второго элемента структурного двойника  $k_1$  составляет с  $k_2$  угол в 90° в плоскости векторов  $\tau$  и N, определяем положение этого элемента структурного двойника во втором элементе деформационного двойника. На рис. 5 показано взаимное расположение элементов этих двух двойников. Соотношением (20) определялся тензор структурной деформации в базисе  $k_1$ ,  $k_2$ . Для указанных значений  $\tilde{l}_1$  и  $\tilde{l}_2$  этот тензор принимает конкретный вид:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -0.0371 \boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_1 + 0.0401 \boldsymbol{k}_2 \boldsymbol{k}_2. \tag{22}$$

Учитывая, что  $\mathbf{k}_1 = \cos 46.1^{\circ} \mathbf{N} - \sin 46.1^{\circ} \mathbf{\tau} = 0.6934 \mathbf{N} - 0.72055 \mathbf{\tau}$ ,  $\mathbf{k}_2 =$ =  $\sin 46.1^{\circ} \mathbf{N} + \cos 46.1^{\circ} \mathbf{\tau} = 0.72055 \mathbf{N} + 0.6934 \mathbf{\tau}$ , приходим к тому, что в базисе  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{\tau}$  координатные составляющие тензоров  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и  $\mathbf{E}$  полностью совпадают (тензор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  принимает вид (21)), т.е. тензоры  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и  $\mathbf{E}$  равны как тензорные объекты.

Главные оси орторомбической ячейки мартенсита (прямоугольного параллелепипеда) являются тремя двукратными осями симметрии данного кристалла. С этим связана анизотропия механических свойств ячейки, девять констант такой анизотропии приведены в [5,6,24,28]. Оси ячеек кристалла поразному ориентированы в элементах деформационного двойника (см. рис. 5), что приводит к различию в механических свойствах в этих элементах для одного и того же направления в них. Кроме того, ни одна из осей кристалла на рис. 5 не совпадает с главными осями мартенситных пластин, образующих деформационный двойник. На рис. 5 мартенситная пластина была выбрана так, чтобы ее главная ось совпадала с вектором N. Это позволило просто определить угол излома этой пластины и описать формирование деформационного двойника. Выбирая теперь мартенситную пластину так, чтобы ее главная ось совпадала с направлением одной из осей кристалла, как показано на рис. 6, удается, как нам кажется, упростить решение анизотропной задачи. Это, конечно, непринципиально, но удобно.

В базисе  $k_1$ ,  $k_2$ , показанном на рис. 6, *a*, структурная деформация  $\varepsilon$  определяется соотношением (22). В базисе  $\tau$ , N деформация сдвига определяется соотношением (21). Из выражений, связывающих базисы  $k_1$ ,  $k_2$  и  $\tau$ , N (см. текст после (22)), имеем  $N = 0.6934k_1 + 0.72055k_2$ ,  $\tau = -0.72055k_1 + 0.6934k_2$ ,



Рис. 5. Деформационный двойник и положение в нем элементов структурного двойника; угол сдвига совпадает с углом излома мартенситной пластины

[Figure 5. Deformation twin and the position of structural twin elements within it; the shear angle coincides with the angle of the martensitic plate's kink]



Рис. 6. (а) Деформационный двойник и положение в нем элементов структурного двойника; угол сдвига не совпадает с углом излома мартенситной пластины; (b) к определению связи между углами сдвига и излома; AC на рис. (a) и (b) одна и та же материальная прямая

[Figure 6. (a) Deformation twin and the position of structural twin elements within it; the shear angle does not coincide with the angle of the martensitic plate's kink; (b) Regarding the definition of the relationship between the shear and fracture angles; AC in figures (a) and (b) is the same material line]

и тогда в базисе  $k_1$ ,  $k_2$  выражение (21) принимает вид (22), что и должно быть (структурная и сдвиговая деформации совпадают). Физический смысл соотношения (22) легко объяснить, используя рис. 6, а. Кристаллические ячейки, которые в материнской мартенситной пластине имели наибольшую длину в вертикальном на рис. 6, а положении, преобразуются в ячейки, имеющие наибольшую длину в горизонтальном положении. Среда, содержащая эти ячейки, испытывает сокращение в вертикальном направлении и удлинение в горизонтальном. Поэтому деформация по оси  $k_1$  отрицательная, а по оси  $k_2$ положительная. Размеры рассматриваемого сечения кристаллической ячейки оказались такими, что в тензоре деформаций (22)  $\varepsilon_{11} \approx -3.7\%$ ,  $\varepsilon_{22} \approx 4.0\%$ .

Используя рис. 6, b, установим теперь связь между углом сдвига  $\psi$  и углом излома мартенситной пластины  $\chi$ . В базисе  $\tau$ , N простой сдвиг на величину s, которой соответствует угол  $\psi$ , приводит к тому, что точка E сдвигается в направлении вектора  $\tau$  и переходит в точку D. Отрезки AE и DE, длины которых обозначим как AE = a, DE = b, образуют прямой угол. Все точки, лежащие на продолжении отрезка DE, смещаются при простом сдвиге вдоль этого отрезка на величину b. В результате точка C переходит в точку B и BC = b. Нам необходимо определить угол  $\chi$ , принадлежащий треугольнику ABC. Обозначив AB = c, AC = d, используем для этого теорему косинусов для треугольника:

$$b^2 = c^2 + d^2 - 2cd\cos\chi,$$
 где  $b = a \operatorname{tg} \psi.$  (23)

Из прямоугольного треугольника ACE находим, что  $d = a/\cos(\pi/2 - \varphi) = a/\sin \varphi$  и  $CE = p = a \operatorname{tg}(\pi/2 - \varphi) = a \operatorname{ctg} \varphi$ . Из прямоугольного треугольника ABE имеем  $c^2 = a^2 + (b+p)^2$ . В результате все величины, входящие в (23), определяются через длину a и известные углы  $\varphi$  и  $\psi$ , и из этого выражения находим  $\cos \chi$ :

$$\cos \chi = \frac{c^2 + d^2 - b^2}{2cd} = \frac{2 + s \sin 2\varphi}{2\sqrt{1 + s \sin 2\varphi + s^2 \sin^2 \varphi}}.$$
 (24)

Для значения s = 0.07715, соответствующего углу сдвига  $\psi \approx 4.4^{\circ}$  (см. абзац перед соотношением (21)), и значения  $\varphi \approx 46.1^{\circ}$ , определяющего плоскость сдвига в кристаллической ячейке (см. абзац после соотношения (21)), соз  $\chi = 0.999254$ , и тогда угол излома мартенситной пластины, показанный на рис. 6, а,  $\chi \approx 2.2^{\circ}$ .

Определим из выражения (24) длину c, дающую при фиксированных длинах d и b максимальный угол  $\chi$  (минимум  $\cos \chi$ ). Для этого, продифференцировав (24) по c,  $d(\cos \chi)/dc = [1 - (d^2 - b^2)/c^2]/(2d)$ , будем иметь уравнение  $1 - (d^2 - b^2)/c^2 = 0$ , откуда следует, что  $c^2 = d^2 - b^2$ , или  $d^2 = c^2 + b^2$ . Так как  $d^2(\cos \chi)/dc^2 > 0$ , полученное решение соответствует минимуму  $\cos \chi$ , а значит, максимуму угла  $\chi$ . При этом отрезок длины b, исходящий на рис. 6, b из точки C, должен быть перпендикулярен отрезку AB. В этой ситуации  $\sin \chi = b/d = s \sin \varphi = 0.07715 \cdot 0.72055 = 0.0556$  и  $\chi = 3.19^{\circ}$ . Поэтому для расположения отрезка BC = b, показанного на рис. 6, b, полученное выше меньшее значение угла  $\chi$  ( $\chi \approx 2.2^{\circ}$ ) является в результате проведенного анализа вполне обоснованным.

**5.2. Двойник** (i:j) = (4:3). Рассмотрим теперь двойник (i:j) = (4:3) (восьмая после заголовка строка в таблице, пятый столбец) и построим решение первого типа (13). Из выражений (7)

$$\begin{split} \mathbf{U}_3 &= \beta \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 + \zeta \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 + \eta (\boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_2) + \zeta \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3, \\ \mathbf{U}_4 &= \beta \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1 + \zeta \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2 - \eta (\boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_2) + \zeta \boldsymbol{e}_3 \boldsymbol{e}_3, \end{split}$$

из выражения (4) ортогональный тензор **O**, осуществляющий поворот на 180° вокруг вектора  $p = e_2$ , принимает вид  $\mathbf{O} = -e_1e_1 + e_2e_2 - e_3e_3$ , и тогда тензор  $\mathbf{U}_3$  переводится в тензор  $\mathbf{U}_4$  соотношением  $\mathbf{U}_4 = \mathbf{O} \cdot \mathbf{U}_3 \cdot \mathbf{O}$ , что легко показать простой подстановкой. Это полностью соответствует данным, приведенным в указанных выше строке и столбце таблицы. Составляющие  $U_{ij}^{(-1)}$  тензора  $\mathbf{U}_3^{-1}$ , обратного тензору  $\mathbf{U}_3$  с составляющими  $U_{ij}$ , определяем аналогично предыдущему случаю и в результате имеем

$$\mathbf{U}_{3}^{-1} = \frac{1}{\beta} \boldsymbol{e}_{1} \boldsymbol{e}_{1} + \frac{\zeta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{e}_{2} - \frac{\eta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} (\boldsymbol{e}_{2} \boldsymbol{e}_{3} + \boldsymbol{e}_{3} \boldsymbol{e}_{2}) + \frac{\zeta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{3} \boldsymbol{e}_{3}.$$

Тогда в (13)

$$\mathbf{U}_{3} \cdot \boldsymbol{p} = \zeta \boldsymbol{e}_{2} + \eta \boldsymbol{e}_{3}, \quad \mathbf{U}_{3}^{-1} \cdot \boldsymbol{p} = \frac{\zeta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{2} - \frac{\eta}{\zeta^{2} - \eta^{2}} \boldsymbol{e}_{3},$$
$$\mathbf{U}_{3}^{-1} \cdot \boldsymbol{p} = \frac{\sqrt{\zeta^{2} + \eta^{2}}}{|\zeta^{2} - \eta^{2}|}, \quad \hat{\boldsymbol{a}} = -4\frac{\zeta\eta}{\zeta^{2} + \eta^{2}}(\eta \boldsymbol{e}_{2} + \zeta \boldsymbol{e}_{3}), \quad |\hat{\boldsymbol{a}}| = 4\frac{\zeta|\eta|}{\sqrt{\zeta^{2} + \eta^{2}}}$$

и, в соответствии с (12),

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \boldsymbol{\tau} = -\frac{\eta \boldsymbol{e}_2 + \zeta \boldsymbol{e}_3}{\sqrt{\zeta^2 + \eta^2}}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \boldsymbol{N} = \frac{\zeta \boldsymbol{e}_2 - \eta \boldsymbol{e}_3}{\sqrt{\zeta^2 + \eta^2}}, \quad \boldsymbol{s} = \frac{4\zeta |\eta|}{|\zeta^2 - \eta^2|}.$$
 (25)

На рис. 4 тензору U<sub>3</sub> соответствует сечение A'B'C'D' орторомбической кристаллической ячейки. Чтобы различать векторы  $\delta_1 = \tau$  и  $\delta_2 = N$ , относящиеся на рис. 4 к ячейкам ABCD и A'B'C'D', будем ниже для последней помечать эти величины штрихами. Вспоминая, что  $\zeta = (\alpha + \gamma)/2$ ,  $\eta = (\alpha - \gamma)/2$ , учитывая, что начальные длины  $l_1$  и  $l_2$ , к которым относятся конечные длины  $\tilde{l}_1$  и  $\tilde{l}_2$  для величин  $\alpha = \tilde{l}_1/l_1$  и  $\gamma = \tilde{l}_2/l_2$ , одни и те же  $(l_1 = l_2 = l)$ , и что размер  $\tilde{l}_1$  откладывается в направлении вектора  $\tilde{e}_1$ , а размер  $\tilde{l}_2 - в$  направлении вектора  $\tilde{e}_2$ , введя в прямоугольнике A'B'C'D' угол  $\varphi$  (который равен такому же углу в прямоугольнике ABCD), получаем, что  $\tilde{l}_1/\sqrt{\tilde{l}_1^2 + \tilde{l}_2^2} = \sin \varphi$ ,  $\tilde{l}_2/\sqrt{\tilde{l}_1^2 + \tilde{l}_2^2} = \cos \varphi$ ,  $\tilde{l}_1/\tilde{l}_2 = \text{tg}\,\varphi$ , и выражения (25) принимают вид

$$\delta_1' = \tau' = \frac{C-S}{\sqrt{2}} e_2 - \frac{S+C}{\sqrt{2}} e_3, \ \delta_2' = N' = \frac{S+C}{\sqrt{2}} e_2 - \frac{S-C}{\sqrt{2}} e_3, \ s = 2|\operatorname{ctg} 2\varphi|,$$

где  $C = \cos \varphi, \ S = \sin \varphi.$ 

Отсюда, во-первых, сразу следует, что  $\delta'_1 \cdot \delta'_2 = \tau' \cdot N' = 0$ , т.е. эти векторы ортогональны, а во-вторых, что вектор  $\delta'_1 = \tau'$  направлен по диагонали прямоугольника A'B'C'D' из точки D' в точку B'. Действительно, учитывая, что показанная на рис. 4 ось прямоугольника (вектор  $k_1$ ) направлена под углом в 45° к векторам  $e_2$  и  $-e_3$ , единичный вектор  $\overrightarrow{D'B'}/|\overrightarrow{D'B'}|$  можно представить так:

$$\frac{\overrightarrow{D'B'}}{|\overrightarrow{D'B'}|} = \cos(45^\circ + \varphi) \, \boldsymbol{e}_2 - \sin(45^\circ + \varphi) \, \boldsymbol{e}_3 = \frac{C-S}{\sqrt{2}} \, \boldsymbol{e}_2 - \frac{S+C}{\sqrt{2}} \, \boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{\delta}_1' = \boldsymbol{\tau}'.$$

Здесь учитываются известные соотношения для  $\sin(\theta_1 + \theta_2)$  и  $\cos(\theta_1 + \theta_2)$ , а также, что  $\sin 45^\circ = \cos 45^\circ = 1/\sqrt{2}$ .

Поворачивая единичный вектор  $\overrightarrow{D'B'}/|\overrightarrow{D'B'}|$  вокруг вектора  $e_1$  на 90° против часовой стрелки, получаем единичный вектор  $\delta'_2 = N'$ . Действительно, из (4) имеем  $\mathbf{O}(90^\circ, e_1) = e_1e_1 - e_2e_3 + e_3e_2$  и тогда  $\mathbf{O}(90^\circ, e_1) \cdot \tau' = N'$ .

Деформационный двойник в рассматриваемом случае возникает в результате сдвига, происходящего в плоскости с нормалью N' в направлении вектора  $\tau'$  на величину *s*. Этому процессу в базисе  $\tau'$ , N' соответствует деформация

$$\mathbf{E}' = (s/2)(\boldsymbol{\tau}' \boldsymbol{N}' + \boldsymbol{N}' \boldsymbol{\tau}') + (s^2/2) \boldsymbol{N}' \boldsymbol{N}' = = 0.0386(\boldsymbol{\tau}' \boldsymbol{N}' + \boldsymbol{N}' \boldsymbol{\tau}') + 0.003 \boldsymbol{N}' \boldsymbol{N}' \quad (26)$$

(сравните это выражение с (21)). Аналогично соотношению (20) построим тензор структурной деформации, соответствующий этому случаю. Теперь материнской является ячейка A'B'C'D', а ее элементы, имевшие в направлении  $\mathbf{k}_1$  длину  $\tilde{l}_2$ , а в направлении  $\mathbf{k}_2$  длину  $\tilde{l}_1$ , в ячейке ABCD, образующей структурный двойник, имеют в тех же направлениях длины  $\tilde{l}_1$  и  $\tilde{l}_2$  соответственно (см. рис. 4). Для указанных в статье значений  $\tilde{l}_1$  и  $\tilde{l}_2$  такое изменение в длинах определяет в базисе  $\mathbf{k}_i$ , i = 1, 2, тензор деформации

$$\boldsymbol{\varepsilon}' = \varepsilon_{11}' \boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_1 + \varepsilon_{22}' \boldsymbol{k}_2 \boldsymbol{k}_2, \quad \varepsilon_{11}' = \frac{1}{2} \frac{\tilde{l}_1^2 - \tilde{l}_2^2}{\tilde{l}_2^2} = 0.0401, \quad \varepsilon_{22}' = \frac{1}{2} \frac{\tilde{l}_2^2 - \tilde{l}_1^2}{\tilde{l}_1^2} = -0.0371.$$

Учитывая, что  $\mathbf{k}_1 = \sin 46.1^{\circ} \mathbf{N}' + \cos 46.1^{\circ} \mathbf{\tau}' = 0.72055 \mathbf{N}' + 0.6934 \mathbf{\tau}', \mathbf{k}_2 =$ =  $\cos 46.1^{\circ} \mathbf{N}' - \sin 46.1^{\circ} \mathbf{\tau}' = 0.6934 \mathbf{N}' - 0.72055 \mathbf{\tau}'$ , приходим к тому, что в базисе  $\mathbf{N}', \mathbf{\tau}'$  координатные составляющие тензоров  $\boldsymbol{\varepsilon}'$  и  $\mathbf{E}'$  полностью совпадают (тензор  $\boldsymbol{\varepsilon}'$  принимает вид (26)), т.е. тензоры  $\boldsymbol{\varepsilon}'$  и  $\mathbf{E}'$  равны как тензорные объекты.

Рассмотренные в этом разделе процессы образования двойников (i : j) = (3 : 4) и (i : j) = (4 : 3) показали, что деформации, возникающие в этих процессах как результат изменения микроструктуры материала, являются взаимообратными: инициируемые одним процессом, они полностью ликвидируются другим и материал восстанавливает свою первоначальную форму. Поэтому такие материалы и называются сплавами с памятью формы.

Заключение. В статье на примере сплава с памятью формы Cu-Al-Ni обоснован подход к описанию на микроструктурном уровне процессов двойникования и раздвойникования мартенситной фазы. Математической основой подхода является уравнение совместности Адамара для деформаций. Решение этого уравнения позволило определить поверхности, вдоль которых происходит сдвиг, направления и величину скольжения в орторомбической кристаллической ячейке, соответствующей рассматриваемому материалу в мартенситном состоянии, приводящих к появлению и исчезновению двойниковой структуры. Показано, что в сплаве с памятью формы одновременно и неразрывно существуют два двойника: деформационный и структурный. Первый связан с деформацией простого сдвига, возникающей в соответствии с условием совместности Адамара в мартенситной пластине, что приводит к излому этой прямой пластины и возникновению двух элементов, повернутых на определенный угол друг относительно друга, которые и формируют этот двойник. Структурный двойник формируется одинаково ориентированными орторомбическими кристаллическими ячейками мартенсита, одна и та же ось которых составляет угол в 90° для расположенных в разных элементах структурного двойника ячеек. Формирование деформационного двойника инициирует возникновение в среде деформации простого сдвига, а формирование структурного двойника – структурной деформации. Показано, что определенное положение структурного двойника в деформационном приводит к равенству этих деформаций.

Сдвиг, приводящий к образованию двойников, может осуществиться только когда касательное напряжение на поверхности сдвига достигнет критической величины, определенной экспериментально. Это требует решения краевой задачи механики для представительного объема материала, анизотропия которого определяется ориентацией орторомбических кристаллических ячеек относительно оси мартенситной пластины. Надеюсь, что обозначенное станет предметом следующей публикации.

Конкурирующие интересы. Конкурирующих интересов не имею.

**Авторский вклад и ответственность.** Я несу полную ответственность за предоставление окончательной версии рукописи в печать. Окончательная версия рукописи мною одобрена.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания ПФИЦ УрО РАН, регистрационный номер темы АААА–А20–120022590044–7.

### Библиографический список

- Bhattacharya K. Wedge-like microstructure in martensites // Acta Metal. Mater., 1991. vol. 39, no. 10. pp. 2431-2444. DOI: https://doi.org/10.1016/0956-7151(91)90023-T.
- Hane K. F., Shield T. W. Symmetry and microstructure in martensites // Philos. Mag. A, 1998. vol. 78, no. 6. pp. 1215–1252. DOI: https://doi.org/10.1080/01418619808239984.
- Hane K. F., Shield T. W. Microstructure in a copper-aluminium-nickel shape memory alloy // Proc. R. Soc. Lond. A, 1999. vol. 455, no. 1991. pp. 3901-3915. DOI: https://doi. org/10.1098/rspa.1999.0482.
- 4. Hane K. F., Shield T. W. Microstructure in a cubic to orthorhombic transition // J. Elast., 2000. vol. 59. pp. 267–318. DOI: https://doi.org/10.1023/A:1011051204615.
- Vedantam S. Constitutive modeling of Cu-Al-Ni shape memory alloys: Doctoral Dissertation. Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, 2000. https://dspace.mit. edu/handle/1721.1/34342.
- Vedantama S., Abeyaratneb R. A Helmholtz free-energy function for a Cu-Al-Ni shape memory alloy // Int. J. Non-Linear Mechan., 2005. vol. 40. pp. 177-193. DOI: https://doi. org/10.1016/j.ijnonlinmec.2004.05.005.
- 7. Truesdell C. A First Course in Rational Continuum Mechanics. vol. 1: General Concepts / Pure and Applied Mathematics. vol. 71. New York: Academic Press, 1977. xxiii+280 pp.
- Лихачев В. А., Малинин В. Г. Структурно-аналитическая теория прочности. СПб.: Наука, 1993. 471 с.
- 9. Панин В. Е. Основы физической мезомеханики // *Физ. мезомех.*, 1998. Т. 1, № 1. С. 5–22. EDN: KWPHTL.
- Панин В. Е., Егорушкин В. Е. Основы физической мезомеханики пластической деформации и разрушения твердых тел как нелинейных иерархически организованных систем // Физ. мезомех., 2015. Т. 18, № 5. С. 100–113. EDN: UXWCCP. DOI: https://doi. org/10.24411/1683-805X-2015-00058.
- Трусов П. В., Швейкин А. И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. Новосибирск: СО РАН, 2019. 605 с. EDN: BCSSTZ.
- Трусов П. В., Ашихмин В. Н., Волегов П. С., Швейкин А. И. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // Физ. мезомех., 2009. Т. 12, № 3. С. 61–71. EDN: LAJDAL.
- Трусов П. В., Швейкин А. И., Кондратьев Н. С., Янц А. Ю. Многоуровневые модели в физической мезомеханике металлов и сплавов: результаты и перспективы // Физ. мезомех., 2020. Т. 23, № 6. С. 33–62. EDN: ZDSCJX. DOI: https://doi.org/10.24411/ 1683-805X-2020-16003.
- Belyaev F. S., Evard M. E., Volkov A. E. Simulation of the plastic deformation of shape memory alloys considering shear anisotropy on the slip plane // Mater. Phys. Mech., 2023. vol. 51, no. 1. pp. 61-67. EDN: EBDDNG DOI: https://doi.org/10.18149/MPM.5112023\_6.
- 15. Беляев Ф. С., Волков А. Е., Евард М. Е. Микроструктурное моделирование обратимой и необратимой деформации при циклическом термомеханическом нагружении никелида титана // Вестн. Тамбов. унив. Сер. Естествен. и техн. науки, 2013. Т. 18, № 4. С. 2025–2026. EDN: RAISVF.
- Роговой А. А., Столбова О. С., Столбов О. В. Численное моделирование эволюции магнитной микроструктуры в сплавах Гейслера // ПМТФ, 2021. № 5. С. 195–207. EDN: UBSKYK. DOI: https://doi.org/10.15372/PMTF20210519.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural modeling of the magnetization process in Ni<sub>2</sub>MnGa alloy polytwin crystals // *Magnetochem.*, 2022. vol. 8, no. 8, 78. EDN: CUASII. DOI: https://doi.org/10.3390/magnetochemistry8080078.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural model of the behavior of a ferroalloy with shape memory in a magnetic field // Mech. Adv. Mater. Struct., 2022. vol. 31, no. 2. pp. 387-406. EDN: ZAQSCS. DOI: https://doi.org/10.1080/15376494.2022.2114046.

- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural model of magnetic and deformation behavior of single crystals and polycrystals of ferromagnetic shape memory alloy // Magnetochem., 2023. vol. 9, no. 2, 40. EDN: QIEPUX. DOI: https://doi.org/10.3390/ magnetochemistry9020040.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural model of magnetic and deformation behavior of single crystals and polycrystals of ferromagnetic shape-memory alloy / H. Altenbach, V. Eremeyev (eds). Advances in Linear and Nonlinear Continuum and Structural Mechanics / Advanced Structured Materials, 198. Cham: Springer. pp. 397-442. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-43210-1\_23.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. An approach to describe the twinning and detwinning processes of the martensitic structure in ferromagnetic alloy with shape memory in magnetic and force fields // Mech. Adv. Mater. Struct., 2024 (to appear). DOI:https://doi.org/10.1080/15376494.2024.2355627.
- Роговой А. А. Формализованный подход к построению моделей механики деформируемого твердого тела. Часть 1. Основные соотношения механики сплошных сред. Пермь: УрО РАН, 2020. 288 с. EDN: UTXNLG.
- 23. Косилов А. Т., Юрьев В. А. Профилированные монокристаллы Cu–Al–Ni с эффектами псевдоупругости и памяти формы // Междун. научн. ж. Альтернативная энергетика и экология, 2015. № 3. С. 49–61. EDN: TPPDCP.
- Otsuka K., Shimizu K. Morphology and crystallography of thermoelastic Cu-Al-Ni martensite analyzed by the phenomenological theory // Trans. JIM, 1974. vol. 15, no. 103-108. DOI: https://doi.org/10.2320/matertrans1960.15.103.
- 25. Лурье А. И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
- James R. D. Finite deformation by mechanical twinning // Arch. Ration. Mech. Anal., 1981. vol. 77. pp. 143–176. DOI: https://doi.org/10.1007/BF00250621.
- 27. Gurtin M. E. Two-phase deformations of elastic solids // Arch. Ration. Mech. Anal., 1983. vol. 84. pp. 1-29. DOI: https://doi.org/10.1007/BF00251547.
- Yasunaga M., Funatsu Y., Kojima S., et al. Measurement of elastuc constant // Scripta Metallurg., 1983. vol. 17, no. 9. pp. 1091–1094. DOI: https://doi.org/10.1016/0036-9748(83) 90460-X.

### MSC: 74N15

# Microstructural model of twinning and detwinning processes of the martensitic phase in shape memory alloys

### A. A. Rogovoy

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, 1, Academician Korolev str., Perm, 614018, Russian Federation.

#### Abstract

Using the Cu–Al–Ni shape memory alloy as an example, the article substantiates an approach to describing at the microstructural level the processes of twinning and detwinning of the martensitic phase. The coordinated twinned martensitic structure is described by the Hadamard compatibility equation for deformations, the solution of which made it possible to determine the surfaces along which the shift occurs, the directions and the magnitude of sliding in an orthorhombic crystal cell corresponding to the material under consideration in the martensitic state, leading to the appearance and disappearance of the twin structure. It is shown that two types of twins simultaneously and inseparably exist in an alloy with shape memory: deformation and structural. The first is related to the deformation of a simple shear, that occurs in accordance with the Hadamard compatibility condition in a martensitic plate, which leads to bending this straight plate and the appearance of two elements rotated at a certain angle relative to each other, which form this twin. The structural twin is formed from two parts, in each of which the orthorhombic crystal cells of martensite are identically oriented, but one of the axes of these cells changes its direction by 90° when moving to another part of the twin. The formation of a deformation twin initiates the occurrence of a simple shear strain in the medium, and a structural twin initiates a structural strain. It is shown that a certain position of the structural twin in the deformation one leads to the equality of these strains.

**Keywords:** microstructural modeling, anisotropic material, Hadamard compatibility condition, sliding surfaces and shear directions.

Received: 6<sup>th</sup> March, 2024 / Revised: 18<sup>th</sup> September, 2024 / Accepted: 27<sup>th</sup> September, 2024 / First online: 28<sup>th</sup> October, 2024

#### Mechanics of Solids Research Article

© Samara State Technical University, 2024 (Compilation, Design, and Layout) **∂** ©① The content is published under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

#### Please cite this article in press as:

Rogovoy A. A. Microstructural model of twinning and detwinning processes of the martensitic phase in shape memory alloys, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2024, vol. 28, no. 3, pp. 516–542. EDN: NDDMCS. DOI: 10.14498/vsgtu2089 (In Russian).

#### Authors' Details:

Anatoly A. Rogovoy 🖄 🕑 https://orcid.org/0000-0003-1723-0067

Dr. Phys. & Math. Sci., Professor; Chief Researcher; Lab. of Nonlinear Mechanics of Deformable Solids; e-mail: rogovoy@icmm.ru

<sup>©</sup> Authors, 2024

Competing interests. I have no competing interests.

Authors' contributions and responsibilities. I take full responsibility for submitting the final version of the manuscript for publication. The final version of the manuscript has been approved by me.

**Funding.** The work was carried out as part of the state assignment of the Perm Federal Research Center, Ural Branch of RAS, registration number of the topic AAAA–A20–120022590044–7.

## References

- Bhattacharya K. Wedge-like microstructure in martensites, Acta Metal. Mater., 1991, vol. 39, no. 10, pp. 2431-2444. DOI: https://doi.org/10.1016/0956-7151(91)90023-T.
- Hane K. F., Shield T. W. Symmetry and microstructure in martensites, *Philos. Mag. A*, 1998, vol. 78, no. 6, pp. 1215–1252. DOI: https://doi.org/10.1080/01418619808239984.
- Hane K. F., Shield T. W. Microstructure in a copper-aluminium-nickel shape memory alloy, Proc. R. Soc. Lond. A, 1999, vol. 455, no. 1991, pp. 3901-3915. DOI: https://doi. org/10.1098/rspa.1999.0482.
- 4. Hane K. F., Shield T. W. Microstructure in a cubic to orthorhombic transition, J. Elast., 2000, vol. 59, pp. 267–318. DOI: https://doi.org/10.1023/A:1011051204615.
- 5. Vedantam S. Constitutive modeling of Cu-Al-Ni shape memory alloys, Doctoral Dissertation. Massachusetts, Massachusetts Institute of Technology, 2000. https://dspace.mit. edu/handle/1721.1/34342.
- Vedantama S., Abeyaratneb R. A Helmholtz free-energy function for a Cu-Al-Ni shape memory alloy, Int. J. Non-Linear Mechan., 2005, vol. 40, pp. 177-193. DOI: https://doi. org/10.1016/j.ijnonlinmec.2004.05.005.
- 7. Truesdell C. A First Course in Rational Continuum Mechanics, vol. 1: General Concepts, Pure and Applied Mathematics, vol. 71. New York, Academic Press, 1977, xxiii+280 pp.
- Likhachev V. A., Malinin V. G. Strukturno-analiticheskaia teoriia prochnosti [Structural and Analytical Theory of Strength]. St. Petersburg, Nauka, 1993, 471 pp. (In Russian)
- 9. Panin V. E. Fundamentals of physical mesomechanics, *Fiz. Mezomekh.*, 1998, vol. 1, no. 1, pp. 5–22 (In Russian). EDN: KWPHTL.
- Panin V. E., Egorushkin V. E. Basic physical mesomechanics of plastic deformation and fracture of solids as hierarchically organized nonlinear systems, *Fiz. Mezomekh.*, 2015, vol. 18, no. 5, pp. 100-113 (In Russian). EDN: UXWCCP. DOI: https://doi.org/10.24411/ 1683-805X-2015-00058.
- Trusov P. V., Shveikin A. I. Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriia, algoritmy, primery primeneniia [Multilevel Models of Mono- and Polycrystalline Materials: Theory, Algorithms, Application Examples]. Novosibirsk, Sibirsk. Otd. RAN, 2019, 605 pp. (In Russian). EDN: BCSSTZ.
- Trusov P. V., Ashikhmin V. N., Volegov P. S., Shveykin A. I. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution, *Fiz. Mezomekh.*, 2009, vol. 12, no. 3, pp. 61–71 (In Russian). EDN: LAJDAL.
- Trusov P. V., Shveykin A. I., Kondratiev N. S., Yants A. Yu. Multilevel models in physical mesomechanics of metals and alloys: Results and prospects, *Fiz. Mezomekh.*, 2020, vol. 23, no. 6, pp. 33–62 (In Russian). EDN: ZDSCJX. DOI: https://doi.org/10.24411/ 1683-805X-2020-16003.
- Belyaev F. S., Evard M. E., Volkov A. E. Simulation of the plastic deformation of shape memory alloys considering shear anisotropy on the slip plane, *Mater. Phys. Mech.*, 2023, vol. 51, no. 1, pp. 61-67. EDN: EBDDNG DOI: https://doi.org/10.18149/MPM.5112023\_6.
- Belyaev F. S., Volkov A. E., Evard M. E. Microstructural modeling of reversible and irreversible deformation under cyclic thermomechanical loading of titanium nickelide, *Tambov Univ. Reports. Ser. Natural Techn. Sci.*, 2013, vol. 18, no. 4, pp. 2025–2026 (In Russian). EDN: RAISVF.

- Rogovoy A. A., Stolbova O. S., Stolbov O. V. Numerical simulation of evolution of magnetic microstructure in Heusler alloys, J. Appl. Mech. Techn. Phys., 2021, vol. 62, no. 5, pp. 870– 881. EDN: VTJJCS. DOI: https://doi.org/10.1134/S0021894421050199.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural modeling of the magnetization process in Ni<sub>2</sub>MnGa alloy polytwin crystals, *Magnetochem.*, 2022, vol. 8, no. 8, 78. EDN: CUASII. DOI: https://doi.org/10.3390/magnetochemistry8080078.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural model of the behavior of a ferroalloy with shape memory in a magnetic field, *Mech. Adv. Mater. Struct.*, 2022, vol.31, no.2, pp. 387-406. EDN: ZAQSCS. DOI: https://doi.org/10.1080/15376494.2022.2114046.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural model of magnetic and deformation behavior of single crystals and polycrystals of ferromagnetic shape memory alloy, *Magnetochem.*, 2023, vol. 9, no. 2, 40. EDN: QIEPUX. DOI: https://doi.org/10.3390/magnetochemistry9020040.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. Microstructural model of magnetic and deformation behavior of single crystals and polycrystals of ferromagnetic shape-memory alloy, In: *H. Altenbach, V. Eremeyev (eds). Advances in Linear and Nonlinear Continuum and Structural Mechanics,* Advanced Structured Materials, 198. Cham, Springer, pp. 397–442. DOI: https://doi.org/ 10.1007/978-3-031-43210-1\_23.
- Rogovoy A. A., Stolbova O. S. An approach to describe the twinning and detwinning processes of the martensitic structure in ferromagnetic alloy with shape memory in magnetic and force fields, *Mech. Adv. Mater. Struct.*, 2024 (to appear). DOI: https://doi.org/ 10.1080/15376494.2024.2355627.
- Rogovoi A. A. Formalizovannyi podkhod k postroeniiu modelei mekhaniki deformiruemogo tverdogo tela. Chast' 1. Osnovnye sootnosheniia mekhaniki sploshnykh sred [A Formalized Approach to the Construction of Models of Deformable Solid Mechanics. Part 1. Basic Relations of Continuum Mechanics]. Perm', Uralsk. Otd. RAN, 2020, 288 pp. (In Russian). EDN: UTXNLG.
- Kosilov A. T., Yuriev V. A. Profiled Cu–Al–Ni single crystals with pseudoelasticity and shape memory effects, *Mezhdun. Nauchn. Zhurn. Alternativn. Energetika Ekologiia*, 2015, no. 3, pp. 49–61 (In Russian). EDN: TPPDCP.
- Otsuka K., Shimizu K. Morphology and crystallography of thermoelastic Cu-Al-Ni martensite analyzed by the phenomenological theory, *Trans. JIM*, 1974, vol.15, no.103-108. DOI:https://doi.org/10.2320/matertrans1960.15.103.
- Lur'e A. I. Nelineinaia teoriia uprugosti [Nonlinear Theory of Elasticity]. Moscow, Nauka, 1980, 512 pp. (In Russian)
- James R. D. Finite deformation by mechanical twinning, Arch. Ration. Mech. Anal., 1981, vol. 77, pp. 143–176. DOI: https://doi.org/10.1007/BF00250621.
- Gurtin M. E. Two-phase deformations of elastic solids, Arch. Ration. Mech. Anal., 1983, vol. 84, pp. 1–29. DOI: https://doi.org/10.1007/BF00251547.
- Yasunaga M., Funatsu Y., Kojima S., et al. Measurement of elastuc constant, *Scripta Metallurg.*, 1983, vol. 17, no. 9, pp. 1091–1094. DOI: https://doi.org/10.1016/0036-9748(83) 90460-X.