

УДК 539.3:669.018.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОПЛАСТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В СПЛАВАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ ТИПА НИКЕЛИДА ТИТАНА

© С.П. Беляев, А.Е. Волков, М.Е. Евард

Россия, Санкт-Петербург, Институт математики и механики СПбГУ

Belyaev S.P., Volkov A.E., Evard M.E. Modelling of micro plastic phenomena in shape memory alloys of TiNi type. Plastic accommodation of martensite has been taken into account in the frames of the general approach of the structure-analytical theory of strength. This has allowed describing the deformation of shape memory alloys at cyclic variations of temperature as well as the two-way shape memory effect.

В последнее время для описания механического поведения сплавов с мартенситным каналом неупругости применяется структурно-аналитическая теория прочности [1]. При этом устанавливается деформационный закон на микроуровне; макроскопическую же деформацию получают путем пространственного усреднения микродеформаций с учетом статистических свойств материала. Результаты многочисленных расчетов показывают, что такой подход дает хорошие результаты при описании пластичности превращения, памяти формы, псевдоупругости и других эффектов. Однако до сих пор не удавалось удовлетворительно описать такие особенности поведения сплавов с памятью формы (СПФ) при теплосменах, как уменьшающийся от цикла к циклу недовозврат деформации (тренировка материала), эффект обратимой памяти формы [2] и другие свойства, связанные с наличием упругой и пластической аккомодации, возникающей при росте кристалла мартенсита. В настоящей работе на основе структурно-аналитической теории прочности сформулирована модель функционально-механического поведения материалов с мартенситными превращениями, включающая учет такой микропластической деформации.

При пространственном усреднении учитывали зернистое строение материала и симметрию кристаллической решетки материала в соответствии с принципами, изложенными в [3]. При этом считали, что в каждом из $1, 2, \dots, \omega, \dots, \Omega$ зерен, составляющих поликристаллический объект, может образоваться N кристаллографически эквивалентных вариантов мартенсита. Если известна матрица тензора дисторсии D относительно кристаллофизического базиса аустенита для одного из вариантов превращения, то матрицы дисторсий D_n для остальных вариантов найдем, поворачивая D операторами, принадлежащими точечной группе симметрии аустенита (для никелида титана – с помощью матриц вращения куба, $n = 1, \dots, 24$):

$$D_n = P_n D P_n^{-1}, \quad n = 1, \dots, N. \quad (1)$$

Объемная доля мартенсита в каждом зерне равна

$$\Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n, \quad n = 1, \dots, N, \quad (2)$$

где $(1/N)\Phi_n$ – относительная объемная доля n -го варианта ориентации мартенсита.

Величина деформации, накопленной в зерне в процессе мартенситного превращения, в кристаллофизическом базисе рассчитывается по формуле

$$\epsilon \Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n, \quad n = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Макроскопическую деформацию моделируемого образца, накопленную за счет мартенситной реакции, находим в результате приведения матриц ϵ^{gr} к лабораторному базису и усреднения по всем зернам:

$$\epsilon^m = \frac{1}{\Omega} \sum_{\omega=1}^{\Omega} R_{\omega} \epsilon_{\omega}^{gr} R_{\omega}^{-1}, \quad (4)$$

где ϵ_{ω}^{gr} – деформация в зерне с ориентацией ω (в кристаллографическом базисе), R_{ω} – матрица поворота, переводящая лабораторный базис в кристаллофизический базис зерна ω .

Для описания кинетики изменения количества Φ_n n -го варианта мартенсита в зерне рассмотрим находящуюся в состоянии равновесия двухфазную систему мартенсит – аустенит. Введем термодинамическую силу F_n^t , представляющую собой разность потенциалов Гиббса единицы объема аустенита и мартенсита, в которую войдет температурная составляющая F_n^{tem} и составляющая F_n^m , связанная с механическими изменениями:

$$F_n^t = F_n^{tem} + F_n^m, \quad F_n^{tem} = (T - T_0)(q_0 / T_0), \quad (5)$$

$$F_n^m = \tau : D_n.$$

Здесь T_0 – температура термодинамического равновесия, q_0 – тепловой эффект реакции, τ – действующее напряжение, знак $:$ означает операцию свертки двух тензоров. Вводя эффективную температуру $T_n^* = T + \frac{\tau : D_n}{q_0} T_0$, получим выражение для F_n^t , включающее и температурную, и механическую компоненты:

$$F_n^i = (T^* - T_0)(q_0 / T_0). \quad (6)$$

Известно, что движущаяся граница раздела фаз испытывает сопротивление, связанное с преодолением энергетических барьеров зарождения мартенситных кристаллов и других стопоров. Силу, отвечающую за наличие гистерезиса, назовем условно силой трения F^{fr} и будем считать, что она постоянна по абсолютной величине и препятствует продвижению границы:

$$F_n^{fr} = -|F^i| \text{sign}(\Delta\Phi_n). \quad (7)$$

Кроме того, при росте кристалла новой фазы возникает сила сопротивления, связанная с появлением межфазных напряжений при превращении в стесненных условиях. Можно считать, что в первом приближении эта сила нарастает и убывает пропорционально объему мартенситного кристалла:

$$F_n = G_m \Phi_n, \quad (8)$$

где G_m — коэффициент пропорциональности.

В состоянии термодинамического равновесия имеет место баланс сил:

$$F_n^i = F_n^{fr} + F_n, \quad (9)$$

который использовали для определения условий протекания превращения.

Модуль силы трения и величину коэффициента G_m можно найти из известных условий протекания мартенситной реакции в отсутствие внешних напряжений:

- (а) при $T^* = M_s$, $\Phi = 0$ из (6), (7), (9) получаем $|F^i| = -q_0(A_f - M_s)/(2T_0)$;
 (б) при $T^* = M_f$, $\Phi = 1$ из (8), (9) следует, что $G_m = (M_s - M_f)(q_0/T_0)$.

Выражение (3) можно рассматривать как разложение деформации зерна ε^{gr} по некоторому обобщенному базису D_n . При этом Φ_n играют роль координат, и, следовательно, их можно считать мерами деформации. Поскольку микроупругая и микропластическая деформации связаны с теми же кристаллами мартенсита, что и фазовая, будем считать, что соответствующие составляющие микродеформации β^{me} и β^{mp} можно представить в виде, аналогичном (3):

$$\beta^{me} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N D_n \Phi_n^e, \quad \beta^{mp} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N D_n \Phi_n^p, \quad (10)$$

где Φ_n^e и Φ_n^p — меры микроупругой и микропластической деформации n -го варианта мартенсита в данном зерне.

Поскольку в процессе роста мартенситного кристалла рассматриваемые микродеформации приводят к частичной аккомодации мартенсита и релаксации межфазных напряжений, предположим, что сила противодействия росту мартенсита ослабляется на величину $(G_m \Phi_n^e + G_m \Phi_n^p)$, так что

$$F_n = G_m(\Phi_n - \Phi_n^e - \Phi_n^p). \quad (11)$$

В случае чисто упругой аккомодации, то есть когда величина силы сопротивления не превышает некоторого предела микротекучести F_n^y

$$d\Phi_n^e = \frac{1}{g_m} dF_n, \quad d\Phi_n^p = 0, \quad (12)$$

где g_m — модуль микроупругости (в рамках данной модели предполагается, что g_m одинаков для всех мартенситных кристаллов).

Тогда выражение (11), записанное в дифференциалах, приобретает вид

$$dF_n = G_m d\Phi_n - \frac{G_m}{g_m} dF_n, \quad (13)$$

откуда

$$d\Phi_n = \frac{G_m + g_m}{G_m g_m} dF_n. \quad (14)$$

Таким образом, наличие упругой аккомодации приводит лишь к замене коэффициента пропорциональности G_m в (8) эффективным модулем.

Если же величина силы сопротивления $|F_n|$ выше предела микротекучести F_n^y , то есть имеет место как упругая, так и пластическая аккомодация, то, по аналогии с классической теорией пластичности, полагаем

$$d\Phi_n^e + d\Phi_n^p = \frac{1}{h_m} dF_n H(|F_n| - F_n^y) H(dF_n \text{sign} F_n), \quad (15)$$

где h_m — модуль микропластичности, который, как и g_m , в рамках данной модели является постоянной величиной для всех мартенситных кристаллов; H — функция Хэвисайда. Множители $H(|F_n| - F_n^y) \times H(dF_n \text{sign} F_n)$ в (15) отличны от нуля тогда и только тогда, когда сила сопротивления F_n по модулю превышает F_n^y и имеет место рост кристалла новой фазы.

Так как увеличение (уменьшение) силы сопротивления F_n происходит только при увеличении (уменьшении) количества мартенсита, что в свою очередь имеет место лишь при нарастании (убывании) движущей термодинамической силы F_n^i , то $\text{sign}(dF_n) = \text{sign}(dF_n^i)$ и

$$H(dF_n \text{sign} F_n) = H(dF_n^i \text{sign} F_n). \quad (16)$$

Подставляя (11) в (9), переходя к дифференциалам и подставляя туда затем (15) и (16), получаем:

$$dF_n^i = \frac{G_m h_m}{G_m + h_m} d\Phi_n H(|F_n| - F_n^y) H(dF_n^i \text{sign} F_n),$$

откуда окончательно

$$d\Phi_n = \frac{G_m + h_m}{G_m h_m} dF_n H(|F_n| - F_n^y) H(dF_n^i \text{sign} F_n), \quad (17)$$

а $(d\Phi_n^e + d\Phi_n^p)$ рассчитывается по формуле (15).

Необходимо учесть, что микропластическая деформация сопровождается упрочнением материала. Поэтому примем, согласно методологии классической теории пластичности, что в процессе течения предел микротекучести F_n^y возрастает пропорционально изменению меры микродеформации, связанной с пластической аккомодацией:

$$dF_n^y = h_m |d\Phi_n^p|. \quad (18)$$

До начала микропластических деформаций для всех вариантов $F_n^y = F_0^y = \text{const}$.

С учетом микропластичности деформация в зерне вычисляется по формуле

$$\varepsilon \Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n, \quad (19)$$

а макроскопическая деформация - посредством усреднения (4).

Сравнивая (14) с (12), а (17) с (15), можно заметить, что деформация, связанная с аккомодационными процессами, составляет некоторую долю k фазовой деформации. В случае чисто упругой аккомодации

$$k = k^e = \frac{G_m}{G_m + g_m}, \quad (20)$$

а при наличии пластической аккомодации

$$k = k^{e+p} = \frac{G_m}{G_m + h_m}. \quad (21)$$

Выписанные выше соотношения можно свести к системе $\Omega \cdot N$ дифференциальных уравнений, которые использовали для моделирования поведения сплава типа никелида титана, содержащего 120 зерен различной ориентации, выбранных псевдослучайным образом. Принимали следующие значения постоянных материала: $M_f = 280$ К, $M_s = 300$ К, $A_s = 340$ К, $A_f = 360$ К, $T_0 = 330$ К, $q_0 = -150$ МДж/м³. Значение $F_0^y = 13$ МПа выбрали таким образом, чтобы микропластичность (а следовательно, и недовозврат деформации при последующем нагреве) проявлялась при охлаждении материала под напряжением, превышающем 30 МПа, а при меньших напряжениях память формы была совершенна. Значение k , а следовательно и $h_m = G_m(1 - k)/k$, варьировали. Расчет выполняли для режимов одноосного нагружения и кручения без учета теплового расширения.

Известно, что микропластическая деформация оказывает сильное влияние на формирование механических свойств сплавов с памятью формы, что особенно важно при моделировании циклических температурных режимов. Поэтому в качестве «тестового» модельного эксперимента выбрали исследование накопления и возврата деформации объектом, находящимся под постоянной растягивающей нагрузкой 100 МПа, при термоциклировании в полном интервале температур фазового перехода. На рис. 1 изображена температурная кинетика накопления и возврата деформации для $k = 0,4$. В этом случае величина невозвращенной деформации уменьшается от цикла к циклу, стабилизация петли происходит приблизительно за 20 циклов.

Рис. 2 иллюстрирует влияние коэффициента k на величину максимальной деформации, накопленной за N циклов (а), и на значение деформации, невозвращенной в N -м цикле (б). Видно, что путем подбора констант можно описать различный характер термоциклического поведения сплавов с памятью формы.

При исследовании работоспособности материалов с мартенситными превращениями важную роль играет термосиловой режим, один цикл которого выглядит следующим образом: охлаждение из аустенитного состояния в мартенситное под некоторой нагрузкой P ,

догрузки Q , нагрев до температуры выше A_f при суммарном напряжении $(P + Q)$, разгрузка до величины P . На рис. 3 изображена зависимость деформации от температуры для соответствующего модельного эксперимента при $P = 100$ МПа, $Q = 200$ МПа, выполненного в режиме кручения.

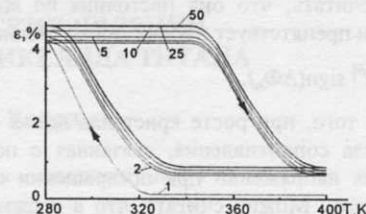
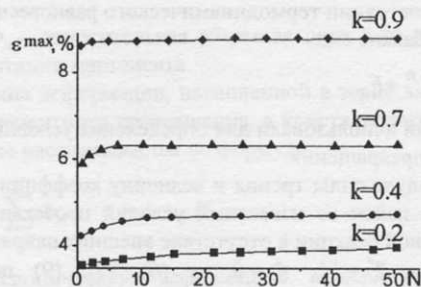


Рис. 1. Зависимость деформации от температуры при термоциклировании в полном интервале температур мартенситного превращения под нагрузкой 100 МПа. Цифрами 1, 2, 5, 10, 25, 50 обозначены номера циклов.

а)



б)

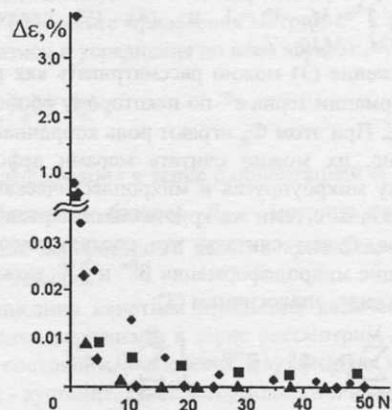


Рис. 2. Величина деформации образца при температуре ниже A_f , накопленная за N циклов (а) и величина недовозвращенной в N -м цикле деформации (б) при термоциклировании в полном интервале температур мартенситного превращения под нагрузкой 100 МПа. Символы на рис. (б) соответствуют значениям k , приведенным на рис. (а).

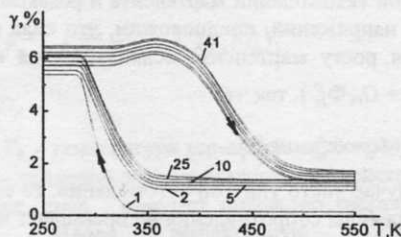


Рис. 3. Зависимость деформации от температуры при циклическом охлаждении под нагрузкой 100 МПа и нагреве под нагрузкой 300 МПа (кручение). Цифрами 1, 2, 5, 10, 25, 41 обозначены номера циклов.

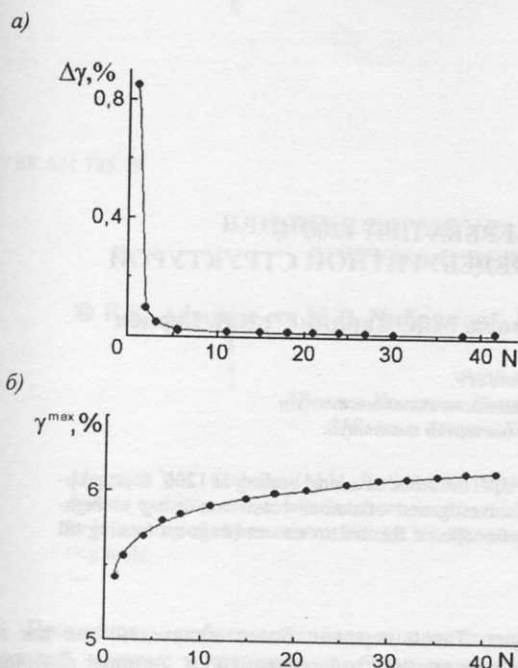


Рис. 4. Зависимость недовозвращенной в N -м цикле деформации (а) и деформации, накопленной за N циклов (б) от номера цикла при циклическом охлаждении под нагрузкой 100 МПа и нагреве под нагрузкой 300 МПа (кручение).

Стабилизация петли в этом случае также происходит примерно за 20 циклов. При этом значение недовозвращенной в цикле деформации становится практически постоянным и малым по величине (рис. 4а), максимальная деформация, накопленная за N циклов, слабо подрастает (рис. 4б). Эти результаты находятся в хорошем соответствии с данными прямого эксперимента [4].

Одним из свойств, которое до сих пор не удавалось описать в рамках структурно-аналитической теории, является многократно обратимая (двухсторонняя) память формы [2], формируемая в СПФ при их охлаждении под нагрузкой или деформировании в мартенситном состоянии. Механизм этого явления, по-видимому, состоит в формировании полей микронапряжений в результате несовместной пластической деформации при росте кристаллов мартенсита.

На рис. 5, 6 приведены результаты моделирования двухсторонней памяти формы. Видно, что материал способен обратимо деформироваться в отсутствие напряжения, что соответствует экспериментальным данным [2].

Согласно существующим представлениям [5, 6] о природе деформационного поведения СПФ, пластическая деформация, сопровождающая деформацию микророботов при мартенситной перестройке кристаллической решетки, играет определяющую роль для тренинга материала при его термоциклировании под нагрузкой, развития усталости, формирования полей внутренних напряжений, ответственных за приспособляемость материала и возникновение эффекта обратимой (двухсторонней) памяти формы. Подтверждением последнему положению служит тот факт, что формирование обратимой памяти происходит только при достаточно сильном деформировании образца нагруз-

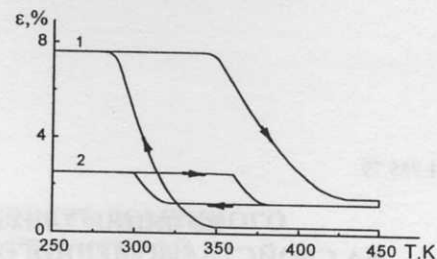


Рис. 5. Зависимость деформации от температуры при охлаждении и нагреве объекта под нагрузкой 100 МПа (1), разгрузке и последующем термоцикле без нагрузки (2).

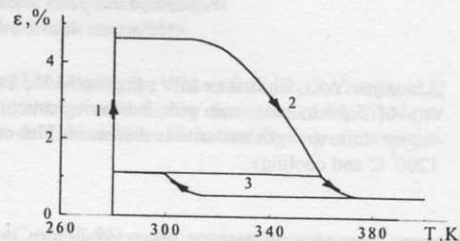


Рис. 6. Зависимость деформации от температуры при активном деформировании и разгрузке в мартенситном состоянии (1), нагреве (2) и последующем термоцикле без нагрузки (3).

кой, превышающей критический уровень, когда полный возврат деформации невозможен. Вместе с тем предыдущие теоретические построения в основном сводились к чисто качественным рассуждениям без выхода на уровень инженерных расчетов. Предложенная модель микропластичности формализует эти теоретические представления, а соответствие результатов моделирования экспериментальным данным подтверждает правильность развиваемого в настоящей работе подхода. В результате удалось описать целый ряд явлений: тренировку материала при его термоциклировании под нагрузкой, термоциклическую ползучесть и многократно обратимую память формы, сформированную как за счет эффекта пластичности превращения, так и активным деформированием в мартенситном состоянии. Вариация констант теории позволяет получать верные результаты для конкретных сплавов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. С.-Пб.: Наука, 1993. 471 с.
2. Лихачев В.А., Кузьмин С.Л., Каменцева З.П. Эффект памяти формы. Л.: ЛГУ, 1987. 216 с.
3. Erglis I.V., Ermolayev V.A., Volkov A.E. A model of martensitic unelasticity accounting for the crystal symmetry of the material // J. de Phys. Col. C8. 1995. V. 5. P. 239-244.
4. Беляев С.П., Кузьмин С.Л., Лихачев В.А., Ковалев С.М. Деформация и разрушение никелида титана под действием теплосмен и напряжения // ФММ. 1987. Т. 63. Вып. 5. С. 1017-1023.
5. Кузьмин С.Л. Память формы и пластичность превращения в металлах: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Л., 1980. 223 с.
6. Ооцука К., Симидзу К., Судзуки Ю. и др. Сплавы с эффектом памяти формы: Пер. с японск. / Под ред. Х. Фунакубо. М.: Металлургия, 1990. 224 с.

БЛАГОДАРНОСТИ: Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 97-01-00823.