

УДК 539.3:669.018.2

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НИКЕЛИДА ТИТАНА С УЧЕТОМ АНИЗОТРОПИИ В ПЛОСКОСТИ СДВИГА

А. Д. Бреган, А. Е. Волков, М. Е. Евард

*НИИ Математики и Механики  
Санкт-Петербургского Государственного Университета  
198904, С.-Петербург, Библиотечная пл., 2  
e-mail: rita@smel.math.spbu.ru*

На основании структурно-аналитической теории (В.А. Лихачев и В.Г. Малинин, 1993) проведено моделирование пластической деформации монокристалла никелида титана с учетом анизотропии напряжения течения в плоскости сдвига. Подобраны параметры материала (начальный предел текучести  $\tau_0^S$  и коэффициент упрочнения  $h$ ) для каждой из действующих систем скольжения. Получены кривые деформирования при различных ориентациях монокристалла и зависимость предела текучести  $\sigma_{0.1}$  от направления оси растяжения. Показано, что использование закона Шмида не позволяет получить правильного описания деформирования для монокристаллов всех ориентаций. Хорошее соответствие с экспериментом наблюдается для кристаллов  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$ , но не  $\langle 011 \rangle$ , для которого происходит смена механизма деформирования. В случае поликристалла учет анизотропии в плоскости сдвига не имеет существенного значения при описании деформации модельного материала.

### Введение

Исследованию влияния активной пластической деформации на поведение сплавов с эффектом памяти формы уделяется большое внимание [1]. Это связано с тем, что дислокационный сдвиг в этих материалах не только является одним из возможных механизмов формоизменения, но и приводит к формированию ряда специфических свойств, таких как обратимая память формы и "тренировка" материала при циклическом изменении температуры. Пластическое деформирование при определенных условиях позволяет направленно изменять свойства материалов.

В работах [2, 3] предложена модель, позволяющая описывать процесс пластического деформирования монокристалла  $TiNi$ , находящегося в высокотемпературной  $B2$ -фазе. С помощью единого набора констант материала (начального предела текучести  $\tau_0^S$  и коэффициента упрочнения  $h$  для действующих в  $TiNi$  плоскостей скольжения) было получено хорошее соответствие расчета с экспериментальными данными при моделировании растяжения монокристалла вдоль некоторых направлений. Для ориентации оси растяжения  $[011]$  такого соответствия добиться не удалось. Авторы связывали это тем, что не учитывалась анизотропия напряжения течения в плоскости скольжения: предполагалось, что сдвиг может осуществляться в произвольном направлении. В реальном же кристалле сдвиг происходит в наиболее плотноупакованных направлениях. Целью настоящей работы является учет анизотропии сдвига при моделировании пластической деформации никелида титана.

## Модель

Подобно тому, как это было сделано в работе [3], модельный материал представляет собой монокристалл, в котором имеется несколько систем скольжения. Известно, что скольжение в никелиде титана осуществляется по двум системам плоскостей:  $\{100\}$  и  $\{110\}$  [4]. Для других систем реализация сдвига затруднена в силу того, что для этих плоскостей предел текучести больше, чем предел прочности материала. Атермическая пластическая деформация является суммой деформаций на каждой из плоскостей сдвига. В отличие от [3] скольжение на плоскости сдвига происходит только в направлении наименьшего вектора Бюргерса.

Если  $\sigma$  – напряжение, приложенное к монокристаллу, то на каждую из плоскостей скольжения действует напряжение, сдвиговые компоненты которого имеют вид:

$$\tau_{31} = A_{p3} A_{q1} \sigma_{pq},$$

$$\tau_{32} = A_{p3} A_{q2} \sigma_{pq},$$

где  $A$  – матрица поворота, переводящая лабораторный базис в базис плоскости сдвига, который выберем таким образом, чтобы его орты  $e_1$  и  $e_2$  были направлены вдоль направлений возможного сдвига, а  $e_3$  перпендикулярен рассматриваемой плоскости. Тогда вместо условия начала течения, использованного в [3]:

$$T_\tau = \sqrt{(\tau_{31})^2 + (\tau_{32})^2} = \tau^S,$$

где  $T_\tau$  – интенсивность касательных напряжений на плоскости сдвига,  $\tau^S$  – критическое скалывающее напряжение, будем считать, что дислокационный сдвиг начинается, когда:

$$\tau^S = \begin{cases} \tau_{31}, & \text{при } \tau_{31} \geq \tau_{32}; \\ \tau_{32}, & \text{при } \tau_{31} < \tau_{32}. \end{cases} \quad (1)$$

Предполагаем, что напряжение течения складывается из равновесного значения  $\tau_{eq}^S$  и деформационной добавки  $\tau_{def}^S$ , ответственной за деформационное упрочнение:

$$\tau^S = \tau_{eq}^S + \tau_{def}^S. \quad (2)$$

Для расчета деформационного предела текучести  $\tau_{def}^S$  предполагаем, что коэффициент упрочнения  $h$  не зависит от величины сдвига, и скорость изменения  $\tau_{def}^S$  равняется произведению коэффициента упрочнения  $h$  на максимальную скорость пластического сдвига  $\dot{\beta}_{31}$  или  $\dot{\beta}_{32}$ :

$$\dot{\tau}_{def}^S = \begin{cases} h |\dot{\beta}_{31}|, & \text{если } |\dot{\beta}_{31}| \geq |\dot{\beta}_{32}|; \\ h |\dot{\beta}_{32}|, & \text{если } |\dot{\beta}_{31}| < |\dot{\beta}_{32}|. \end{cases} \quad (3)$$

Заметим, что в работе [3] считали, что  $\dot{\tau}_{def}^S = h \dot{\Gamma}_\beta$ , где  $\dot{\Gamma}_\beta = \sqrt{(\dot{\beta}_{31})^2 + (\dot{\beta}_{32})^2}$  – интенсивность скоростей сдвига на плоскости.

Принимая во внимание (1) – (3), реологический закон можно записать в аналитическом виде с помощью функции Хэвисайда  $H$ :

$$\dot{\beta}_{3i} = h^{-1} (\dot{\tau}_{3i} - \dot{\tau}_0^S) H(\tau_{3i} - \tau^S) H(\dot{\tau}_{3i} - \dot{\tau}^S), \quad \text{где } i = \begin{cases} 1, & \text{если } \beta_{31} \geq \beta_{32} \\ 2, & \text{если } \beta_{31} < \beta_{32} \end{cases}. \quad (4)$$

Для решения системы дифференциальных уравнений (3) и (4) применяли прямую разностную схему.

Затем подбирали соответствующие параметры для действующих систем скольжения: начальное напряжение течения –  $\tau_0^s$  и коэффициент упрочнения  $h$  (таблица 1).

Т а б л и ц а 1. Напряжение течения и коэффициент упрочнения для действующих систем скольжения.

Плоскость Скольжения	Экспериментальные данные		Постоянные для расчета	
	$\tau_0^s$ , МПа	$h$ , МПа	$\tau_0^s$ , МПа	$h$ , МПа
{100}	70 – 150	100 – 700	85	100
{110}	100 – 250	2000 – 3000	100	3000

Подбор констант материала производили по кривой растяжения для кристалла одной ориентации. Эти же константы использовались для описания поведения монокристалла TiNi при растяжении вдоль других направлений.

### Полученные результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены результаты моделирования поведения монокристалла никелида титана при растяжении вдоль направлений  $[\bar{1}11]$ ,  $[123]$  и  $[001]$  и соответствующие экспериментальные зависимости.

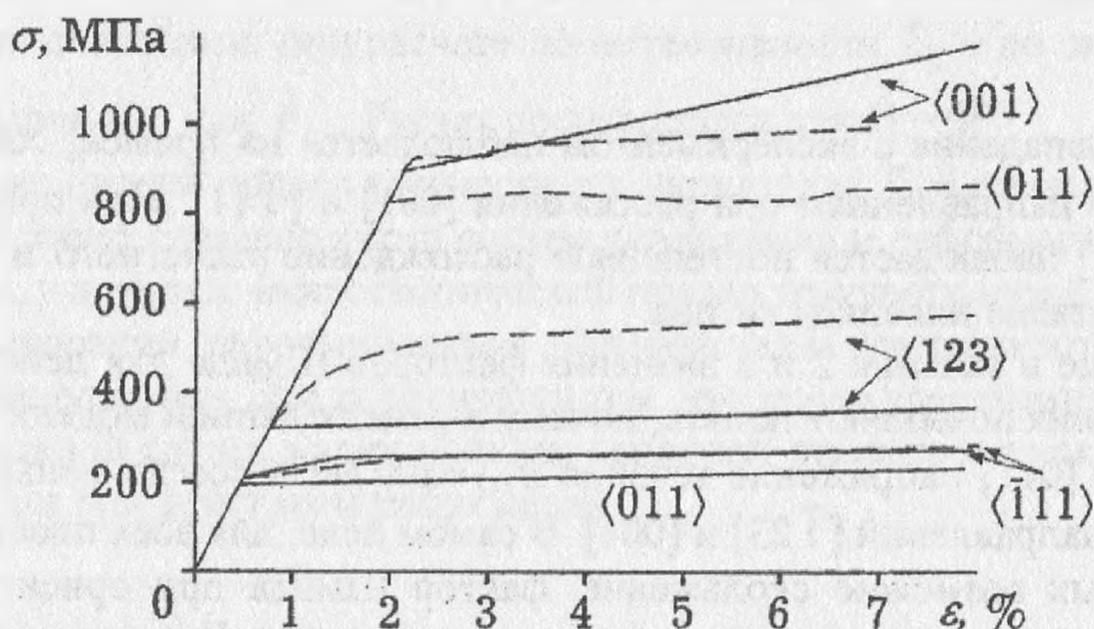


Рис. 1. Экспериментальные [4] (пунктирные линии) и расчетные (сплошные линии) кривые растяжения монокристалла TiNi.

Сопоставление результатов расчета кривой деформирования монокристалла TiNi с экспериментальными данными (рис. 1) показывает, что выбранные значения констант материала позволяют правильно описать поведение модельного сплава при ориентации осей растяжения  $[\bar{1}11]$ ,  $[001]$ . Для направлений  $[\bar{1}23]$  и  $[\bar{1}12]$  расчетный предел текучести совпадает с тем, что наблюдается в опыте [5]. Для ориентации оси растяжения вдоль  $[001]$  расчетная кривая существенным образом не совпадает с экспериментальной.

Зависимость предела текучести  $\sigma_{0.1}$  для модельного монокристалла никелида титана при температуре 673 К от ориентации оси растяжения представлена на рис. 2.

Учет анизотропии на плоскости сдвига приводит к качественному изменению зависимости критических напряжений от ориентации оси растяжения по сравнению с зависимостью, полученной в [3]. Теперь изолинии представляют собой некоторые кривые, а не концентрические окружности, как это было ранее, когда предел текучести полностью определялся величиной угла между осью растяжения и нормалью к плоскости

сдвига. Для направления  $[001]$  получается бесконечный предел текучести. Это связано с тем, что для действующих в никелиде титана систем скольжения  $\langle 001 \rangle \{100\}$  и  $\langle 001 \rangle \{110\}$  факторы Шмида обращаются в нуль (см. таблицы 2 и 3), и пластическая деформация невозможна.

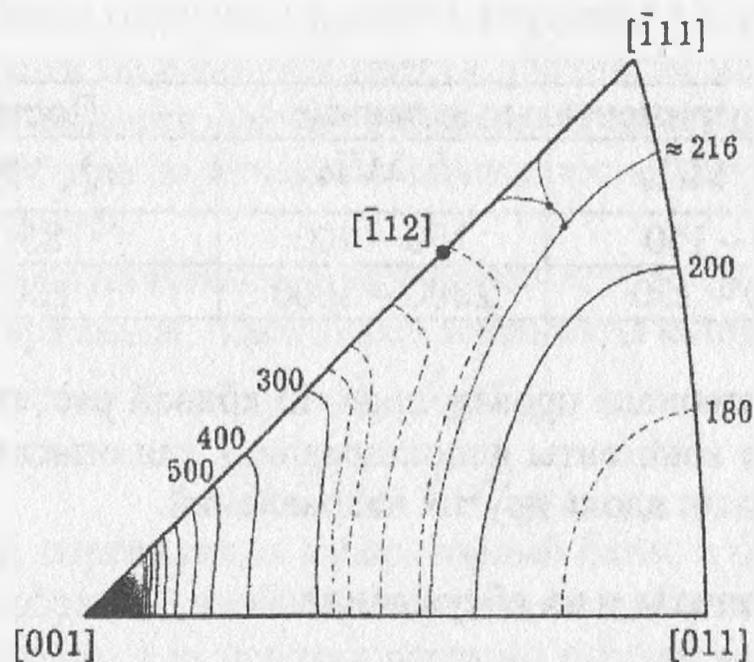


Рис. 2. Зависимость предела текучести  $\sigma_{0.1}$  от ориентации оси растяжения. Цифрами обозначены значения  $\sigma_{0.1}$  в МПа. Сплошные линии проведены с интервалом 100 МПа, пунктирные — с интервалом 20 МПа.

Хорошее совпадение с экспериментом наблюдается на прямой, соединяющей точки, отвечающие направлениям оси растяжения  $[001]$  и  $[\bar{1}11]$ . При приближении к направлению  $[011]$  наблюдается постепенное расхождение расчетного и реального поведения монокристалла никелида титана.

Приведенные в таблице 2 и 3 значения факторов Шмида для действующих в TiNi систем скольжения позволяют понять, почему в рамках данной модели при ориентации оси растяжения  $[011]$  напряжение течения  $\sigma_{0.1} \approx 200$  МПа всегда меньше, чем для растяжения вдоль направлений  $[\bar{1}23]$  и  $[001]$ . В самом деле, для всех плоскостей и направлений, в которых возможно скольжение, фактор Шмида при ориентации оси вдоль  $[011]$  больше, чем для других ориентаций монокристалла. В то же время экспериментальные данные показывают, что при растяжении вдоль направления  $[001]$ , кристаллы являются “жесткими”, т. е. имеют высокий предел текучести  $\sigma_{0.1} \approx 920$  МПа [4]. В работах [4 – 6] высказано предположение, что при изменении ориентации оси растяжения, происходит смена механизма деформирования на микроуровне. В частности, при ориентации  $[011]$  происходит объемное расщепление ядра винтовой дислокации, которое контролирует начало пластического течения. Поэтому учет лишь анизотропии в плоскости скольжения не позволяет в рамках данной модели адекватным образом описать поведение монокристалла TiNi при ориентации оси растяжения вблизи направления  $[011]$ .

Т а б л и ц а 2. Факторы Шмида для системы скольжения  $\langle 001 \rangle \{100\}$ .

Направление оси растяжения	$[001](100)$	$[001](010)$	$[010](100)$
001	0	0	0
011	0	0.5	0
$\bar{1}11$	0.33	0.33	0.33
123	0.21	0.43	0.14

Таблица 3. Факторы Шмида для системы скольжения  $\langle 001 \rangle \{110\}$ .

Направление оси растяжения	$[010](101)$	$[010](\bar{1}01)$	$[100](0\bar{1}1)$	$[001](110)$	$[001](\bar{1}10)$	$[100](011)$
001	0	0	0	0	0	0
011	0.35	0.35	0	0.35	0.35	0
$\bar{1}11$	0	0.47	0	0	0.47	0.47
123	0.04	0.2	0.05	0.45	0.15	0.25

Данная модель позволяет рассчитать атермическую деформацию  $\varepsilon^a$  поликристалла. Предполагая, так же как в [3], что каждое из его  $1, 2, \dots, \omega, \dots, \Omega$  зерен представляет собой монокристалл, пластическая деформация которого равна  $\varepsilon_{\omega}^{gr a}$ , после усреднения по всем зернам получаем:

$$\varepsilon^a = \frac{1}{\Omega} \sum_{\omega=1}^{\Omega} R_{\omega} \varepsilon_{\omega}^{gr a} R_{\omega}^{-1},$$

где  $R_{\omega}$  – матрица поворота, приводящая лабораторный базис к кристаллофизическому базису зерна  $\omega$ .

На рис. 3 представлены кривые растяжения модельного поликристалла, полученные различными способами: при расчете по интенсивности  $\dot{\Gamma}_{\beta}$  и по скоростям пластической деформации  $\dot{\beta}_{31}$  или  $\dot{\beta}_{32}$ . Расчет производился для  $\Omega = 20$ .

Сравнительно низкий предел текучести поликристалла TiNi объясняется тем, что в этом случае действует большое число систем скольжения и деформация осуществляется по тем из них, у которых микроскопический предел текучести ниже.

При моделировании деформирования поликристалла учет анизотропии перестает играть существенную роль. Это объясняется тем, что после усреднения по всем зернам разность направлений сдвига в этих моделях перестает существенно сказываться на поведении материала под действием напряжения.

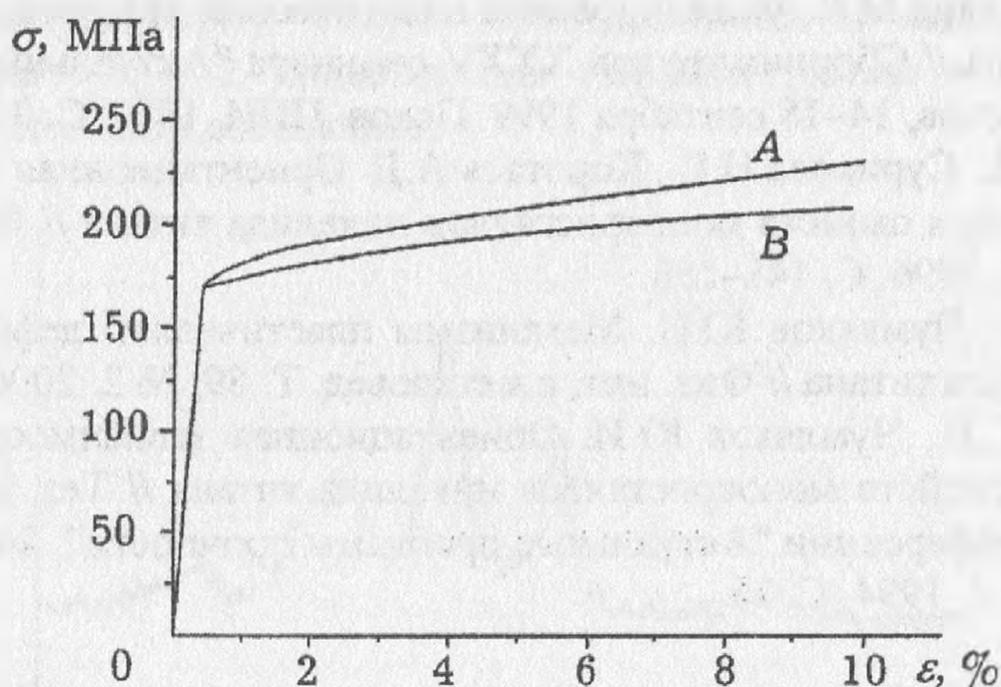


Рис. 3. Расчетная зависимость напряжения  $\sigma$  от деформации  $\varepsilon$  для поликристалла TiNi. A – с учетом анизотропии в плоскости сдвига, B – без учета анизотропии.

## Заключение

Проведено моделирование пластической деформации монокристалла никелида титана с учетом того, что скольжение может осуществляться не в произвольном направлении, а в направлении с наименьшим вектором Бюргерса. Подобраны параметры материала: предел текучести  $\tau_0^S$  и коэффициент упрочнения  $h$  для действующих в TiNi систем скольжения. С их помощью рассчитаны кривые деформирования при различных направлениях оси растяжения и зависимость предела текучести  $\sigma_{0.1}$  от ориентации оси растяжения. Сравнение с экспериментальными данными [4] показывает, что закон Шмида о критическом скалывающем напряжении становится неинвариантным относительно ориентации оси растяжения. Верно описано поведение модельного материала при растяжении вдоль направлений  $\langle hhl \rangle$ , где  $h$  и  $l$  – целые числа. При сильном отклонении оси растяжения от указанных направлений модель перестает соответствовать поведению реального материала. Поэтому возникает необходимость в более подходящем законе для такого сплава, как никелид титана, чем закон Шмида, поскольку данный закон не учитывает возможные изменения механизма деформирования, в частности, расщепление ядра дислокации.

В случае поликристалла учет анизотропии в плоскости сдвига не имеет существенного значения при описании деформации модельного материала.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 99-01-00987, гранта программы поддержки ведущих научных школ 00-15-96023 и гранта INTAS 97-1140.*

## Список литературы

1. Лихачев В.А., Кузьмин С.Л., Каменцева З.П. Эффект памяти формы Л: ЛГУ, 1987. 216 с.
2. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно – аналитическая теория прочности. СПб: Наука, 1993. 471 с.
3. Волков А.Е., Евард М.Е. Моделирование пластической деформации монокристалла никелида титана // Сборник трудов XXXV семинара “Актуальные проблемы прочности”. Т. 2. Псков, 14–18 сентября 1999. Псков. ПШИ, 1999. С. 321–325.
4. Чумляков Ю.И., Сурикова Н.С., Коротаев А.Д. Ориентационная зависимость прочных и пластических свойств монокристаллов никелида титана // Физ. мет. и металловед. Т. 82. № 1. 1996. С. 148–158.
5. Сурикова Н.С., Чумляков Ю.И. Механизмы пластической деформации монокристаллов никелида титана // Физ. мет. и металловед. Т. 89, № 2. 2000. С. 98–107.
6. Старенченко С.В., Чумляков Ю.И. Ориентационная зависимость прочностных и пластических свойств монокристаллов никелида титана // Тез. докл. Первой международной конференции “Актуальные проблемы прочности”. 26–30 сентября 1994 г. Новгород. Ч. I. 1994. С. 76.