

Диаграммы Эвери, Блэкмана, давление Коши и анализ упругих свойств кристаллической решетки сплавов $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ (ат. %) и $\text{TiNi} - \text{TiFe}$ с мартенситными превращениями и без них

С. А. Муслов, А. И. Лотков, П. Ю. Сухочев

Для анализа упругих свойств монокристаллов $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ (ат. %) и $\text{TiNi} - \text{TiFe}$, в которых В2 фаза может быть, как неустойчивой, так и устойчивой по отношению к мартенситным превращениям, применены диаграммы Эвери и Блэкмана, которые известны как два способа характеристики упругих свойств кубических кристаллов. Рассчитаны парные корреляционные связи между параметрами (s_2, s_3) , (s_3, s_1) и (F_{44}, F_{12}) . Рассмотрена эволюция величины давления Коши p_C в зависимости от содержания атомов железа в кристаллической решетке В2 фазы сплавов. Установлено, что независимо от состава сплавов давление Коши больше нуля и почти монотонно уменьшается от 100,5 до 35,0 ГПа с увеличением содержания атомов Fe в кристаллической решетке В2 фазы $\text{TiNi} - \text{TiFe}$ и повышении её устойчивости по отношению к мартенситным превращениям (вплоть до полной стабилизации). Такая эволюция p_C соответствует данным, согласно которым значительная составляющая часть сил связи в TiNi является металлической связью, а при увеличении концентрации атомов Fe в сплавах вместо атомов Ni и приближении к составу TiFe возрастает доля ковалентной составляющей сил связи.

Ключевые слова: $\text{TiNi} - \text{TiFe}$, упругие постоянные, диаграммы Эвери и Блэкмана, давление Коши, мартенситные превращения.

DOI: 10.30791/1028-978X-2022-12-5-11

Введение

Физико-механические свойства В2 фазы поли- и монокристаллов двойных сплавов на основе TiNi и сплавов квазибинарного разреза $\text{TiNi} - \text{TiFe}$ в предмартенситном интервале температур и концентраций хорошо исследованы [1 – 4]. В2 фаза сплавов $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50-x}\text{Fe}_x$ при $x \leq 10$ ат. % испытывает термоупругие мартенситные превращения (МП), а при $x \leq 5$ ат. % она обладает весьма низкими упругими свойствами, которые дополнительно понижаются накануне точек перехода, как при изменении температуры, так и концентрации атомов Fe. “Размягчение” упругих постоянных В2 фазы наблюдается во всех основных системах сдвига и, соответственно, всех упругих постоянных второго порядка, а также их комбинаций, и наиболее явно это демонстрируют сдвиговые модули c_{44} и

$C' = (c_{11} - c_{12})/2$, которые накануне переходов снижаются до аномально низких значений. Для В2 фазы монокристаллов разреза $\text{TiNi} - \text{TiFe}$ в зависимости от содержания атомов Fe характерна различная по типу упругая анизотропия, а при концентрации атомов Fe равной 25 ат. % кристаллическая решетка В2 фазы практически упруго изотропна: $c_{44} = C'$.

Наибольшая величина модуля упругости E (190 ГПа) зафиксирована у В2 фазы интерметаллида TiFe , который наиболее далек от сплавов с мартенситными превращениями. Наименьшая величина модуля упругости E (68 ГПа) В2 фазы наблюдается у поликристаллов двойных сплавов на основе TiNi с избыточным содержанием атомов Ni относительно эквиатомного состава, испытывающих при охлаждении последовательность мартенситных превращений $\text{B2} \rightarrow \text{R} \rightarrow \text{B19}'$. Средняя

величина модуля Юнга сплавов по разрезу TiNi – TiFe составляет 112,43 ГПа, стандартное отклонение SD — 45,57, коэффициент вариации CV — 0,41 [5]. У сплавов на основе TiNi с мартенситными превращениями отношение нанотвердости H к модулю Юнга E больше 0,035, что выше этих отношений для обычных металлов и сплавов [6], и обусловлено “размягчением” упругих постоянных (C' и c_{44}) кристаллической решётки B2 фазы перед указанными выше мартенситными превращениями.

Минимальная величина коэффициента Пуассона μ в образцах B2 фазы монокристаллов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) в зависимости от кристаллографического направления составляет 0,10, а максимальная — 0,73 (выше теоретического предела для поликристаллических материалов). Установлено, что кристаллы на основе TiNi относятся к так называемым частичным ауксетикам — материалам с отрицательными значениями коэффициента Пуассона, у которых при этом знаки в парах неравенств $s_{12} < 0$, $s = s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 > 0$ и $s_{12} > 0$, $s = s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 < 0$ противоположны [7]. В B2 фазе монокристалла TiFe зависимость коэффициента Пуассона от кристаллографического направления существенно ниже, чем в TiNi: $\mu_{\min} = 0,19$ и $\mu_{\max} = 0,43$, соответственно.

С учетом условий Коши для кубических кристаллов в [9] для монокристалла Ti – 48 % Ni – 2 % Fe (ат. %) получены следующие значения упругих постоянных решётки третьего порядка: $c_{111} = -1,19$ ТПа, $c_{112} = -0,51$ ТПа, $c_{123} = -0,57$ ТПа [8], которые являются коэффициентами разложения упругой энергии кристалла по степеням деформации при кубических членах. На микроскопическом уровне c_{ijk} определяют асимметрию межатомных связей относительно растяжения и сжатия кристаллов, что обуславливает решёточный ангармонизм [9].

Несмотря на значительный прогресс в изучении упругих характеристик кристаллической решетки B2 фазы интерметаллидов на основе титана, поиск новых подходов к их анализу представляет интерес для дальнейшего развития представлений о природе мартенситных превращений в этих сплавах.

Цель исследования — на основе диаграмм Эвери и Блэкмана изучение взаимосвязи между упругими постоянными кубической кристаллической решетки монокристаллов двойного сплава на основе TiNi и сплавов квазибинарного разреза TiNi – TiFe и возможностью осуществления в них мартенситных превращений в зависимости от состава.

Материалы и методы

В данной работе при анализе упругих свойств ОЦК(B2) кристаллов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и TiNi – TiFe применены диаграммы Эвери и Блэкмана (Every’s and Blackman’s diagrams) [10]. Диаграммы Эвери и Блэкмана с двумя безразмерными отношениями упругих констант в качестве координат обычно используют для анализа упругих свойств кристаллов. Химические составы исследованных сплавов TiNi – TiFe, стабильных или неустойчивых по отношению к мартенситным превращениям, испытывающих при охлаждении образцов одно B2 → R и два B2 → R → B19’ мартенситных превращения, приведен в табл. 1.

Таблица 1

Химический состав сплавов и мартенситные превращения в них

Table 1

Chemical composition of alloys and martensitic transformations in them

№ сплава	Состав, ат. % (остальное Ti)		Мартенситные превращения
	Ni	Fe	
1	—	50	нет (B2)
2	25	25	
3	40	10	B2 → R
4	45	5	
5	48	2	B2 → R → B19’
6	51	—	

Упругие постоянные и коэффициенты податливости, характеризующие кубические кристаллы, к которым относят исследованные в данной работе монокристаллы, связаны соотношениями [11]:

$$c_{11} = \frac{s_{11} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})},$$

$$c_{12} = \frac{-s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})},$$

$$c_{44} = \frac{1}{s_{44}};$$

$$s_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})},$$

$$s_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})},$$

$$s_{44} = \frac{1}{c_{44}}.$$

Наравне с упругими постоянными [12] и коэффициентами податливости весьма широкое распространение получила характеристика упругой анизотропии кубических сред — коэффициент упругой анизотропии Зинера $A = 2 \frac{s_{11} - s_{12}}{s_{44}} = 2 \frac{c_{44}}{c_{11} - c_{12}} = \frac{c_{44}}{C'}$, равный отношению 2-х главных модулей сдвига в кубическом кристалле [13].

В данной работе используются определённые наборы параметров упругости кристаллов. Один из них имеет размерность упругих постоянных,

$$s_1 = c_{11} + 2c_{44},$$

два остальных — безразмерные:

$$s_2 = \frac{c_{11} - c_{44}}{s_1},$$

$$s_3 = \frac{c_{11} - c_{12} - 2c_{44}}{s_1},$$

где параметр s_1 входит в выражение для скорости акустических волн [110] L в кубическом кристалле, а величина параметра s_3 характеризует упругую анизотропию.

Обратные соотношения для упругих констант имеют вид:

$$c_{11} = \frac{s_1(2s_2 + 1)}{3},$$

$$c_{12} = \frac{s_1(4s_2 - 3s_3 - 1)}{3},$$

$$c_{44} = \frac{s_1(1 - s_2)}{3}.$$

Параметры s_1 , s_2 и s_3 применяют в диаграммах Эвери.

Диаграмма Блэкмана — это график в координатах из двух безразмерных отношений:

$$F_{12} = \frac{c_{12}}{c_{11}},$$

$$F_{44} = \frac{c_{44}}{c_{11}}.$$

В терминах Эвери коэффициент упругой анизотропии равен

$$A = \frac{1 - s_2}{3s_3 / 2 - s_2 + 1},$$

а в терминах Блэкмана —

$$A = 2 \frac{F_{44}}{1 - F_{12}}.$$

Для упруго изотропных кристаллических сред $s_3 = 0$, $F_{12} = 1 - 2F_{44}$ и $A = 1$.

Коэффициент Пуассона в кубических кристаллах может быть выражен через параметры Эвери. Например, для высокосимметричного направления $\langle 100 \rangle$ (ребра куба), коэффициент Пуассона, определяемый через коэффициенты податливости, как отношение $-\frac{s_{12}}{s_{11}}$ [14], равен $\mu_{100} = \frac{3s_3 + 1 - 4s_2}{3(s_3 - 2s_2)}$ и не зависит от направления поперечной деформации.

Переменные Эвери в терминах Блэкмана имеют вид:

$$s_2 = \frac{1 - F_{44}}{1 + 2F_{44}},$$

$$s_3 = \frac{1 - F_{12} - 2F_{44}}{1 + 2F_{44}},$$

и наоборот:

$$F_{44} = \frac{1 - s_2}{2s_2 + 1},$$

$$F_{12} = \frac{4s_2 - 3s_3 - 1}{2s_2 + 1}.$$

Полезный физический параметр — давление Коши, определяемый как разница между двумя упругими константами $p_C = c_{12} - c_{44}$ [15]. Этот параметр дает представление о типе химической связи между атомами [16]. Соотношение Коши $c_{12} = c_{44}$ будет выполняться, если силы взаимодействия между атомами являются центральными [17].

Результаты и обсуждение

Диаграммы Эвери и Блэкмана не получили широкого применения в физике твердого тела, однако весьма информативны. На рис. 1 представлена типичная диаграмма Эвери в координатах (s_2, s_3) . Здесь и на рис. 2–4 маркерами обозначены данные по кристаллам исследованных сплавов: черными — для сплавов, испытывающих два мартенситных превращения, с узорной заливкой — одно мартенситное превращение и без заливки — со стабильной или устойчивой ОЦК (B2) решеткой по отношению к мартенситным превращениям. Пунктирными линиями обозначены линии равного уровня коэффициента Пуассона μ от 0 до 0,5. Как следует из диаграммы у сплавов с мартенситными превращениями s_3 меньше, а s_2 , как правило, больше, чем у сплавов, устойчивых к мартенситным превращениям. Для сплавов с одним МП $s_3 < -0,12$, $s_2 > 0,53$, с двумя МП $s_3 < -0,15$, $s_2 > 0,56$, без МП $s_3 > -0,03$, $s_2 < 0,54$. В соответствии с численными

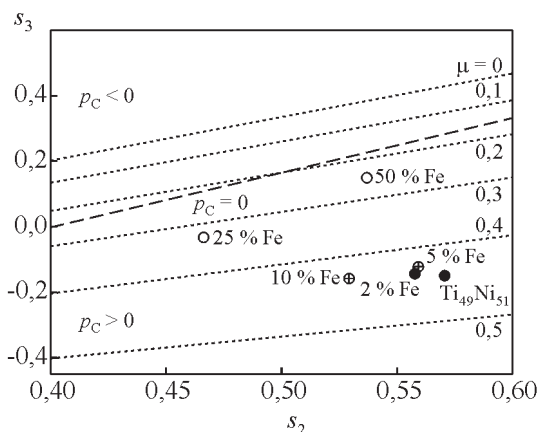


Рис. 1. Диаграмма Эвери (s_2, s_3) сплавов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$. p_C — давление Коши. Маркерами обозначены данные: черными — для сплавов, испытывающих два мартенситных превращения, с узорной заливкой — одно мартенситное превращение и без заливки — с устойчивой ОЦК (B2) решеткой (без мартенситных превращений).

Fig. 1. Every diagram (s_2, s_3) of $Ti_{49}Ni_{51}$ alloys (at. %) and $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$. p_C — Cauchy pressure. Markers indicate the data: black — for alloys experiencing two martensitic transformations, with patterned filling — one martensitic transformation and without filling — with a stable BCC (B2) lattice (without martensitic transformations).

ми значениями коэффициента Пуассона сплавов разреза TiNi – TiFe, представленными в [7], точки (s_2, s_3) расположены между соответствующими линиями. Жирная пунктирная линия $s_3 = 5s_2/3 - 2/3$, отвечающая условию Коши $c_{12} = c_{44}$, делит плоскость (s_2, s_3) на области с давлением Коши $p_C < 0$ и $p_C > 0$. Видно, что все исследованные сплавы попадают во вторую область с положительными значениями давления Коши $p_C > 0$ ($c_{12} > c_{44}$). К первой области ($p_C < 0$) ближе всего сплавы $Ti_{50}Ni_{25}Fe_{25}$ и $Ti_{50}Fe_{50}$ со стабильной B2 фазой. Корреляционная связь между параметрами s_2 и s_3 — обратная, средней силы ($r = -0,33$).

На диаграмме Блэкмана значения параметра F_{44} меньше у сплавов, подверженных фазовым переходам мартенситного типа, при этом значения параметра F_{12} у данных сплавов, наоборот, выше. Для сплавов с одним МП $F_{12} > 0,75, F_{44} < 0,23$, с двумя МП $F_{12} > 0,79, F_{44} < 0,21$, без МП $F_{12} < 0,5, F_{44} > 0,22$. Точки диаграммы (F_{44}, F_{12}) для всех шести сплавов разреза TiNi – TiFe лежат в области с положительными значениями давления Коши так же, как и на рис. 1. Так же, как и на рис. 1, к области, для которой $p_C < 0$, ближе всего сплавы $Ti_{50}Ni_{25}Fe_{25}$ и $Ti_{50}Fe_{50}$ со стабильной B2 фазой.

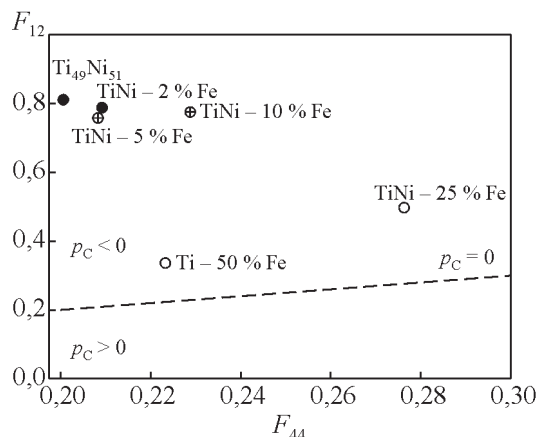


Рис. 2. Диаграмма Блэкмана (F_{44}, F_{12}) сплавов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$.

Fig. 2. Blackman diagram (F_{44}, F_{12}) of $Ti_{49}Ni_{51}$ (at. %) and $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$ alloys.

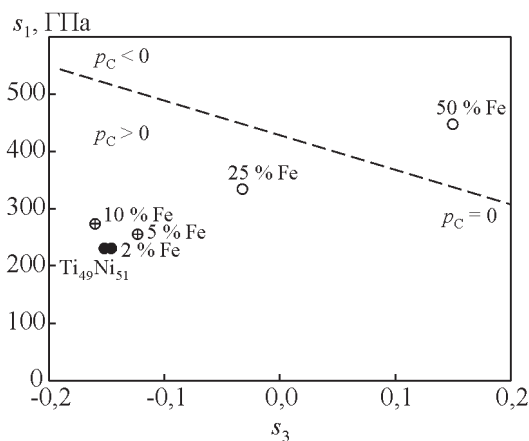


Рис. 3. Диаграмма Эвери (s_3, s_1) сплавов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$.

Fig. 3. Every diagram (s_3, s_1) of $Ti_{49}Ni_{51}$ (at. %) and $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$ alloys.

Корреляционная связь между параметрами F_{44} и F_{12} — обратная, средней силы ($r = -0,54$).

На диаграмме Эвери (s_3, s_1) (рис. 3) расчетные точки, отвечающие сплавам с мартенситными превращениями, имеют координаты с меньшими значениями как по абсциссе s_2 , так и по ординате s_1 , то есть расположены ближе к началу координат, чем точки для сплавов $Ti_{50}Ni_{25}Fe_{25}$ и $Ti_{50}Fe_{50}$ со стабильной B2 фазой. Для сплавов с одним МП $s_1 < 273$ ГПа, с двумя МП $s_1 < 230$ ГПа, без МП $s_1 > 333$ ГПа. Среди исследованных сплавов к линии тренда для точек зависимости $s_1(s_3)$, соответствующих $p_C = 0$, наиболее близки интерметаллиды $Ti_{50}Ni_{25}Fe_{25}$ и $Ti_{50}Fe_{50}$ с устойчивой к мартенсит-

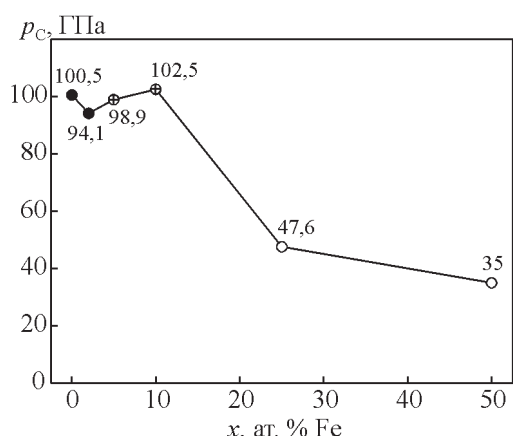


Рис. 4. Давление Коши сплавов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$.

Fig. 4. Cauchy pressure of $Ti_{49}Ni_{51}$ (at. %) and $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$ alloys.

ным превращениям B2 решеткой. Отметим, что для точек $s_1(s_3)$, соответствующих $p_C = 0$, $s_1 = 5c_{44}/(1 - s_3)$.

На рис. 4 представлена концентрационная зависимость давления Коши от содержания атомов Fe в сплавах TiNi – TiFe. Видно, что величина давления Коши сплавов TiNi – TiFe больше нуля ($p_C > 0$) и почти монотонно уменьшается от 100,5 до 35,0 ГПа при увеличении содержания атомов Fe в сплавах и повышении их устойчивости по отношению к мартенситным превращениям. Такое изменение p_C в сплавах TiNi – TiFe соответствует известным данным [18], согласно которым значительная составляющая часть сил связи в TiNi является металлической связью, а при увеличении концентрации атомов Fe в сплавах вместо атомов Ni и приближении к составу TiFe возрастает доля ковалентной составляющей сил связи.

Отметим также, что давление Коши $p_C = c_{12} - c_{44}$ для сплава $Ti_{50}Fe_{50}$, равное по нашим расчетам 35 ГПа хорошо согласуется с данными $p_C = 32,1$ ГПа, определенными исходя из первых принципов [19].

Выводы

Области параметров (s_1, s_2, s_3) и (F_{44}, F_{12}) $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и $Ti_{50}Ni_{50-x}Fe_x$ лежат в разных зонах диаграмм Эвери и Блэкмана, соответственно, в зависимости от того испытывают сплавы два $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$, одно $B2 \rightarrow R$ или не испытывают мартенситные превращения. Для сплавов с одним МП $s_1 < 273$ ГПа, $s_2 > 0,53$, $s_3 < -0,12$, $F_{12} > 0,75$,

$F_{44} < 0,23$; для сплавов с двумя МП $s_1 < 230$ ГПа, $s_2 > 0,56$, $s_3 < -0,15$, $F_{12} > 0,79$, $F_{44} < 0,21$; для сплавов без МП $s_1 > 333$ ГПа, $s_2 < 0,54$, $s_3 > -0,03$, $F_{12} < 0,5$ и $F_{44} > 0,22$.

Парные корреляционные связи между параметрами (s_2, s_3) , (s_3, s_1) и (F_{44}, F_{12}) в исследованных сплавах обратные, средней силы: $r = -0,33$, $-0,44$ и $-0,54$, соответственно. В соответствии с численными значениями коэффициента Пуассона для сплавов $Ti_{49}Ni_{51}$ (ат. %) и разреза TiNi – TiFe данные (s_2, s_3) расположены между соответствующими линиями равного уровня μ .

Независимо от состава сплавов давление Коши больше нуля и почти монотонно уменьшается (от 100,5 до 35,0 ГПа) при увеличении содержания атомов Fe в кристаллической решетке B2 фазы TiNi – TiFe и повышении её устойчивости (вплоть до стабилизации) по отношению к мартенситным превращениям. Такая эволюция p_C соответствует данным, согласно которым значительная составляющая часть сил связи в TiNi является металлической связью, а при увеличении концентрации атомов Fe в сплавах вместо атомов Ni и приближении к составу TiFe возрастает доля ковалентной составляющей сил связи.

Литература

1. Корнилов И.И., Белоусов О.К., Качур Е.В. Никелид титана и другие сплавы с эффектом памяти. Москва, Изд. Наука, 1977, 180 с.
2. Mercier O., Melton K.N., Gremaud G., Hagi J. Single-crystal elastic constants of the equiatomic NiTi alloy near the martensitic transformation. Journal of Applied Physics, 1980, v. 51, no. 3, pp. 1833 – 1834.
3. Закревский И.Г., Кокорин В.В., Муслев С.А., Хачин В.Н., Шевченко А.Д. Мартенситные превращения и свойства сплавов TiNi – TiFe. Металлофизика, 1986, т. 8, № 6, с. 91 – 95.
4. Муслев С.А., Хачин В.Н., Пушин В.Г., Чумляков Ю.И. Упругие свойства и структура сплавов TiNi – TiFe накануне мартенситных. Письма о материалах, 2015, т. 5, вып. 4, с. 420 – 423. DOI: 10.22226/2410-3535-2015-4-420-423.
5. Муслев С.А., Лотков А.И. Параметры упругости монокристаллов интерметаллидов TiNi и TiFe. Перспективные материалы, 2018, № 11, с. 5 – 16. DOI: 10.30791/1028-978X-2018-11-5-16.
6. Cheng Yang-Tse, Grummon D.S. Indentation in shape memory alloys. In: Yang F., Li J.C.M. Micro and nano mechanical testing of materials and devices. Springer Science + Business Media, LLC, 2008. DOI: 10.1007/978-0-387-78701-5.
7. Муслев С.А., Лотков А.И., Тимкин В.Н. Коэффициент Пуассона TiNi. Перспективные материалы, 2021, № 12, с. 5 – 20.

8. Муслов С.А., Лотков А.И. К расчету упругих постоянных третьего порядка кристаллов сплава на основе TiNi с памятью формы. Перспективные материалы. 2018, № 8, с. 5 – 10. DOI: 10.30791/1028-978X-2018-8-5-10.
9. Хантингтон Г. Упругие постоянные кристаллов. УФН, 1961, т. LXXIV, вып. 2, с. 303 – 352.
10. Paszkiewicz T., Wolski S. Elastic properties of cubic crystals: Every's versus Blackman's diagram. ArXiv: 0710.1057v1 [cond-mat.mtrl-sci] 4 Oct 2007, 8 p. <https://arxiv.org/pdf/0710.1057.pdf>
11. Nye J.F. Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices. Clarendon Press, 1985, 329 p.
12. Францевич И.Н. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. Киев, Изд. Наукова Думка, 1982, 286 с.
13. Муслов С.А., Лотков А.И., Арутюнов С.Д. Экстремумы упругих свойств кубических кристаллов. Известия ВУЗов. Серия Физика. 2019, т. 62, № 8(740), с. 102 – 111.
14. Wang X.F., Jones T.E., Li W., Zhou Y.C. Extreme Poisson's ratios and their electronic origin in B2 CsCl-type AB intermetallic compounds. Physical review B, 2012, v. 85, iss. 13, art. 134108.
15. Eberhart M.E., Jones T.E. Cauchy pressure and the generalized bonding model for nonmagnetic bcc transition metals. Physical review B, 2012, v. 86, iss. 12, art. 134106.
16. Pettifor DG. Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics. Journal of Materials Science and Technology, 1992, v. 8, pp. 345 – 349.
17. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. Москва, Изд. Иностранная литература, 1958, 488 с.
18. Wang F.E. Bonding Theory for Metals and Alloys. Elsevier Science, 2005, 206 p. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-51978-8.X5000-4>
19. Cao Yong, Luo Penghui, Xu Yang, Zhou Shenggang. Theoretical prediction of anisotropic in elasticity, density of states and thermodynamic properties of Ti-X (X = Fe, Co, Zn). The European Physical Journal B, 2021, v. 94, art. 246.
20. Metallofizika [Metallophysics], 1986, v. 8, no. 6, pp. 91 – 95 (in Russ.).
4. Muslov S.A., Khachin V.N., Pushin V.G., Chumlyakov Yu.I. Uprugie svoystva i struktura splavov TiNi-TiFe nakanune martensitnyh prevrashchenij [Elastic properties and structure of TiNi-TiFe alloys before of martensitic transformations]. Pis'ma o materialah [Letters on materials], 2015, v. 5, no. 4, pp. 420 – 423. DOI: 10.22226/2410-3535-2015-4-420-423. (In Russ.).
5. Muslov S.A., Lotkov A.I. Parametry uprugosti monokristallov intermetallidov TiNi i TiFe. [Elasticity parameters of TiNi and TiFe intermetallic single crystals]. Perspektivnye materialy [Advanced materials], 2018, no. 11, p. 5 – 16 (in Russ.).
6. Cheng Y.-T., Grummon D.S. Indentation in Shape Memory Alloys. In: F. Yang and J.C.M. Li (eds.). Micro and nano mechanical testing of materials and devices. Springer Science+Business Media, LLC, 2008. DOI: 10.1007/978-0-387-78701-5.
7. Muslov S.A., Lotkov A.I., Timkin V.N. Koeffitsient Puassona TiNi [Poisson's Ratio TiNi]. Perspektivnye materialy [Advanced materials], 2021, no. 12, pp. 5 – 20 (In Russ.).
8. Muslov S.A., Lotkov A.I. K raschetu uprugih postoyannyh tret'ego poryadka kristallov splava na osnove TiNi s pamyat'yu formy [To the calculation of elastic constants of the third order of TiNi-based alloy crystals with shape memory]. Perspektivnye materialy. [Advanced materials], 2018, no. 8, pp. 5 – 10 (in Russ.).
9. Khantington G. Uprugiye postoyannyye kristallov [Elastic Constants of Crystals]. Uspekhi fizicheskikh nauk [Physics Uspekhi], 1961, vol. LXXIV, iss. 2, pp. 303 – 352.
10. Paszkiewicz T., Wolski S. Elastic properties of cubic crystals: Every's versus Blackman's diagram. ArXiv: 0710.1057v1 [cond-mat.mtrl-sci] 4 Oct 2007, 8 p. <https://arxiv.org/pdf/0710.1057.pdf>.
11. Nye J.F. Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices. Clarendon Press, 1985, 329 p.
12. Frantsevich I.N., Voronov F.F., Bakuta S.A. Uprugiye postoyannyye i moduli uprugosti metallov i nemetallov. Spravochnik [Elastic constants and modules of elasticity of metals and nonmetals. Handbook]. Kiev, Naukova Dumka Publ., 1982, 286 p.
13. Muslov S.A., Lotkov A.I., Arutyunov S.D. Ekstremumy uprugih svoystv kubicheskikh kristallov [Extremes of elastic properties of cubic crystals]. Izvestiya VUZov. Seriya Fizika [Russian Physics Journal], 2019, v. 62, no. 8(740), pp. 102 – 111 [in Russ.].
14. Wang X.F., Jones T.E., Li W., Zhou Y.C. Extreme Poisson's ratios and their electronic origin in B2 CsCl-type AB intermetallic compounds. Physical review B, 2012, v. 85, iss. 13, art. 134108.
15. Mark E. Eberhart, Travis E. Jones. Cauchy pressure and the generalized bonding model for nonmagnetic bcc transition metals. Physical review B, 2012, v. 86, iss. 12, art. 134106.

References

1. Kornilov I.I., Belousov O.K., Kachur E.V. Nikelid titana i drugie splavy s efektom pamyati [Titanium nickelide and other alloys with memory effect], Moscow, Nauka, 1977, 180 p. (In Russ.).
2. Mercier O., Melton K. N., Gremaud G., Hagi J. Single-crystal elastic constants of the equiatomic NiTi alloy near the martensitic transformation. Journal of Applied Physics, 1980, v. 51, no. 3, pp. 1833 – 1834.
3. Zakrevskij I.G., Kokorin V.V., Muslov S.A., Khachin V.N., Shevchenko A.D. Martensitnye prevrashcheniya i svoystva splavov TiNi – TiFe [Martensitic transformations and properties of TiNi-TiFe alloys].

16. Pettifor DG. Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics. *Journal of Materials Science and Technology*, 1992, v. 8, pp. 345 – 349.
 17. Born M., Kun H. *Dynamic theory of crystal*. Oxford University Press, 1954, 432 p.
 18. Wang F.E. *Bonding Theory for Metals and Alloys*. Elsevier Science, 2005, 206 p. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-51978-8.X5000-4>.
 19. Cao Y., Luo P., Xu Y., Zhou S. Theoretical prediction of anisotropic in elasticity, density of states and thermodynamic properties of Ti-X (X = Fe, Co, Zn). *The European Physical Journal B*, 2021, v. 94, art. 246.
- Статья поступила в редакцию — 09.06.2022 г.
после доработки — 24.06.2022 г.
принята к публикации — 27.06.2022 г.*

Муслов Сергей Александрович — ГБОУ ВПО Московский Государственный Медико-Стоматологический Университет им. А.И. Евдокимова Минздрава РФ (127473, Москва, ул. Десятская, 20, стр. 1), доктор биологических наук, профессор, специалист в области материаловедения сплавов с памятью формы. E-mail: muslov@mail.ru.

Лотков Александр Иванович — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (634055, Томск, пр. Академический, 2/4), доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией, специалист в области физики металлов.

Сухочев Павел Юрьевич — МГУ имени М.В. Ломоносова, механико-математического факультет (119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, 1), научный сотрудник, специалист в области материаловедения.

Every, Blackman diagrams, Cauchy pressure and analysis of elastic properties of the crystal lattice of $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ (at. %) and TiNi – TiFe alloys with and without martensitic transformations

S. A. Muslov, A. I. Lotkov, P. Yu. Sukhochev

In this paper, to analyze the elastic properties of $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ (at. %) and TiNi – TiFe crystals with and without martensitic transformations Every's and Blackman's diagrams are used as two ways to characterize the elastic properties of cubic materials. Paired correlations between the parameters (s_2, s_3) , (s_3, s_1) и (F_{44}, F_{12}) are calculated. The evolution of the Cauchy pressure p_C value depending on the content of iron atoms in the crystal lattice of alloys is considered. It is established that, regardless of the composition of the alloys, the Cauchy pressure is greater than zero and decreases almost monotonically from 100.5 to 35.0 GPa with an increase in the content of Fe atoms in the B2 crystal lattice of the TiNi – TiFe phase and an increase in its stability with respect to martensitic transformations (up to complete stabilization). This evolution of p_C corresponds to the data according to which a significant component of the bonding forces in TiNi is a metallic bond, and with an increase in the concentration of Fe atoms in alloys instead of Ni atoms and approaching the composition of TiFe, the proportion of the covalent component of the bonding forces increases.

Keywords: TiNi – TiFe, elastic constants, Every and Blackman diagrams, Cauchy pressure, martensitic transformations

Muslov Sergey — A.I. Evdokimov Moscow State Medical Stomatological University (MSMSU, 127473 Moscow, Delegatskaya, 20, bd. 1), Dr Sci (Biolog), professor of the department of Normal Physiology and Medical Physics, specialist in the field of materials science of alloys with shape memory. E-mail: muslov@mail.ru.

Lotkov Aleksander — Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (634055, Tomsk, 2/4, pr. Akademicheskii), Dr Sci (Phys-Math), professor, head of material science laboratory of shape memory alloys, specialist in the field of physics of metals.

Sukhochev Pavel Yurievich — Moscow State University named after M.V. Lomonosov, Faculty of Mechanics and Mathematics (119991, Moscow, GSP-1, Leninskie gory, 1), Researcher, specialist in the field of materials science.