УДК 539.4

МИКРОМЕХАНИКА И ТЕРМОДИНАМИКА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СПЛАВОВ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

Мовчан А. А., Казарина С. А., Мишустин И. В., Мовчан И. А.

ИПРИМ РАН Москва,
movchan47@mail.ru

1. Введение

Уникальные термомеханические свойства сплавов с памятью формы СПФ связаны с происходящими в них термоупругими фазовыми превращениями. В простейшем случае, это переходы из аустенитной фазы в мартенситную и обратно. Ниже, под микромеханическими моделями поведения СПФ будут пониматься определяющие соотношения, формулируемые (как правило, для механических величин), с учетом основных качественных особенностей упомянутых выше процессов, происходящих в материале на микроуровне. В частности, в [1–3], исходя из представлений о том, что прямое мартенситное превращение сводится к одновременно происходящим процессам зарождения и развития мартенситных элементов в аустенитной матрице, а обратное превращение – к деградации и исчезновению этих элементов, получена функциональная форма определяющего соотношения для макроскопических фазовых деформаций в СПФ. Для описания вклада в накопление макроскопической фазовой деформации процессов зарождения и исчезновения мартенситных элементов в [1–3] использовались чисто феноменологические соотношения, не имеющие микромеханического обоснования. Вклады процессов зарождения и развития мартенситных элементов никак не были связаны между собой, хотя на деле их сумма, в определенном смысле, должна соответствовать объемной доле мартенситной фазы, то есть, в принципе, они не могут быть независимыми. В данной работе приведена последовательная микромеханическая модель процессов деформирования СПФ при прямом и обратном превращении, лишенная описанных выше недостатков. Построено термодинамическое замыкание частного случая модели. Процессы деформирования, связанные с переориентацией мартенсита не рассматриваются.

2. Нелинейная модель деформирования СПФ при прямом и обратном мартенситном превращениях

Считается, что представительный объем поликристаллического СПФ состоит из большого количества зерен. Под микрообъемом понимается такой элемент СПФ, который может находиться либо в аустенитном, либо в мартенситном фазовом состоянии. В частности, под микрообъемом может пониматься одна кристаллическая ячейка, либо совокупность четырех смежных половин кристаллических ячеек фазы $B2$, на которой демонстрируется обычно кристаллографические особенности перехода в фазу $B19'$. В дальнейшем понадобится понятие мезоскопического элемента – мартенситной пластины (иглы), под которым понимается совокупность смежных мартенситных микроэлементов, имеющих одинаковую ориентацию кристаллической решетки. Принимаются следующие гипотезы.

1. Прямое превращение представляет собой совокупность двух одновременно происходящих процессов зарождения и развития мезоскопических мартенситных элементов.
2. Обратное превращение сводится лишь к деградации (уменьшению объема) имеющихся мартенситных мезоэлементов.
3. Из всех возможных ориентаций зарождающегося мартенситного мезоэлемента выбирается та, на кристаллографической деформации которой локальные напряжения, действующие в области зарождения, совершают наибольшую работу. Локальные напряжения включают в себя как внешние приложенные напряжения, так и микронапряжения.
4. Развитие (деградация) мезоскопического элемента происходит путем присоединения к нему (отсоединения от него) микрообъемов, перешедших в мартенситное (аустенитное) состояние. Ориентация присоединяющегося мартенситного микрообъема совпадает с общей ориентацией кристаллографических ячеек мезоэлемента.
5. Изменение объема мезоскопического мартенситного элемента пропорционально текущему значению этого объема с коэффициентом пропорциональности, который может зависеть от параметра фазового состава.

Ниже изложена одномерная модель деформирования СПФ при прямом мартенситном превращении, основанная на сформулированных гипотезах. Пусть представительный объем СПФ состоит из $M = const$ микроскопических элементов, N – количество микроэлементов представительного объема, находящихся в рассматриваемый момент времени в мартенситном состоянии. Считая объемы микроэлементов одинаковыми, для объемной доли мартенситной фазы можно написать

$$q = \frac{N}{M}, \qquad dq = \frac{dN}{M} \tag{2.1}$$

В рассматриваемой одномерной модели возможны два вида ориентации низкосимметричной кристаллической структуры мартенситных микрообъемов, соответствующих кристаллографической деформации растяжения $+\rho_0$ или кристаллографической деформации сжатия $-\delta_0$. Пусть $N = N_1 + N_2$, где N_1, N_2 – количество мартенситных микроэлементов с первой и второй ориентацией, соответственно. Тогда осредненная по представительному объему макроскопическая фазовая деформация будет равна

$$\varepsilon^{ph} = \frac{\rho^0 N_1 - \delta^0 N_2}{M} = \frac{\rho^0 N_1 - \delta^0 N_2}{N} q. \tag{2.2}$$

Приращение dN за малый фрагмент процесса прямого превращения можно представить в виде

$$dN = d_1 N + d_2 N. \tag{2.3}$$

Здесь $d_1 N, d_2 N$ – приращения количества мартенситных микрообъемов соответственно за счет развития и зарождения мезоскопических элементов. Аналогично, приращение осредненной по представительному объему фазовой деформации можно разделить на слагаемые, связанные с развитием и зарождением мартенситных элементов:

$$d\varepsilon^{ph} = d_1\varepsilon^{ph} + d_2\varepsilon^{ph}$$

Рассмотрим сначала процесс развития мартенситных элементов. Соответствующее приращение количества мартенситных микрообъемов можно представить в виде

$$d_1 N = d_1 N_1 + d_1 N_2, \tag{2.4}$$

где индексы 1 и 2 у величины N соответствуют приращениям количества микрообъемов с кристаллографическими деформациями растяжения и сжатия соответственно. Проведя осреднение по представительному объему, можно написать

$$d_1\varepsilon^{ph} = \frac{\rho^0 d_1N_1 - \delta^0 d_1N_2}{M} = \frac{\rho^0 d_1N_1 - \delta^0 d_1N_2}{d_1N}\frac{d_1N}{M}. \tag{2.5}$$

На основании предположений 4 и 5 имеем

$$\frac{d_1N_1}{N_1} = \frac{d_1N_2}{N_2} = f(q)dq. \tag{2.6}$$

Из (2.6) легко получить, что

$$d_1N = Nf(q)dq = Mqf(q)dq \tag{2.7}$$

Подставляя (2.6) в (2.5), сравнивая результат с (2.2) с учетом (2.7) получаем

$$d_1\varepsilon^{ph} = \frac{\rho^0 N_1 - \delta^0 N_2}{N}\frac{d_1N}{M} = \frac{\varepsilon^{ph}}{q}\frac{d_1N}{M}. \tag{2.8}$$

Аналогично (2.4), для приращения количества мартенситных микрообъемов d_2N, связанных с зарождением мезоэлементов, можно записать: $d_2N = d_2N_1 + d_2N_2$ с тем же, что и ранее, значением индексов у величины N. Пусть $F(S)$ – интегральная функция распределения микронапряжения σ^*, действующего в представительном объеме материала: $F(S) = P(\sigma^* < S)$. В соответствии с гипотезой 3, данный микрообъем испытывает при переходе в мартенситное состояние деформацию растяжения $+\rho^0$, если для этого элемента сумма действующего внешнего напряжения и микронапряжения неотрицательна. Вероятность этого события равна $P\Big((\sigma + \sigma^*) \ge 0\Big) = 1 - F(-\sigma)$. В противоположном случае – микрообъем испытывает деформацию сжатия с вероятностью $P\Big((\sigma + \sigma^*) < 0\Big) = F(-\sigma)$. В этом случае

$$\frac{d_2N_1}{d_2N} = 1 - F(-\sigma), \quad \frac{d_2N_2}{d_2N} = F(-\sigma). \tag{2.9}$$

Проведя осреднение по представительному объему, и учитывая (2.9), получаем

$$d_2\varepsilon^{ph} = \frac{\rho^0 d_2N_1 - \delta^0 d_2N_2}{d_2N}\frac{d_2N}{M} = \Big(\rho^0 - (\rho^0 + \delta^0)F(-\sigma)\Big)\frac{d_2N}{M}. \tag{2.10}$$

Складывая (2.8) и (2.10), получаем

$$d\varepsilon^{ph} = \frac{\varepsilon^{ph}}{q}\frac{d_1N}{M} + \Big(\rho^0 - (\rho^0 + \delta^0)F(-\sigma)\Big)\frac{d_2N}{M}. \tag{2.11}$$

Согласно (2.7), (2.1), (2.3), можно записать

$$\frac{d_1N}{M} = qf(q)dq, \qquad \frac{d_2N}{M} = \big(1 - qf(q)\big)dq. \tag{2.12}$$

Подставляя (2.12) в (2.11), получаем искомое определяющее соотношение для макроскопических фазовых деформаций:

$$d\varepsilon^{ph} = \left(c_0(\sigma)(1 - qf(q)) + f(q)\varepsilon^{ph}\right)dq, \qquad c_0(\sigma) = \rho^0 - (\rho^0 + \delta^0)F(-\sigma) \qquad (2.13)$$

В процессе прямого превращения объем мартенситных мезоэлементов не может уменьшаться, а зарождение мезоэлементов приводит к росту количества мартенситных микрообъемов:

$$d_1N \geq 0, \quad d_2N \geq 0. \qquad (2.14)$$

Из (2.14), (2.12) следуют ограничения на функцию модели $f(q)$ $0 \leq f(q) \leq 1/q$.

Для случая обратного превращения, согласно положению 2, все дифференциалы с индексом 2 следует положить равными нулю. Тогда из второй формулы (2.12) следует $f(q) = 1/q$, и соотношение (2.13) принимает вид известного соотношения, адекватно описывающего явление монотонной памяти формы:

$$d\varepsilon^{ph} = \frac{\varepsilon^{ph}}{q}dq,$$

которое, таким образом, получено в рамках микромеханической модели, исходя из предположения о том, что обратное превращение сводится только к деградации мартенситных элементов.

Можно предложить следующее обобщение модели на трехмерный случай

$$d\varepsilon_{ij}^{ph\,\prime} = \left(\frac{3}{2}\frac{\sigma_{ij}'}{\sigma_i}\delta_0(\mu_\sigma)\Phi\left(\frac{\sigma_i}{\sigma_0}\right)(1 - qf(q)) + f(q)\varepsilon_{ij}^{ph\,\prime}\right)dq, \; \varepsilon_{kk}^{ph} = \varepsilon_0 q \qquad (2.15)$$

$$d\varepsilon_{ij}^{ph} = \frac{\varepsilon_{ij}^{ph}}{q}dq$$

В (2.15) первые два уравнения соответствует прямому, а третье – обратному превращению, штрихом обозначены девиаторы, $\delta_0(\mu_\sigma)$ – зависимость предельного значения интенсивности фазовых деформаций прямого превращения от параметра вида девиатора напряжений, ε_0 – величина объемного эффекта реакции прямого превращения.

3. Описание деформационных явлений, характерных для прямого превращения

Интегрирование соотношения (2.13) для фазовых деформаций прямого превращения при $\sigma = const$ и начальном условии $\varepsilon^{ph}(q_0) = \varepsilon^{ph0}$ дает

$$\varepsilon^{ph} = c_0(\sigma)q + \left(\varepsilon^{ph0} - c_0(\sigma)q_0\right)\exp\left(\int_{q_0}^{q} f(\xi)d\xi\right). \qquad (3.1)$$

В частности, когда прямое превращение происходит под действием постоянных напряжений из полностью мартенситного состояния ($q_0 = 0, \varepsilon^{ph0} = 0$), из (3.1) следует

$$\varepsilon^{ph}(\sigma, q) = c_0(\sigma)q. \qquad (3.2)$$

Согласно (3.2), деформация, накапливаемая при полном прямом превращении из полностью аустенитного состояния под действием постоянного напряжения пропорциональна объемной доле мартенситной фазы и не зависит от функции модели $f(q)$. Используя общие свойства функций распределения, из (2.13), (3.2) можно получить, что при увеличивающихся растягивающих напряжениях $\sigma \to +\infty$ деформация, накапливаемая при полном прямом превращении $\varepsilon^{ph}(\sigma,1)$ асимптотически стремится к постоянному значению $+\rho^0$ и ограничена сверху этим значением. Аналогично, при увеличивающемся по модулю сжимающем напряжении $\sigma \to -\infty$ деформация асимптотически стремится к величине $-\delta^0$. Следовательно, в рамках предлагаемой модели, в отличие от прототипа [1–3], в процессе накопления фазовых деформаций при прямом превращении и достаточно больших по модулю напряжениях происходит насыщение и фазовые деформации ограничены сверху при любых напряжениях. При этом модули максимальных деформаций, которые могут быть накоплены при растягивающих и сжимающих напряжениях различны, что соответствует экспериментальным данным для многих СПФ.

Пусть полное прямое превращение происходит в отсутствии напряжений. В этом случае

$$\varepsilon^{ph}(0,1) = \rho^0 - (\rho^0 + \delta^0)F(0). \tag{3.3}$$

Накапливаемая в таких условиях фазовая деформация может быть связана с двумя причинами – объемным эффектом реакции прямого превращения и явлением обратимой памяти формы. Чтобы разделить два эти эффекта, предполагается, что эффект обратимой памяти формы связан с тем, что количество микрообъемов в представительном объеме СПФ с растягивающими микронапряжениями не равно количеству микрообъемов, в которых действуют сжимающие напряжения: $P(\sigma^* < 0) \neq P(\sigma^* > 0)$. В терминах функции распределения это условие имеет вид $F(0) \neq 0.5$. Следовательно, величину деформации объемного эффекта реакции прямого превращения ε_V можно получить, положив в (3.3) $F(0) = 0.5$, а оставшаяся часть величины $\varepsilon^{ph}(0,1)$ будет соответствовать деформации обратимой памяти формы ε_1:

$$\varepsilon_V = 0,5\left(\rho^0 - \delta^0\right), \qquad \varepsilon_1 = \left(\frac{\rho^0 + \delta^0}{2}\right)\left(1 - 2F(0)\right). \tag{3.4}$$

Согласно (3.4), в рамках данной модели объемный эффект реакции жестко связан с различием предельных значений деформации прямого превращения при растяжении и сжатии, а эффект обратимой памяти формы определяется асимметрией функции распределения микронапряжений.

Пусть микронапряжения имеют нормальное распределение

$$f(S) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0}\exp\left(-\frac{(S-\tilde{S})^2}{2\sigma_0^2}\right), \quad F(S) = 0.5 + 0.5\Phi\left(\frac{S-\tilde{S}}{\sigma_0}\right),$$

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^x \exp(-t^2/2)\,dt,$$

где $\tilde{S}$, σ_0 – математическое ожидание и квадратичное уклонение микронапряжений, Φ – функция Лапласа. В этом случае деформация, накапливаемая при полном прямом превращении под действием постоянного напряжения равна

$$\varepsilon^{ph}(\sigma,1) = \frac{\rho^0 - \delta^0}{2} + \frac{\rho^0 + \delta^0}{2}\Phi\left(\frac{\sigma + \tilde{S}}{\sigma_0}\right). \tag{3.5}$$

Считая, что деформация объемного эффекта реакции всегда пропорциональна q: $\varepsilon_v = 0,5(\rho^0 - \delta^0)q$, можно из общего соотношения (2.13) выделить дифференциальное уравнение для девиаторной компоненты фазовых деформаций $\varepsilon^{ph\,\prime}$:

$$d\varepsilon^{ph\,\prime} = \left(\frac{\rho^0 + \delta^0}{2} \Phi\left(\frac{\sigma + \bar{S}}{\sigma_0} \right)(1 - qf(q)) + f(q)\varepsilon^{ph\,\prime} \right) dq. \tag{3.6}$$

Пользуясь асимптотическим представлением функции Лапласа: $\Phi(x) \approx \sqrt{2/\pi}\, x$ для малых x, можно получить, что зависимость (3.5) для малых значений $(\sigma + \bar{S})/\sigma_0 << 1$ является асимптотически линейной

$$\varepsilon^{ph}(\sigma,1) \approx \frac{\rho^0 - \delta^0}{2} + \frac{\rho^0 + \delta^0}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sigma + \bar{S}}{\sigma_0}.$$

Нелинейную асимптотику зависимости $\varepsilon^{ph}(\sigma,1)$ от σ, наблюдаемую для малых напряжений в никелиде титана, следуя некоторым экспериментальным данным [4], можно получить, используя вместо нормального аналог закона распределение Вейбулла [5].

Величина обратимой памяти формы равна $\varepsilon_1 = 0,5(\rho^0 + \delta^0)\Phi(\bar{S}/\sigma_0)$. Этот эффект будет отсутствовать, если $\bar{S} = 0$, что можно трактовать, как отсутствие ориентированных микронапряжений.

Пусть на первом этапе прямого превращения при $0 \le q \le q_1$ действовало напряжение σ, после чего оно было снято и дальнейшее охлаждение и прямое превращение происходило в отсутствии напряжений. В этих условиях для некоторых СПФ характерно явление ориентированного превращения, заключающееся в том, что фазовые деформации продолжают возрастать в сторону ранее приложенного напряжения после его снятия. Интегрируя уравнение (3.6) при условии $\bar{S} = 0$ для второго этапа процесса можно получить

$$\varepsilon^{ph\,\prime} = \frac{\rho^0 + \delta^0}{2} \Phi\left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) q_1 \exp\left(\int_{q_1}^{q} f(\xi) d\xi \right). \tag{3.7}$$

Следуя (3.7), в рамках данной модели качественно правильно описывается явление ориентированного превращения.

4. Термодинамическое замыкание частного случая модели

Пусть $f(q) = 0$. Уравнение энергетического баланса и условия справедливости второго закона термодинамики в рамках такой модели для СПФ с произвольной шириной гистерезиса получены в [6]. Ниже эти соотношения приведены для частного случая СПФ с широким гистерезисом, т.е. таких, что

$$A_s^0 \ge M_s^0, \tag{4.1}$$

$$k_q \Delta T = C_\sigma \dot{T} - \Delta U_0 \dot{q} + T\alpha \dot{\sigma}_{kk} - d_\sigma \quad , \tag{4.2}$$

$$M_s^\sigma = M_s^0 + d_\sigma \Delta S_0^{-1}, \quad A_s^\sigma = A_s^0 + d_\sigma \Delta S_0^{-1}, \tag{4.3}$$

$$d_\sigma = \delta_0 d(\mu_\sigma)\Phi(\sigma_i / \sigma_0)\sigma_i + Z(\sigma), \quad d_\sigma = \sigma_{ij}{}'\varepsilon_{ij}^{ph0} / q_0 + Z(\sigma) \tag{4.4}$$

$$Z(\sigma) = \frac{\Delta K \sigma_{kk}^2}{6K_M K_M} + \frac{\Delta G \sigma_i^2}{6G_M G_A} + \frac{\sigma_{kk}\varepsilon_0}{3}, \quad \Delta K = K_A - K_M, \quad \Delta G = G_A - G_M$$

Здесь $\Delta U_0, \Delta S_0$ – объемные плотности энтальпии и энтропии перехода, d_σ – диссипативное слагаемое в уравнении энергетического баланса (4.2), вычисляемое по первой или второй формулам (4.4) для прямого и обратного превращения, соответственно, C_σ – теплоемкость единицы объема при постоянном напряжении, K, G – утроенный объемный и сдвиговой модули, индексами A и M обозначены их значения в аустенитном и мартенситном состояниях. Условие выполнения второго закона термодинамики сводится к неравенству (4.1), при условии, что температуры начала прямого и обратного превращений при действии механических напряжений определяются зависимостями (4.3).

Работа выполнена при финансовом содействии РФФИ, грант № 05-01-00841.

Список литературы

1. Мовчан А.А. Микромеханические определяющие уравнения для сплавов с памятью формы. Проблемы машиностроения и надежности машин. 1994. № 6. С. 47-53.
2. Мовчан А.А. Микромеханический подход к описанию деформации мартенситных превращений в сплавах с памятью формы. Изв. РАН. Механика твердого тела. 1995. № 1. С. 197-205.
3. Мовчан А.А. Выбор аппроксимации диаграммы перехода и модели исчезновения кристаллов мартенсита для сплавов с памятью формы. Журнал прикладной механики и технической физики. 1995. Т. 36. № 2. С. 173-181.
4. Wu X.D., Sun G.J., Wu J.S. The nonlinear relationship between transformation strain and applied stress for nitinol // Materials Letters 2003. V. 57. P. 1334-1338.
5. Мовчан А.А., Мишустин И.В. Термодинамический анализ механического поведения сплавов с памятью формы // «Упругость и неупругость» Сборник трудов Международного симпозиума по проблемам механики деформируемых тел, посвященный 95-летней годовщине со дня рождения А.А. Ильюшина. М.: Изд-во МГУ. 2006 г. С.195-203.
6. Мовчан А.А., Мишустин И.В. Термодинамическое описание нелинейного деформирования сплавов с памятью формы // Журнал функциональных материалов. 2007. Т. 1. №6. С. 221-226.

УДК 539.4

РЕШЕНИЕ ДВАЖДЫ СВЯЗНЫХ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ О ДЕФОРМИРОВАННОМ, ФАЗОВОМ И ТЕМПЕРАТУРНОМ СОСТОЯНИИ ЭЛЕМЕНТОВ ИЗ СПЛАВОВ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ С УЧЕТОМ ДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

Мовчан А. А., Казарина С. А., Чжо Ту Я.

ИПРИМ РАН Москва,
movchan47@mail.ru

При практическом применении элементов из сплавов с памятью формы (СПФ) регулировку их температуры часто осуществляют путем пропускания электрического тока. Данная работа посвящена постановке и некоторым результатам решения связных