

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВАРИАНТОВ МАРТЕНСИТА НА ОБРАТИМУЮ ФАЗОВУЮ ДЕФОРМАЦИЮ В СПЛАВАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ¹

Беляев Ф.С., Волков А.Е.

*Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург,
Россия*

РЕЗЮМЕ

Разработана модель деформационного поведения сплава с памятью формы. Она позволяет учитывать взаимодействие вариантов мартенсита, образующих согласованную пару. Модель имеет возможность регулировать силу взаимодействия вариантов. Было изучено влияние взаимодействия вариантов мартенсита на деформацию сплава с памятью формы.

Ключевые слова: память формы; пары соответствующих вариантов; моделирование

INFLUENCE OF MARTENSITE VARIANTS INTERACTION ON REVERSIBLE PHASE DEFORMATION IN SHAPE MEMORY ALLOYS

Belyaev F.S., Volkov A.E.

Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russia

SUMMARY

The model of the deformation behavior of shape memory alloy was developed. It allows describing growth of martensite as corresponding variant pairs. The model has possibility to adjust force of variants interaction. Influence of martensite variants interaction on deformation of shape memory alloy was studied.

Key words: shape memory; a pair of corresponding options; modeling

ВВЕДЕНИЕ

Расчет деформационного поведения сплавов с памятью формы – важный аспект при изучении их свойств и проектировании рабочих элементов из этих материалов. Непосредственный расчет деформации как функции напряжений и температуры невозможен из-за ее зависимости от истории термосилового нагружения. В таких случаях для расчетов применяют метод моделирования деформационного поведения материалов. Хорошее соответствие с экспериментом в случае сложного термомеханического нагружения дает микроструктурное моделирование. В этом подходе деформация рассматривается на нескольких структурных уровнях. Для представительного объема самого нижнего уровня

¹ Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-01-07657.

формулируются уравнения физических процессов, порождающих деформацию. Вычисление макроскопической (инженерной) деформации происходит путем усреднения деформаций на нижних структурных уровнях. Микроструктурные модели учитывают реальную структуру материала, что позволяет точнее описывать экспериментальные данные. Основной задачей моделирования механического поведения сплава с памятью формы является описание процессов деформации в результате мартенситных превращений. Например, один из основных сплавов с памятью формы – NiTi, в процессе прямого мартенситного превращения переходит из высокотемпературной кубической фазы (B2) в низкотемпературную моноклинную (B19'). Данное превращение осуществляется 12-тью кристаллографически эквивалентными ориентационными вариантами деформации решетки (деформации Бейна). Таким образом, мартенситная фаза состоит из доменов (вариантов), соответствующих различным вариантам деформации Бейна. Микроструктурная модель [1,2] хорошо описывает основные деформационные эффекты в сплаве с памятью формы TiNi. Однако в ней для простоты расчетов используется предположение о независимом друг от друга росте вариантов мартенсита. В действительности они группируются в так называемые пары соответствующих вариантов [3-5]. Такой мартенситной структуре соответствует более низкая упругая энергия межфазных напряжений. Неучет взаимодействия вариантов мартенсита приводит к отсутствию возможности регулирования величины обратимой фазовой деформации, что создает затруднения при описании экспериментальных данных для конкретных материалов. В данной работе представлена модель, разработанная на основе [1], которая учитывает рост мартенсита в виде согласованных пар и имеет параметр, отвечающий за силу взаимодействия между вариантами.

1. ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ

Выберем иерархию областей усреднения следующим образом: будем считать, что представительный объем состоит из зерен, а зерна в свою очередь состоят из аустенита и различных вариантов мартенсита. Среднее значение деформации $\varepsilon^{(0)}(x)$ представительного объема с координатами x будем находить через ориентационное усреднение деформаций зерен $\varepsilon^{gr}(x, \omega_i)$. В качестве параметра, характеризующего зерна, выбираем ориентации ω_i кристаллографических осей относительно лабораторной системы координат

$$\varepsilon^{(0)}(x) = \sum_{i=1}^K f_i \varepsilon^{gr}(x, \omega_i) \quad (1)$$

где f_i – объемная доля зерен с ориентацией ω_i . Учитывая, что зерно состоит из аустенита и N вариантов мартенсита и применяя гипотезу Райсса, выразим деформацию зерна следующим образом

$$\varepsilon^{gr} = (1 - \Phi^{gr}) \varepsilon^A + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n \varepsilon^{Mn} \quad (2)$$

Здесь Φ_n – объемная доля n -го варианта мартенсита в зерне, ε^A , ε^{Mn} – деформации областей, занятых аустенитом и n -м вариантом мартенсита; $\Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n$ – полная объемная доля мартенсита в зерне.

Мартенситное превращение будем описывать в терминах обобщенных термодинамических сил, являющихся производными потенциала Гиббса, который для одного зерна запишем следующим образом

$$G = G^{eig} + G^{mix} = (1 - \Phi^{gr}) G^A + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n G_n^M + G^{mix} \quad (3)$$

В формуле (3) предполагается что потенциал Гиббса состоит из двух частей: собственного потенциала фаз G^{eig} и потенциала смешивания G^{mix} , имеющего смысл упругой энергии межфазных напряжений. Здесь G^A и G_n^M – собственные потенциалы аустенита и n -го варианта мартенсита соответственно

$$G^a = G_a^0 - S_0^a (T - T_0) - \frac{c_\sigma^0 (T - T_0)^2}{2T} - \varepsilon_{ij}^{OTa} (T) \sigma_{ij} - \frac{1}{2} D_{ijne}^a \sigma_{ij} \sigma_{ne} \quad (4)$$

где верхний индекс $a=A$, обозначает аустенит, $a=Mn$ – n -ый вариант мартенсита, G_0 – значение потенциала при температуре T_0 равновесия фаз, при которой их потенциалы Гиббса равны, S_0 – удельная на единицу объема энтропия при температуре T_0 , c_σ^0 – удельная теплоемкость при постоянном нулевом напряжении, $\varepsilon^{OT}(T)$ – деформация материала за счет теплового расширения в отсутствие напряжения, D_{ijne} – изотермические коэффициенты податливости при упругой деформации.

Расчет энергии G^{mix} – сложная краевая задача. Учитывая, что она возрастает с ростом Φ_n и снижается при развитии связанной с аккомодацией мартенсита микропластической деформации (которую будем характеризовать параметрами Φ_n^p) качественно оценим энергию G^{mix} квадратичной формой

$$G_n^{mix} = \frac{\mu}{2} \sum_{m,n} A_{mn} (\Phi_m - \Phi_m^p)(\Phi_n - \Phi_n^p) \quad (5)$$

где матрица A_{mn} определяет взаимодействие между вариантами мартенсита. Учитывая значение деформаций Бейна для вариантов, составляющих согласованную пару [6], и занумеровав варианты должным образом, приведем эту матрицу к следующему виду

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & & & \\ & A_1 & & \\ & & A_1 & \\ & & & A_1 \end{pmatrix}. \quad A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha & -\alpha & 0 \\ -\alpha & 1 & 0 & -\alpha \\ -\alpha & 0 & 1 & -\alpha \\ 0 & -\alpha & -\alpha & 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Параметр α – материальная константа, которая определяет силу, с которой растущий вариант мартенсита способствует росту вариантов, согласованных с ним. Из условия положительной определенности квадратичной формы следует, что $0 \leq \alpha < 0.5$.

Термодинамической силой, вызывающей рост n -го варианта мартенсита, т.е. увеличение параметра Φ_n является

$$F_n^t = -N \frac{\partial G}{\partial \Phi_n} \approx \frac{q_0}{T_0} (T - T_0) + \sigma_{ij} : D_{ij}^n - \mu \sum_{m=1}^N A_{mn} (\Phi_m - \Phi_m^p) \quad (7)$$

Поскольку мартенситное превращение при циклическом изменении температуры или напряжения протекает с гистерезисом, можно сделать вывод, что существует сила, препятствующая движению межфазных границ, которую условно назовем

силой трения F^{fr} . С учетом этой силы запишем условие протекания превращения в виде

$$F_n^t = \pm F^{fr} \quad (8)$$

Здесь знак плюс соответствует прямому превращению, а минус – обратному.

Для расчета всех внутренних параметров, необходимо ввести условие микропластической деформации. Сформулируем его по аналогии с теорией течения в одномерном случае, в которой роль пластической деформации играет параметр Φ_n^p , а роль напряжения - обобщенная сила F_n^p

$$F_n^p = -N \frac{\partial G}{\partial \Phi_n^p} = \mu \sum_{m=1}^N A_{mn} (\Phi_m - \Phi_m^p) \quad (9)$$

С учетом сказанного запишем условие микропластического течения с трансляционным упрочнением F_n^p и изотропным упрочнением F_n^y в виде

$$|F_n^p - F_n^y| = F_n^y, \quad d|F_n^p| > 0 \quad (10)$$

Будем считать, что параметры F_n^p и F_n^y связаны с наличием обратимых b_n и необратимых f_n деформационных дефектов в материале. Скорости изменения плотностей этих дефектов при изменении объемной доли n -го варианта мартенсита будем вычислять по формулам

$$\dot{b}_n = \dot{\Phi}_n^p - \frac{1}{\beta^*} (|b_n| \dot{\Phi}_n^p) H(b_n \dot{\Phi}_n^p), \quad \dot{f}_n = (1 + f_n) |\dot{\Phi}_n^p| \quad (11)$$

где β^* – материальная постоянная, H – функция Хевисайда. Первое слагаемое в формуле для b -дефектов отвечает за их накопление, а второе за их выход на поверхность тела.

Будем считать, что трансляционное упрочнение линейно связано с обратимыми дефектами, а изотропное – с необратимыми, и сформулируем простейшие замыкающие уравнения

$$F_n^y = a_y f_n, \quad F_n^p = a_p b_n \quad (12)$$

где a_y , a_p – константы материала. В результате получаем замкнутую систему уравнений для расчета эволюции параметров Φ_n и Φ_n^p при заданных законах изменения температуры и напряжения.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

С помощью разработанной модели было изучено влияние взаимодействия вариантов мартенсита на деформацию сплава с памятью формы. Для моделирования экспериментов был выбран материал с характеристическими температурами $M_s=326$ К, $M_f=317$ К, $A_s=397$ К, $A_f=406$ К (M_s и M_f – температуры начала и конца прямого мартенситного превращения, A_s и A_f – температуры начала и конца обратного мартенситного превращения). Скрытая теплота превращения: $q_0 = -160$ МДж/м³. Для учета микропластической деформации, были подобраны следующие значения материальных постоянных: $a_y=10^7$, $a_p=10^8$, $\beta^*=0.2$.

Для разных значений параметра α промоделирован эксперимент охлаждения – нагрев под постоянным растягивающим напряжением. Расчетные зависимости деформации от температуры представлены на рис.1. Для нагрузок

50, 100, 200 МПа на рис.2. представлены зависимости величины эффекта памяти формы (деформации, восстанавливаемой после нагрева) от значения параметра α .

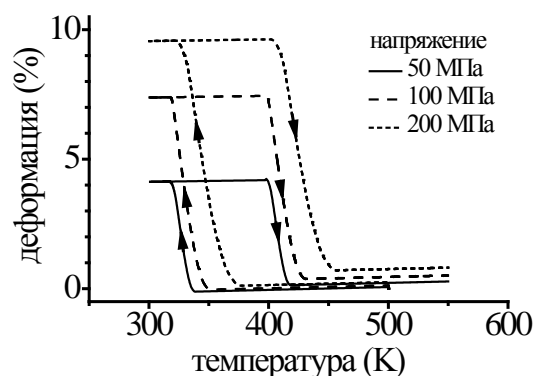


Рис.1. Расчетные зависимости деформации от температуры при охлаждении и нагреве под постоянным растягивающим напряжением ($\alpha = 0$).

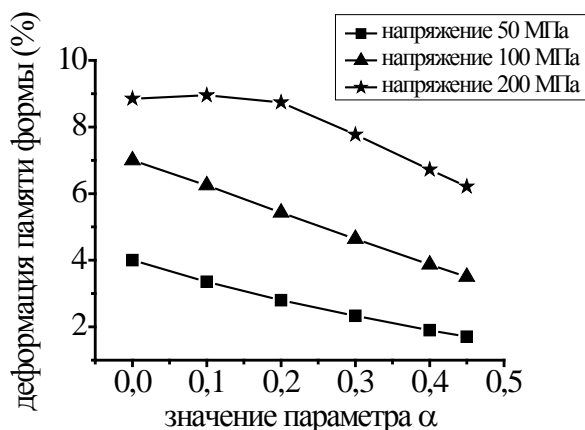


Рис.2. Зависимость деформации, восстанавливаемой при нагреве от значения параметра α .

Из рис.2. видно, что при разных растягивающих напряжениях, увеличение параметра α уменьшает величину памяти формы. Это связано с ростом сил, вызывающих увеличение объемной доли вариантов, согласованных с уже растущими вариантами. Таким образом, объемная доля вариантов, наиболее благоприятных по отношению к приложенному напряжению, снижается в пользу не самых благоприятных, но входящих в согласованную с ними пару, что уменьшает общую деформацию. Практически горизонтальный участок при нагрузке 200 МПа и малом α от 0 до 0,2 объясняется тем, что сила взаимодействия мала и недостаточна для возникновения согласованных вариантов.

Другой модельный эксперимент относится к активному деформированию сплавов с памятью формы в псевдоупругом состоянии при температуре 410 К, что выше температуры A_f конца обратного превращения. Образец нагружали до некоторого максимального напряжения и разгружали. Расчетные зависимости напряжения от деформации для различных значений параметра α представлены на рис.3. На рис.4. представлены зависимости деформации от значения параметра α для различных напряжений.

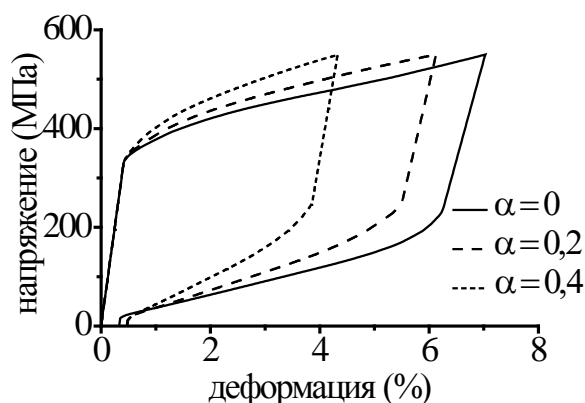


Рис.3. Расчетные зависимости напряжения от деформации при нагружении до 550 МПа и разгрузке с постоянной температурой.

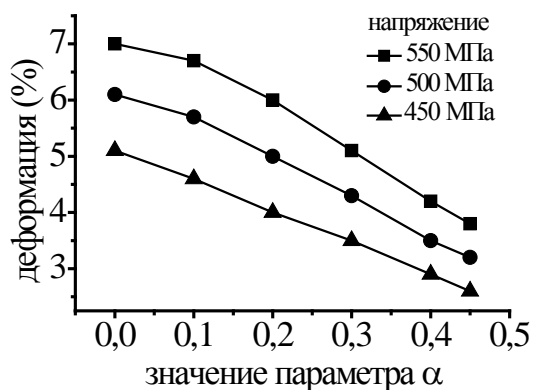


Рис.4. Зависимости деформации от значения параметра α для различных напряжений.

Из рис.4. видно, что чем больше значение принимает параметр α , тем меньшую деформацию накапливает образец. Это связано с перераспределением объемных долей мартенсита в пользу вариантов мартенсита согласованных с уже растущими вариантами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанная модель деформационного поведения сплава с памятью формы позволяет описывать основные эффекты, связанные с памятью формы (пластичность превращения, возврат деформации при нагреве, псевдоупругость). Кроме того она позволяет учитывать взаимодействие вариантов мартенсита, составляющих согласованные пары. Имеется возможность регулировать с помощью выбора значения параметра α силу взаимодействия вариантов и полностью отключить ее, положив $\alpha = 0$. Показано, что варьирование параметра α изменяет обратимую фазовую деформацию в широких пределах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Volkov A.E., Casciati F. Simulation of dislocation and transformation plasticity in shape memory alloy polycrystals / In: Shape Memory Alloys. Advances

in Modeling and Applications. F.Auricchio, L.Faravelli, G.Magonette and V.Torra (Eds.) – Barcelona, 2001. – P.88-104.

2. *Evard M.E., Volkov A.E.* A theoretical study of the plastic deformation in titanium-nickel shape memory alloy / Int. Symp. on Shape Memory Alloys: Fundamentals, Modeling and Industrial Applications. Proceedings. – 1999. – P.177-183.
3. *Nishida M., Nishiura T., Kawano H., Imamura T.* Self-accommodation of B19' martensite in Ti-Ni shape memory alloys. Part I. Morphological and crystallographic studies of variant selection rule // Philosophical Magazine. – 2012. – Vol.92. – P.2215-2233.
4. *Nishida M., Okunishi E., Nishiura T., Kawano H., Imamura T., Ii S., Hara T.* Self-accommodation of B19' martensite in Ti-Ni shape memory alloys. Part II. Characteristic interface structures between habit plane variants // Philosophical Magazine. – 2012. – Vol.92. – P.2234-2246.
5. *Imamura T., Nishiura T., Kawano H., Hosoda H., Nishida M.* Self-accommodation of B19' martensite in Ti-Ni shape memory alloys. Part III. Analysis of habit plane variant clusters by the geometrically nonlinear theory // Philosophical Magazine. – 2012. – Vol.92. – P.2247-2263.
6. *Madangopal K., Singh J., Benerjee S.* Self-accommodation in Ni-Ti shape memory alloys // Scripta Metallurgica. – 1991. – Vol.25. – P.2153-2158.

Поступила в редакцию 13 февраля 2015 года.

Сведения об авторах:

Беляев Федор Степанович – асп., Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия; e-mail: belyaev_fs@mail.ru

Волков Александр Евгеньевич – д.ф.-м.н., проф., Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия; e-mail: volkov@math.spbu.ru