

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ И МЕХАНИЗМ ПОЛИМОРФНОГО $\beta \rightarrow \alpha$ -ПРЕВРАЩЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ ЦИРКОНИЯ

© 2024 г. В. М. Гундырев^{a,*}, В. И. Зельдович^a, Ю. В. Хлебникова^{a,**}

^aИнститут физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

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

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

Поступила в редакцию 19.02.2024 г.

После доработки 28.03.2024 г.

Принята к публикации 14.04.2024 г.

Построена кристаллографическая теория полиморфного ОЦК→ГПУ-превращения в монокристалле циркония. Согласно теории, механизм превращения включает главные характеристики мартенситного превращения: деформацию решетки и деформацию при инвариантной решетке. Образующийся при превращении пакет параллельных пластин рассматривается как единичный мартенситный кристалл. Установлено, что в данном превращении деформация мартенсита (при инвариантной решетке) направлена на восстановление формы исходного участка ОЦК-фазы (прообраза), а не на получение инвариантной плоскости. Расчет показал, что восстановление формы в базисной плоскости ГПУ-фазы происходит в основном за счёт действия двух систем призматического скольжения. Скольжение сосредоточено в узких слоях локализованного сдвига, что приводит к образованию пластинчатой структуры пакета. Восстановление формы вдоль оси «с» происходит за счет действия пирамидального скольжения.

Ключевые слова: монокристалл циркония, полиморфное превращение, деформация решетки, пирамидальное и призматическое скольжение

DOI: 10.31857/S0015323024080042 EDN: JWQMFM

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллографический анализ мартенситных превращений $B2 \rightarrow B19'$ в никелиде титана, ГЦК→ОЦК и ГЦК→ОЦТ в сплавах железа привел к получению нового варианта кристаллографической теории мартенситного превращения (КТМП) [1, 2]. В этом варианте деформация ГЦК-решетки по Бейну заменена деформацией сдвига по плоскости двойникования в направлении двойникования плюс деформация сжатия-растяжения до получения кристаллической решетки мартенсита. В КТМП была получена новая характеристика мартенситного превращения — релаксационный поворот мартенситного кристалла [3]. В дальнейшем КТМП была успешно использована для анализа мартенситных превращений в сплавах Гейслера с термоупругим мартенситом: $B2 \rightarrow 6M$ и $B2 \rightarrow 14M$ [4, 5]. Представляло интерес применить эту теорию также для превращения ОЦК→ГПУ в цирконии.

Интерес к исследованию структурных превращений в цирконии обусловлен востребован-

ностью высокопрочных коррозионностойких сплавов в авиа- и космической отраслях, в химической промышленности и атомной энергетике. Цирконий является основой большой группы сплавов, упрочняемых при термической обработке. Комплекс механических свойств циркониевых сплавов в значительной степени зависит от термокинетических условий реализации полиморфного $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода, поэтому исследование механизма полиморфного превращения представляет практический интерес. Высокотемпературная β -фаза циркония имеет объемно-центрированную кубическую решетку, низкотемпературная α -фаза — гексагональную плотноупакованную решетку с отношением периодов $c/a = 1.593$ немного меньшим, чем характерное для идеальной упаковки $c/a = 1.633$. В равновесных условиях температура полиморфного $\beta \rightarrow \alpha$ (ОЦК→ГПУ)-превращения составляет 862°C. Подробные структурные исследования циркония и его сплавов обобщены в монографиях [6, 7]. Однако одних структур-

ных исследований недостаточно, чтобы иметь полное представление о механизмах получения наблюдаемой структуры мартенсита. Для этого необходимо провести кристаллографический анализ мартенситного превращения. Такой анализ может быть проведен на основе КТМП.

В работе [8] была изучена структура монокристалла циркония, выращенного методом бестигельной электронно-лучевой зонной плавки при двух последовательных проходах со скоростью перемещения зоны расплава 3 мм/мин. В процессе зонного переплава температурный градиент в зоне кристаллизации составлял 500 К/см. Скорость охлаждения монокристалла в интервале температур полиморфного перехода была сопоставима со скоростью охлаждения на воздухе после высокотемпературного нагрева.

При охлаждении β -монокристалла циркония до температуры $\sim 862^\circ\text{C}$ происходит полиморфное $\beta \rightarrow \alpha$ -превращение, в результате которого формируется структура, состоящая из пакетов параллельных α -пластин. На рис. 1 представлена макро- и микроструктура в продольном сечении псевдомонокристалла циркония после травления в смеси разбавленных кислот HNO_3 и HF с добавлением перекиси водорода, демонстрирующая пакетное строение. Ширина пластин в разных пакетах, как в поперечном, так и в продольном сечениях кристалла составляет от 10 до 30 мкм. Как было показано в работах [8–13] пакетное строение характерно не только для монокристаллов циркония, но и для монокристаллов титана, гафния и сплавов гафний-титан, выращенных методом зонной плавки.

Цель настоящей работы – кристаллографический анализ мартенситного ОЦК $\rightarrow$ ГПУ-превращения в монокристалле циркония, выращенного методом зонной плавки. Расчет выполнен с использованием программы Mathcad.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Механизм деформации мартенсита при инвариантной решетке

Известно, что ориентационная связь α -фазы и исходной β -фазы в цирконии подчиняется ориентационным соотношениям Бюргерса: $\{110\}_\beta \parallel (0001)_\alpha$, $\langle 111 \rangle_\beta \parallel [11\bar{2}0]_\alpha$ [14]. Пластины (рейки) α -фазы обычно рассматривались как мартенситные кристаллы, имеющие инвариантную плоскость, совпадающую с плоскостью пластин [7, 15]. В работах [8, 10] было проведено исследование ориентации пластин в монокристаллах циркония и титана методом EBSD и установлено, что пластины в пакете имеют одинаковую ориентацию. Факт одинаковой ориентации пластин в пакете исключает возможность трактовать их как отдельные мартенситные кристаллы. Действительно, при одинаковой ориентировке реек изменение их формы вызовет точно такое же изменение формы всего пакета. Кроме того, при мартенситном превращении не должен появляться рельеф между пластинами одного пакета на полированной поверхности шлифа, который, однако, наблюдается в [8]. Представляется более вероятной другая трактовка наблюдаемой реечной структуры в α -фазе циркония. Согласно этой трактовке весь пакет является одним мартенситным кристаллом, а пластинчатая струк-

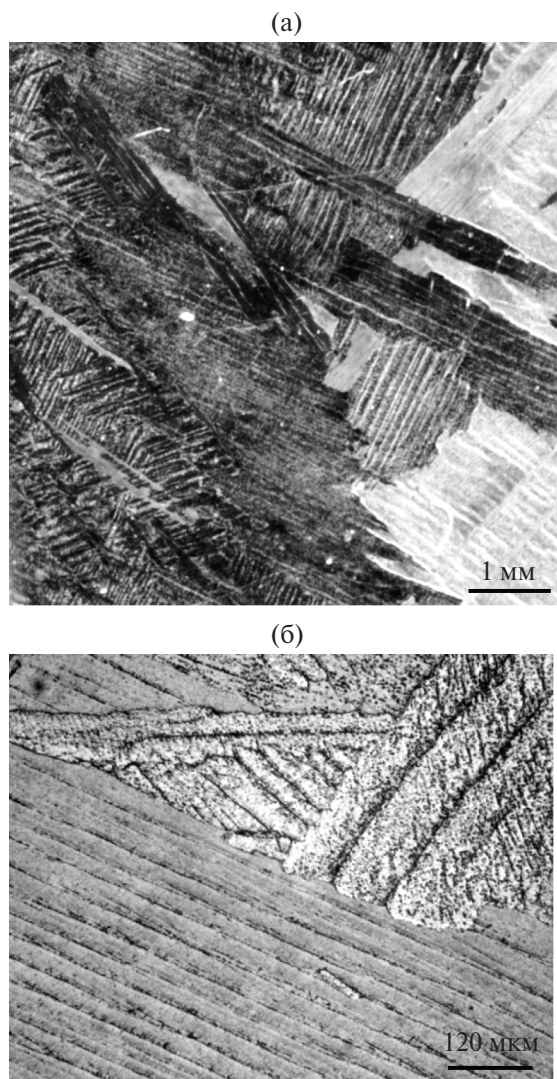


Рис. 1. Макро- (а) и микроструктура (б) псевдомонокристалла циркония.

тура — результатом неоднородной деформации его при инвариантной решетке: возникают тонкие параллельные плоские слои локализованной сдвиговой пластической деформации, чередующиеся со слабо деформированными широкими слоями мартенситного монокристалла. Выход СЛС на поверхность образца проявляется в виде рельефа, а на микроструктурных снимках они видны в виде черных параллельных слегка волнистых линий [8]. Чередование СЛС и широких слабо деформированных слоев создает ступеньки на границах пакетов.

Подобные линии (полосы) локализованной деформации наблюдались на стальных образцах при их растяжении. Такие полосы (линии) на поверхности образца получили название полос (линий) Чернова—Людерса [16, 17]. При этом плоскость деформации и направление деформации были расположены под углом 45 градусов к оси растяжения, т.е. были параллельны направлению максимальных касательных напряжений, возникающих при растяжении [16, с. 428]. Если предположить, что слои интенсивной деформации, которые видны на поверхности в виде полос Чернова—Людерса, и слои локализованного сдвига (СЛС), возникшие при превращении $\beta \rightarrow \alpha$ в цирконии, имеют общие закономерности, то, исходя из этого, следует ожидать, что плоскость и направление сдвига в СЛС будут совпадать с направлением максимальных касательных напряжений, возникшими в мартенситном кристалле при перестройке решетки $\beta \rightarrow \alpha$. Был сделан расчет кристаллографического направления и плоскости сдвига в СЛС (Приложение). Было получено направление $[3; 2; 2]_\beta$ и плоскость $(4; 3; 3)$. Аналогичный расчет, проведенный для превращения $\beta \rightarrow \alpha$ в монокристалле титана, дает такие же значения индексов направления и плоскости сдвига в СЛС. Такое совпадение обусловлено совпадением отношения a_α/a_β титана с аналогичным отношением в цирконии, которое равно 0.900 ± 0.002 и от которого зависят значения вычисленных индексов направления и плоскости сдвига. Данное совпадение позволяет объединить экспериментальные результаты, получаемые на псевдомонокристаллическом цирконии и титане, и проанализировать их вместе.

В монографии [7] представлены экспериментально определенные разными авторами значения индексов плоскостей габитуса при мартенситном переходе $\beta \rightarrow \alpha$ в титане и цирконии, из которых видно, что полученные данные имеют

большой разброс от $(433)_\beta$ до $(211)_\beta$. Такой разброс можно объяснить разным напряженным состоянием решетки в местах мартенситного превращения. Первые возникшие кристаллы α -фазы в монокристалле, вырастающие до больших размеров, вероятно будут иметь «плоскость габитуса» пластин в пакете $(433)_\beta$, а в остальных кристаллах будут наблюдаться пакеты с промежуточными значениями «плоскости габитуса» от $(433)_\beta$ до $(211)_\beta$. В работе [15] приводятся сведения, что экспериментально определенная «плоскость габитуса» в цирконии с пакетной структурой (плоскость поверхности пластин в пакете псевдомонокристалла) близка к $\{433\}_\beta$. В свете наших представлений это означает, что СЛС параллельны кристаллографической плоскости $\{433\}_\beta$. Таким образом, имеем хорошее совпадение расчетной ориентации СЛС с экспериментально наблюдаемой «плоскостью габитуса».

В кристаллографической теории мартенситного превращения деформация формы записывается как произведение четырех матриц [2]:

$$E = R_1 P B_1 G, \quad (1)$$

где произведение $B_1 G$ — деформация решетки, P — деформация при инвариантной решетке, R_1 — небольшой поворот мартенситного кристалла для получения инвариантной плоскости. Деформация решетки происходит сдвигом G , который сопровождается дополнительным перемещением атомов, в результате которого имеем дополнительную чистую деформацию B_1 . Согласно КТП, деформация сдвигом G происходит по плоскостям и в направлениях, типичных для двойникования. Соответственно, для ОЦК-решетки сдвиг должен происходить по плоскостям $\{112\}$ в направлениях $\langle 11\bar{3} \rangle$. В данной работе, из эквивалентных вариантов, для расчетов выбран сдвиг по плоскости (211) в направлении $[311]$. В соответствии с выбранным вариантом, на рис. 2 представлена схема деформации формы макроучастка пакета при мартенситном превращении $\beta \rightarrow \alpha$, согласно уравнению (1). Как показано на рисунке, основная деформация формы произошла в плоскости $(01\bar{3})_\beta$. Поэтому восстанавливающий форму сдвиг P должен происходить в той же плоскости $(01\bar{3})_\beta$. Исходя из этого условия, с помощью векторного уравнения находим направление сдвига в координатах β -фазы:

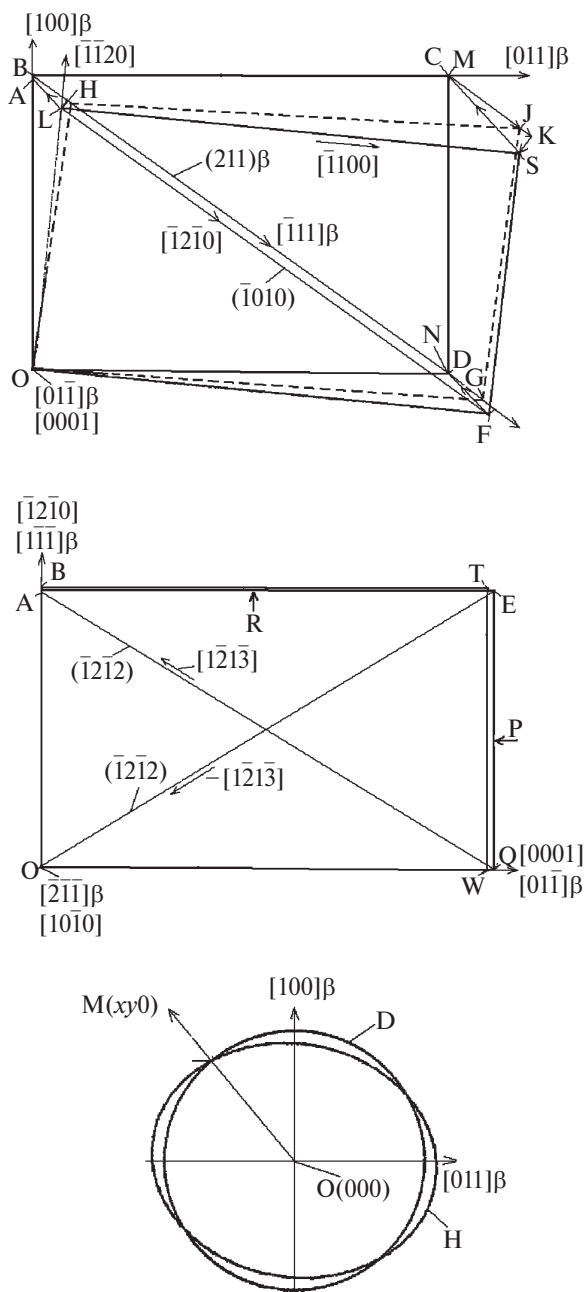


Рис. 2. Деформация и восстановление формы макроэвгала монокристалла при $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении: а – сечение по плоскости $(011)_\beta$, б – сечение по плоскости $(211)_\beta$. На рисунке (а) показано: OBCD – исходная форма макроэвгала, OHJG – его форма после деформации сдвигом (I) по плоскости $(211)_\beta$ в направлении $[111]$, OLSF – этот же макроэвгала после дополнительной деформации B_1 , OAMN – форма макроэвгала после восстанавливающей деформации P_2 при инвариантной решетке в α -фазе, практически совпадает с исходной формой в данном сечении. На рисунке (б) показан тот же макроэвгала в сечении $(211)_\beta$: OATW – исходная форма, OAEQ – после деформаций P_3, B_1, I . На рисунке (в) показана деформация круга при деформации B_1, I : D – исходная форма в виде круга, H – она же после деформации B_1, I . Выбранный макроэвгала имеет форму прямоугольного параллелепипеда, расположенного внутри пакета. Ребра макроэвгала выбраны параллельно направлениям $[011]_\beta$, $[100]_\beta$ и $[011]_\alpha$; длина ребер прямо пропорциональна соответствующим межплоскостным расстояниям.

$$\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ -0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Из полученных значений с помощью ориентационных соотношений Бюргерса:

$$(01\bar{3})_\beta \parallel (001)_\alpha \parallel [11\bar{3}]_\beta \parallel [010]_\alpha$$

определяем плоскость и направление сдвига в α -фазе в трехзначных индексах. Получаем систему $(\bar{5}10)_\alpha$ $[\bar{3}50]_\alpha$. Ближайшей системой легкого скольжения в α -фазе является система $(\bar{3}00)_\alpha$ $[0\bar{3}0]_\alpha$. Если бы работала только одна система скольжения, то получили бы СЛС с ориентацией, параллельной плоскости легкого скольжения $(\bar{3}00)_\alpha$. Однако ориентация СЛС получается параллельной плоскости $(\bar{5}10)_\alpha$, которая развернута относительно $(\bar{3}00)_\alpha$ на 11.5 градусов. Очевидно, в СЛС работают две системы легкого скольжения: $(\bar{3}00)[0\bar{3}0]$ и $(\bar{1}30)[\bar{3}30]$. При этом величина сдвига по второй системе скольжения в 5 раз меньше, чем по первой. В итоге получается наблюдаемый сдвиг по системе $(\bar{5}10)_\alpha$ $[\bar{3}50]_\alpha$, или в кубических координатах β -фазы это будет $(433)[\bar{3}22]$. Таким образом, для псевдомонотристалла циркония, выращенного методом зонной плавки, установлен основной механизм пластической деформации α -фазы при инвариантной решетке в процессе мартенситного превращения. Из проведенного анализа следует, что каждый пакет параллельных пластин нужно рассматривать как единый кристалл, в котором из-за неоднородной деформации возникла слоистая структура, состоящая из слабо деформированных слоев, разделенных между собой узкими слоями (СЛС), содержащими большое количество структурных дефектов [8, 10].

Расчет деформаций мартенсита

Для проведения расчета параметров мартенситной структуры необходимо знать периоды решеток исходной фазы и мартенсита, а также механизм пластической деформации α -фазы в процессе мартенситного превращения. Предполагается [7], что ОЦК-решетка β -фазы имеет $a=0.35878$ нм, а ГПУ-решетка α -фазы имеет $a=0.32312$ нм и $c=0.51477$ нм. Значения периодов кристаллических решеток взяты при комнатной температуре.

Матрица, описывающая сдвиг Γ , имеет вид:

$$\Gamma = T^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0.17677 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot T, \quad (3)$$

где $T = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \\ 2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ – матрица перехода от

исходной кубической системы координат к кубической системе координат, построенной так, что ось x параллельна направлению сдвига, а ось y параллельна нормали к плоскости сдвига. T^{-1} – обратная ей матрица. Для того чтобы получить заданные параметры решетки α -фазы, нужна дополнительная деформация B_1 , которую найдем из диагональной матрицы D_1 : $B_1 = T^{-1} \cdot D_1 \cdot T$, где

$$D_1 = \begin{pmatrix} I_{020\alpha}/I_{111\beta} & 0 & 0 \\ 0 & d_{200\alpha}/d_{211\beta} & 0 \\ 0 & 0 & I_{001\alpha}/I_{011\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.03993 & 0 & 0 \\ 0 & 0.95524 & 0 \\ 0 & 0 & 1.01454 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Теперь можно вычислить деформацию решетки $B = B_1 \cdot T$. В итоге получаем:

$$B = \begin{pmatrix} 0.89681 & -0.07156 & -0.07156 \\ 0.05843 & 1.05645 & 0.04191 \\ 0.05843 & 0.04191 & 1.05645 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Деформацию D_1 представим в виде произведения четырех матриц: $D_1 = D_5 \cdot D_4 \cdot D_3 \cdot D_2$:

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1.03993 & 0 & 0 \\ 0 & 0.96160 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99339 & 0 \\ 0 & 0 & 1.00665 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$D_4 = \begin{pmatrix} 0.99741 & 0 & 0 \\ 0 & 0.99741 & 0 \\ 0 & 0 & 1.00523 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$D_5 = \begin{pmatrix} 1.002602 & 0 & 0 \\ 0 & 1.002602 & 0 \\ 0 & 0 & 1.002602 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Как видно из данных уравнений (6–9), D_2 и D_3 соответствуют чистому сдвигу, D_4 соответствует растяжению, а D_5 соответствует всестороннему

расширению. Аналогичным образом представим деформацию решетки: $B = B_5 \cdot B_4 \cdot B_3 \cdot B_2$, где

$$B_2 = T^{-1} \cdot D_2 \cdot T = \begin{pmatrix} 1 & 0.17677 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot T, \quad (10)$$

$$B_3 = T^{-1} \cdot D_3 \cdot T, \quad (11)$$

$$B_4 = T^{-1} \cdot D_4 \cdot T, \quad (12)$$

$$B_5 = T^{-1} \cdot D_5 \cdot T. \quad (13)$$

Теперь по отдельности находим для каждой деформации B_2 , B_3 и B_4 подходящие системы скольжения в решетке мартенсита, которые компенсируют деформацию формы. Вначале находим деформацию P_2 для восстановления исходной формы кристалла мартенсита, нарушенной сдвиговой деформацией B_2 :

$$P_2 = B_2^{-1} = \left(T^{-1} \cdot D_2 \cdot T \right)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0.17677 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot T. \quad (14)$$

Такая деформация может быть получена при сдвиге по СЛС, параллельном плоскости $(4.01566; 3; 3)_\beta$, в направлении $[-2.98830; 2; 2]$. Для определения величины сдвига составим уравнение:

$$K^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & g & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot K = P_2, \quad (15)$$

где φ – угол релаксационного поворота кристалла мартенсита, g – величина сдвига и K – матрица перехода от исходной кубической системы координат к системе координат СЛС:

$$K = \begin{pmatrix} -2.98830 & 2 & 2 \\ 4.11460 & 4.11460 & 4.11460 \\ 4.01566 & 3 & 3 \\ 5.84171 & 5.84171 & 5.84171 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

В результате решения уравнения (15) с помощью программы Mathcad, получаем угол релаксационного поворота $\varphi = 0.4579^\circ$ и $g = -0.1998$. Таким образом, деформация формы кристалла, полученная при деформации решетки B_2 , полностью компенсируется последующим сдвигом по СЛС и небольшим поворотом кристалла мартенсита.

Далее находим деформацию P_3 для восстановления формы кристалла, нарушенной деформацией B_3 :

$$P_3 = B_3^{-1} = T^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.00665 & 0 \\ 0 & 0 & 0.99339 \end{bmatrix} \cdot T. \quad (17)$$

Как показано на рис. 2б, данная деформация сжатия–растяжения получается при одновременной работе двух эквивалентных пирамидальных систем скольжения $(1212)[121\bar{3}]$ и $(\bar{3}2\bar{3}2)[323\bar{3}]$ в мартенситном кристалле. Аналогично находим деформацию P_4 для восстановления исходной формы кристалла, нарушенной деформацией растяжения B_4 вдоль направления $[01\bar{3}]_\beta$:

$$P_4 = B_4^{-1} = T^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1.00260 & 0 & 0 \\ 0 & 1.00260 & 0 \\ 0 & 0 & 0.99481 \end{bmatrix} \cdot T. \quad (18)$$

Эта деформация сжатия, компенсирующая деформацию растяжения в направлении параллельном направлению $[01\bar{3}]_\beta$, получается при одновременной работе эквивалентных пирамидальных систем скольжения $\{1212\} \langle 121\bar{3} \rangle$ в мартенситном кристалле, расположенных симметрично относительно направления сжатия. В результате этой деформации одноосное удлинение B_4 полностью компенсируется. Теперь запишем итоговую деформацию формы при мартенситном превращении:

$$E = B_5 \cdot P_4 \cdot B_4 \cdot P_3 \cdot B_3 \cdot P_2 \cdot B_2 = \begin{bmatrix} 1.0026 & 0 & 0 \\ 0 & 1.0026 & 0 \\ 0 & 0 & 1.0026 \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Таким образом, $E = B_5$.

Интерпретация полученных результатов

Как следует из уравнения (19), при мартенситном превращении $\beta \rightarrow \alpha$ в цирконии происходит полное восстановление исходной формы кристалла мартенсита в результате его деформации при инвариантной решетке. При этом сохраняется только всестороннее расширение — объемный эффект превращения. При частичном восстановлении формы, как это происходит в других мартенситных превращениях, вокруг растущего кристалла возникает напряженное состояние первого рода, которое с одной — препятствует росту кристалла, а с другой стороны способствует возникновению вблизи его границы кристаллов мартенсита другой ориентации [18]. В результате получается мелкокристаллическая мартенситная структура.

На рис. 2в видно, что наиболее полное восстановление формы за один сдвиг должно произойти при сдвиге в направлении ОМ. В результате расчета плоскости и направления такого сдвига, было получено: $[\bar{3}22]_\beta(433)_\beta$ (Приложение). Предполагается, что данный сдвиг осуществляется скольжением, происходящим в СЛС по двум системам призматического скольжения $[\bar{1}210](\bar{3}010)$ и $[\bar{3}\bar{3}20](1\bar{3}00)$, или при переходе к записи в трехзначных индексах это будет $[0\bar{3}0]_\alpha(\bar{3}00)_\alpha$ и $[\bar{3}\bar{3}0]_\alpha(1\bar{3}0)_\alpha$, а относительно исходной системы координат:

$$\begin{bmatrix} 0.4943; -0.5028; -0.5028 \end{bmatrix}_\beta \\ \begin{bmatrix} -1.0056; -0.4943; -0.4943 \end{bmatrix}_\beta$$

и

$$\begin{bmatrix} -0.0113; -1.0000; -1.0000 \end{bmatrix}_\beta \\ \begin{bmatrix} 1.9999; -0.0113; -0.0113 \end{bmatrix}_\beta.$$

Запишем уравнение (19) в другом виде:

$$E \approx R_1 \cdot (P_4 \cdot P_3 \cdot P_5) \cdot B_1 \cdot G, \quad (20)$$

где

$$R_1 = K^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} K, \quad (21)$$

$$P_5 = K^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 & g & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} K. \quad (22)$$

Если сопоставить уравнение (20) с уравнением (1), то можно установить, что

$$P_1 = P_4 \cdot P_3 \cdot P_5. \quad (23)$$

Учитывая, что деформация P_5 осуществляется скольжением по двум призматическим системам $[\bar{1}210](\bar{3}010)$ и $[\bar{3}\bar{3}20](1\bar{3}00)$, а деформации P_3 и P_4 осуществляются скольжением по пирамидальным системам $\{1212\} \langle 121\bar{3} \rangle$, то получается, что при деформации P_1 может быть задействовано несколько систем скольжения, в то время как в мартенситах с более мелкой структурой (например, в сплавах железа) обычно действует только одна система скольжения. Действие одной системы скольжения позволяет получить только инвариантную плоскость, но не позволяет сделать форму кристалла мартенсита подобной форме его прообраза в исходной фазе.

Для этого нужны еще другие системы скольжения (двойникования). В этом случае подгонка формы макроучастка мартенсита, содержащего большое количество кристаллитов мартенсита, достигается за счет равного количества кристаллитов эквивалентных ориентировок, распределенных равномерно по всему макроучастку. При этом происходит взаимная компенсация напряжений первого рода от отдельных кристаллитов [19].

Релаксационный поворот R_1 кристалла мартенсита на угол $\varphi=0.4579^\circ$ происходит вокруг направления $[01\bar{3}]_\beta$, которое параллельно направлению $[0001]$ в α -фазе. При таком повороте кристалла мартенсита сохраняется параллельность плоскостей $(0001)_\alpha$ и $(01\bar{3})_\beta$, но направление $[\bar{3}2\bar{3}0]$ будет отклонено от направления $[\bar{3}11]$ исходной фазы на 0.4579° . Из-за этого отклонения получается, что ориентационное соотношение Бюргерса выполняется не совсем точно по направлению.

Важной особенностью $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения в цирконии является то, что сдвиг при деформации решетки аустенита и сдвиг при деформации мартенсита при инвариантной решетке имеют одну общую плоскость, в которой лежат их направления сдвига и нормали к плоскости сдвига, как на рис. 2а. В ранее исследованных нами других мартенситных превращениях эти сдвиги не имели такой общей плоскости, поэтому сдвиг при деформации инвариантной решетки не мог компенсировать значительную часть деформации формы, вызванной деформацией решетки. В данном мартенситном превращении локализованный сдвиг по СЛС почти возвращает форму α -кристалла к форме его прообраза в β -фазе.

ВЫВОДЫ

1. При полиморфном $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении в монокристалле циркония, выращенном методом зонной плавки, образуется структура, состоящая из пакетов параллельных пластин. На

основании анализа экспериментальных результатов в ранее опубликованных работах предложено рассматривать пакет как единичный мартенситный кристалл.

2. Построен вариант кристаллографической теории мартенситного превращения для $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения в монокристалле циркония. Согласно теории механизм превращения включает главные характеристики мартенситного превращения: деформацию решетки и деформацию при инвариантной решетке. В данном мартенситном превращении деформация при инвариантной решетке идет до достижения формы кристалла, совпадающей с формой прообраза.

3. Деформация мартенсита при инвариантной решетке складывается из двух частей. Первая (основная) часть возвращает форму кристалла к размерам его прообраза в базисной плоскости (0001) . Данная деформация состоит из скольжения по двум кристаллографически эквивалентным призматическим плоскостям. Скольжение сосредоточено в узких слоях локализованного сдвига, что приводит к образованию пластинчатой структуры пакета. Вторая часть окончательно возвращает форму кристалла к форме прообраза. Она состоит из скольжения по пирамидальным плоскостям. Важной особенностью $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения в цирконии (титане, гафнии) является то, что сдвиг при деформации решетки аустенита и сдвиг при деформации мартенсита при инвариантной решетке имеют одну общую плоскость, в которой лежат их направления сдвига и нормали к плоскости сдвига. Этот факт облегчает восстановление формы и способствует росту больших кристаллов мартенсита.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (темы «Структура» № 122021000033-2 и «Давление» № 122021000032-5).

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Расчет плоскости и направления сдвига, матрицы K и угла релаксационного поворота при мартенситном превращении в цирконии. (Расчет выполнен на компьютере с помощью программы Маткад 11.)

Расчет плоскости и направления сдвига, матрицы K и угла релаксационного поворота при мартенситном превращении в цирконии. (Расчет выполнен на компьютере с помощью программы Маткад 11.)

$$x := -0.7 \quad y := 0.5 \quad z := 0.5$$

$$B2 := \begin{pmatrix} 0.9010489 & -0.0694416 & -0.0694416 \\ 0.06055234 & 1.05024222 & 0.05024222 \\ 0.06055234 & 0.05024222 & 1.05024222 \end{pmatrix}$$

Given

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 1 \quad \left| B2 \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right| = 1$$

$$w := \text{Minerr}(x, y, z)$$

$$w = \begin{pmatrix} -0.731739 \\ 0.481953 \\ 0.481953 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} := w \quad H1 := \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad F1 := B2 \cdot H1 \quad \begin{pmatrix} x1 \\ y1 \\ z1 \end{pmatrix} := F1 \quad O1 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \times F1 \quad \begin{pmatrix} x2 \\ y2 \\ z2 \end{pmatrix} := O1$$

$$N := \frac{F1}{z1} \cdot 2 \quad N = \begin{pmatrix} -2.988306 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad C := \frac{O1}{z2} \cdot 3 \quad C = \begin{pmatrix} 4.015653 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \text{N и C - направление и плоскость сдвига пластин в пакете без учета релаксационного поворота (он же кристалл } \alpha\text{-фазы) относительно исходной системы координат}$$

$$\begin{pmatrix} x11 \\ y11 \\ z11 \end{pmatrix} := \frac{F1}{z1} \cdot 2$$

$$\begin{pmatrix} x12 \\ y12 \\ z12 \end{pmatrix} := \frac{O1}{z2} \cdot 3$$

$$D1 := \sqrt{x11^2 + y11^2 + z11^2} \quad D1 = 4.114605$$

$$D2 := \sqrt{x12^2 + y12^2 + z12^2} \quad D2 = 5.841701$$

$$K := \begin{pmatrix} \frac{x11}{D1} & \frac{y11}{D1} & \frac{z11}{D1} \\ \frac{x12}{D2} & \frac{y12}{D2} & \frac{z12}{D2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$K = \begin{pmatrix} -0.726268 & 0.486073 & 0.486073 \\ 0.687412 & 0.513549 & 0.513549 \\ 0 & 0.707107 & -0.707107 \end{pmatrix}$$

$$\phi := \frac{\arccos\left(\frac{x \cdot x1 + y \cdot y1 + z \cdot z1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \cdot \sqrt{x1^2 + y1^2 + z1^2}}\right)}{\pi} \cdot 180$$

$$\phi = 0.457964^\circ$$

$$\arcsin\left(\frac{|H1 - F1|}{2}\right) \cdot \frac{180 \cdot 2}{\pi} = 0.457964^\circ$$

ϕ - угол релаксационного поворота

K - матрица перехода от исходной кубической системы координат к кубической системе координат, привязанной к СЛС

$$R1 := \begin{pmatrix} 0.999967 & -5.727784 \times 10^{-3} & -5.727784 \times 10^{-3} \\ 5.727784 \times 10^{-3} & 0.999984 & -1.640402 \times 10^{-5} \\ 5.727784 \times 10^{-3} & -1.640402 \times 10^{-5} & 0.999984 \end{pmatrix} \quad R1 \cdot N = \begin{pmatrix} -3.011118 \\ 1.982819 \\ 1.982819 \end{pmatrix} \quad N1 := \frac{R1 \cdot N}{1.982819}$$

$$N1 = \begin{pmatrix} -3.03721 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$R1 \cdot C = \begin{pmatrix} 3.981154 \\ 3.022904 \\ 3.022904 \end{pmatrix}$$

$$C1 := \frac{R1 \cdot C}{3.022904} \cdot 3 \quad C1 = \begin{pmatrix} 3.950989 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

B1 и C1 - направление и плоскость сдвига пластин в пакете с учетом релаксационного поворота

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гундырев В.М., Зельдович В.И. Кристаллографический анализ мартенситного превращения В2→В19' в никелиде титана // Изв. РАН. Сер. физическая. 2012. Т. 76. № 1. С. 24–28.
2. Гундырев В.М., Зельдович В.И., Счастливцев В.М. Кристаллографический анализ и механизм мартенситного превращения в сплавах железа // ФММ. 2020. Т. 121. № 11. С. 1142–1161.
3. Гундырев В.М., Зельдович В.И. Релаксационный поворот при мартенситном превращении в сплавах с термоупругим и нетермоупругим мартенситом // ФММ. 2023. Т. 124. № 4. С. 409–414.
4. Гундырев В.М., Калетина Ю.В. Кристаллографический анализ и механизм мартенситного превращения в сплаве Гейслера Ni47Mn42In11 // ФММ. 2019. Т. 120. № 11. С. 1193–1199.
5. Гундырев В.М., Зельдович В.И. Кристаллографический анализ и механизм термоупругого мартенситного превращения в сплавах Гейслера с семислойной структурой мартенсита // ФММ. 2022. Т. 123. № 1. С. 27–34.
6. Дуглас Д.Л. Металловедение циркония. М.: Атомиздат, 1975. 360 с.
7. Добромислов А.В., Талуц Н.И. Структура циркония и его сплавов. Екатеринбург: Изд. УрО РАН, 1997. 228 с.
8. Хлебникова Ю.В., Сазонова В.А., Родионов Д.П., Вильданова Н.Ф., Егорова Л.Ю., Калетина Ю.В., Солодова И.Л., Умова В.М. Формирование макро- и микроструктуры при $\beta \rightarrow \alpha$ превращении в монокристаллах циркония // ФММ. 2009. Т. 108. № 3. С. 267–275.
9. Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Сазонова В.А., Егорова Л.Ю., Калетина Ю.В. Особенности формирования структуры псевдомонокристалла титана при $\beta \rightarrow \alpha$ (ОЦК→ГПУ) полиморфном превращении // ФММ. 2013. Т. 114. № 9. С. 818–830.
10. Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Сазонова В.А., Егорова Л.Ю., Калетина Ю.В. Исследование структуры псевдомонокристалла иодидного α -титана // Деформация и разрушение материалов. 2013. № 8. С. 3–12.
11. Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Акшенцев Ю.Н., Егорова Л.Ю., Суаридзе Т.Р. Особенности структуры литого гафния // ФММ. 2018. Т. 119. № 6. С. 590–601.
12. Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Суаридзе Т.Р., Егорова Л.Ю., Казанцев В.А., Николаева Н.В. EBSD-анализ структуры литых и закаленных сплавов гафний-титан // ФММ. 2018. Т. 119. № 9. С. 913–922.
DOI: 10.1134/S0015323018090073
13. Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Егорова Л.Ю., Суаридзе Т.Р. Кристаллографические особенности структуры α -фазы гафния и сплавов гафний-титан // ЖТФ. 2019. Т. 89. Вып. 1. С. 86–98.
DOI: 10.21883/JTF.2019.01.46968.86-18
14. Burgers W.G. On process of Transition of the cubic-body centered modification into the hexagonal-close packed modification of zirconium // Physica. 1934. V. 1. № 7. P. 561–586.
15. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: Мир, 1974. 496 с.
16. Чернов Д.К. Избранные труды по металлургии и металловедению. М.: Наука, 1983. 447 с.
17. Фарбер В.М., Селиванова О.В., Морозова А.Н., Хотинов В.А., Хадыев М.С., Жилияков А.Ю. Дислокационная структура в полосе локализованной деформации, формирующейся при растяжении нормализованного образца стали 09Г2С // Физическая мезомеханика. 2023. Т. 26. С. 53–60.
18. Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977. 238 с.
19. Счастливцев В.М., Мирзаев Д.А., Яковлева И.Л. Структура термически обработанной стали. М.: Металлургия, 1994. 288 с.

CRYSTALLOGRAPHIC THEORY AND MECHANISM OF THE POLYMORPHIC $\beta \rightarrow \alpha$ TRANSITION IN A ZIRCONIUM SINGLE CRYSTALV. M. Gundyrev^{1,*}, V. I. Zel'dovich¹, and Yu. V. Khlebnikova^{1,**}¹Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620108 Russia

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

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

A crystallographic theory of the polymorphic bcc $\rightarrow$ hcp transition in a zirconium single crystal has been formulated. According to the theory, a mechanism of the transition includes the main parameters of the martensitic transformation, namely, the lattice strain and the strain in an invariant lattice. The package of parallel plates that are formed during the transformation is considered as a single martensite crystal. It has been established that the deformation of martensite during this transition (with an invariant lattice) is aimed at restoring the shape of the initial section of the bcc phase (prototype), rather than at obtaining an invariant plane. The calculation shows that shape restoration in the basal plane of the hcp phase is mainly caused by the action of two systems of prismatic sliding. The sliding is concentrated in narrow layers of localized shear, which leads to the formation of a lamellar structure of the package. The shape restoration along the c axis occurs due to the pyramidal sliding.

Keywords: zirconium single crystal, polymorphic transition, lattice strain, pyramidal and prismatic sliding