

Санкт-Петербургский государственный университет
Механика и математическое моделирование
Механика деформируемого твердого тела

Выпускная квалификационная работа
**«Моделирование функционально-
механического поведения сплавов с памятью
формы на основе CuAlNi»**

Чернышева Татьяна Юрьевна

Научный руководитель:
доцент, к.ф-м н., М.Е. Евард

Рецензент:
доцент, к.ф-м н., Б.Н.Семенов

St. Petersburg State University
Mechanics and mathematical modeling
Mechanics of the deformable body

Bachelor's Thesis

«Modeling of functional and mechanical behavior of CuAlNi-based shape memory alloys»

Chernysheva Tatiana

Scientific adviser:
Candidate of Physics and Mathematics, M.E.Evard

Reviewer:
Candidate of Physics and Mathematics, B.N.Semenov

Saint-Petersburg
2018

Оглавление

Введение.....	4
Глава 1. Обзор литературы.....	5
1.1 Функциональные свойства сплавов с эффектом памяти формы... 5	
1.2 Механизм деформирования СПФ.....	7
1.3 Применение сплавов, обладающих эффектом памяти формы.	10
1.4 Основные материалы с эффектом памяти формы. Преимущества материала с памятью формы на основе CuAlNi.....	11
1.5 Моделирование. Макро- и Микроструктурная модели	12
1.6 Анизотропный закон Гука. Тензоры упругих постоянных и податливостей.....	14
Глава 2. Цели и методики исследования	16
2.1 Цели исследования.	16
2.2 Объекты и методики исследования.	17
Глава 3. Результаты экспериментальных исследований.....	18
3.1 Построение матрицы деформации при превращении $\beta_1(\text{DO}_3) \leftrightarrow \beta_1'(18\text{R})$ в монокристалле CuAlNi.	18
3.2 Расчет кристаллографического ресурса для превращения $\beta_1(\text{DO}_3) \leftrightarrow \beta_1'(18\text{R})$ в монокристалле CuAlNi.....	21
3.3 Учет анизотропии упругих постоянных при построении микроструктурной модели.	22
3.4 Общий вид тензоров упругих констант и податливостей для рассматриваемого превращения $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$	24
3.5 Результаты моделирования эффекта псевдоупругости. Сравнение с данными Н. Horikawa.	29
3.6 Учет зависимости упругих констант аустенитной фазы от температуры проведения эксперимента	32
Заключение.	34
Список литературы:	36

Введение.

В настоящее время одной из основных задач материаловедения является разработка и создание интеллектуальных материалов, способных откликаться на внешние воздействия с помощью изменения своих функциональных свойств. Примером таких материалов можно назвать широко известные ныне сплавы, обладающие эффектом памяти формы (ЭПФ). Одним из самых распространенных сплавов является никелид титана (TiNi), который нашел широкое применение в самых разных областях от медицины до космического оборудования. Однако, во многих приложениях требуются такие характеристики, которыми никелид титана не обладает. Например, узкий гистерезис, который позволяет обеспечивать деформацию при почти постоянном нагружении, или совершенная память формы при высоких температурах. В связи с этим было предложено ввести в рассмотрение сплавы на основе меди, которые в свою очередь, не только обладают вышеуказанными функциональными свойствами, но также являются более дешевыми материалами, что экономически выгоднее.

Для эффективного использования сплавов с памятью формы в различных приложениях необходимы модели, позволяющие адекватно рассчитывать деформацию этих материалов. На данный момент существует довольно много моделей, описывающих поведение сплавов на основе TiNi, и совсем немного для CuAlNi. Таким образом, цель настоящей работы – моделирование функционально-механических свойств сплавов с памятью формы на основе CuAlNi – является весьма актуальной задачей современного материаловедения.

Глава 1. Обзор литературы

1.1 Функциональные свойства сплавов с эффектом памяти формы.

Одними из самых известных свойств материала являются упругость и пластичность. Но среди этих двух понятий уже в 50-х годах прошлого века появилось еще одно - эффект памяти формы. Оно не относится конкретно ни к тому, ни к другому свойству, но одновременно ему присущи качества обоих. Так, полный возврат деформации после действия нагрузки – признак упругости, а появление остаточной деформации – признак пластичности. Такая деформация получила название неупругой.

Известно, что при деформировании обыкновенных сплавов и металлов (не обладающих эффектом памяти формы) диаграммы деформирования имеют простой вид (рис. 1 (а)). За участком упругого поведения следует участок пластического течения. При разгрузке, независимо от точки на диаграмме, восстановление деформации происходит всегда по упругому закону, но появляется остаточная деформация, являющаяся пластической, которая может быть удалена только непосредственным механическим воздействием.

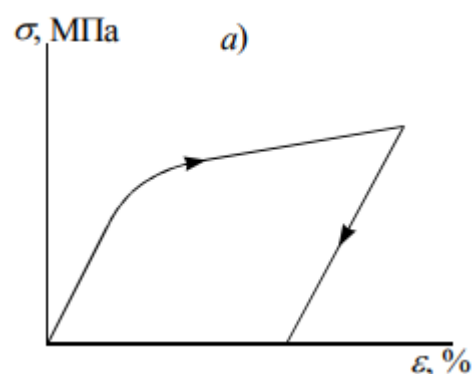


Рис. 1(а) Пример типичного деформационного поведения сплава/металла без памяти формы [2]

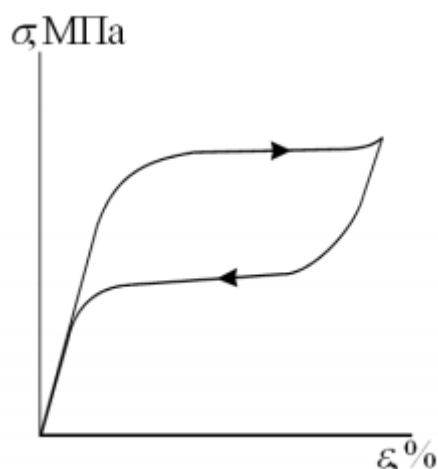


Рис. 1(б) Пример типичного деформационного поведения сплава с памятью формы [2]

Говоря о деформации сплавов с эффектом памяти формы, замечаем, что диаграмма деформирования имеет более сложный характер. Кривая разгрузки не совпадает с кривой нагружения, а пластическая деформация может восстановиться полностью (рис.1(б)) [8]. Такое различное поведение можно объяснить наличием в сплавах с эффектом памяти формы таких механизмов деформирования,

как движение дислокаций, фазовое превращение или изменение ориентации мартенсита.

Эффект памяти формы (ЭПФ) – явление возврата материала к первоначальной форме при нагреве или σ разгрузке после пластической деформации (рис.2). Данное явление можно наблюдать в некоторых сплавах в строго определенном для каждого интервале температур [2].

Для практики большой интерес представляет многократная обратимость деформации только за счет температуры. Поэтому среди эффектов памяти формы особое место занимает эффект обратимой памяти формы (ОЭПФ), заключающийся в способности образца в отсутствие приложенного напряжения при охлаждении накапливать, а при нагреве возвращать сравнительно большие деформации (рис.3).

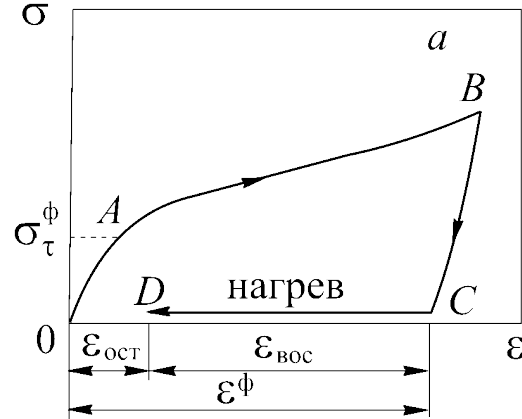


Рис.2 Схема реализации ЭПФ [11]

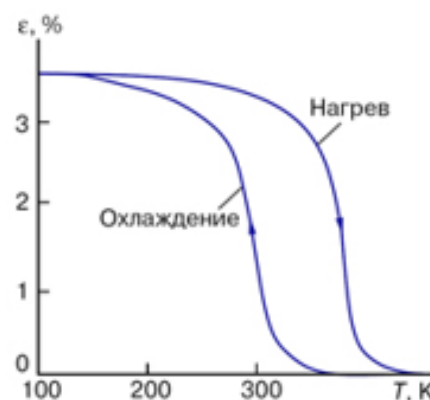


Рис.3 Диаграмма, иллюстрирующая обратимый эффект памяти формы [2]

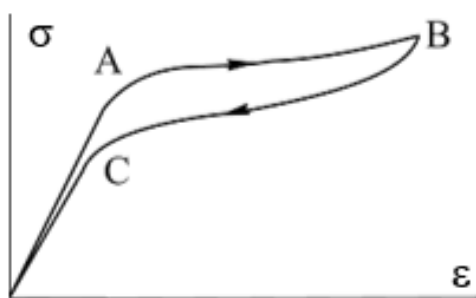


Рис. 4 Псевдоупругое механическое поведение на основе сплава CuAlNi при $A_f < T < M_d$ * [11]

первоначальную форму после снятия нагрузки) (рис.4).

Подробное описание эффекта:

Еще одним важным эффектом СПФ является эффект **сверхупругости (псевдоупругости)** (свойство материала, подвергнутого нагружению до напряжения, значительно превышающего предел текучести, полностью восстанавливать

На участке АВ пластическая деформация обусловлена протеканием некой реакции, инициируемой механическим нагружением. В ходе данного процесса происходит превращение «аустенит-мартенсит». Полученный в данных условиях мартенсит термодинамически неустойчив и при снятии нагрузки превращается обратно в аустенит, что сопровождается исчезновением пластической деформации (участок ВС).

Значение псевдоупругой деформации может составлять для разных сплавов от 2 до 15%, что позволяет изготавливать из них упругие элементы с существенно более высокими деформационными способностями.

Кроме того, существуют еще эффекты **сверхпластичности** (состояние материала, имеющего кристаллическую структуру, которое допускает деформации, на порядок превышающие максимально возможные для этого материала в обычном состоянии) и генерации реактивных напряжений (способность развивать реактивные напряжения в условиях стесненной деформации при нагревании предварительно деформированного образца).

Такие механические свойства рассматриваемых сплавов связаны в основном с поведением кристаллической решетки при изменении механического напряжения σ и температуры T [1,2,9,14].

(* - M_0 – температура, ниже которой мартенсит может возникнуть не только вследствие понижения температуры, но и под действием механического напряжения)

1.2 Механизм деформирования СПФ

В основе необычных функциональных свойств СПФ лежат термоупругие мартенситные превращения, которые реализуются в сплавах с памятью формы при изменении температуры или напряжения. Названы эти превращения по имени немецкого металловеда А. Мартенса [2].

Мартенситные превращения свойственны обширному классу металлов и сплавов. Для них типичны слабая зависимость температур начала

и окончания превращения от скорости изменения температуры, чаще всего обратимый характер превращения, заметное несовпадение (гистерезис) температур прямой и обратной реакции, очень часто сильная зависимость температур перехода от механических напряжений и другие признаки.

Мартенситное превращение, это не что иное, как *полиморфное превращение*, при котором изменение взаимного расположения атомов кристалла происходит путем их упорядоченного перемещения, причем относительные смещения соседних атомов малы по сравнению с межатомным расстоянием. Данный способ перестройки кристаллической решетки является одним из фундаментальных и характерен для всех случаев, когда изменение решетки происходит в отсутствие диффузии. Такие превращения считают близкими к двойникованию по кристаллофизическому механизму, во-первых, потому что они происходят бездиффузионно путем кооперативного перемещения атомов, а во-вторых, сами мартенситные реакции могут порождаться механическими напряжениями и деформациями. Однако, решетка после превращения становится кристаллогеометрически неэквивалентна решетке материнского кристалла [8].

Высокотемпературную фазу (из которой образуется низкотемпературная) принято называть аустенитом, а низкотемпературную - мартенситом. Аустенит имеет обычно более высокосимметричную элементарную ячейку, нежели мартенсит, а последний еще обладает и повышенной склонностью к механическому двойникованию [2].

При таком мартенситном превращении (рис.5) в исходной аустенитной фазе при понижении температуры зарождаются кристаллы мартенсита, которые растут при дальнейшем ее понижении. При увеличении же температуры происходит обратный

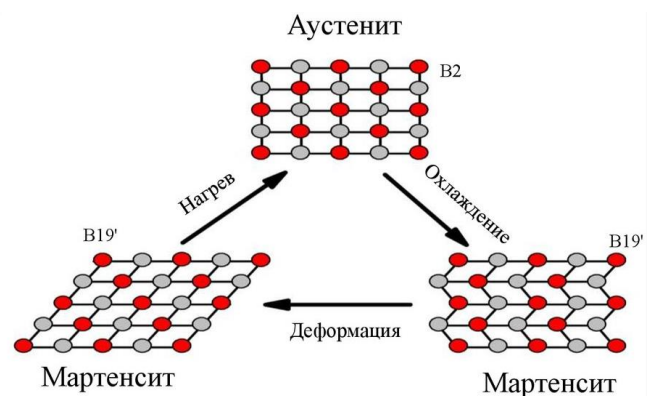


Рис.5 Схема термоупругого мартенситного превращения [2]

процесс. Иными словами, устанавливается термоупругое равновесие между кристаллом мартенсита и исходной матрицей [1].

Для обратимых мартенситных превращений характерна зависимость фазового состава от температуры (рис.6).

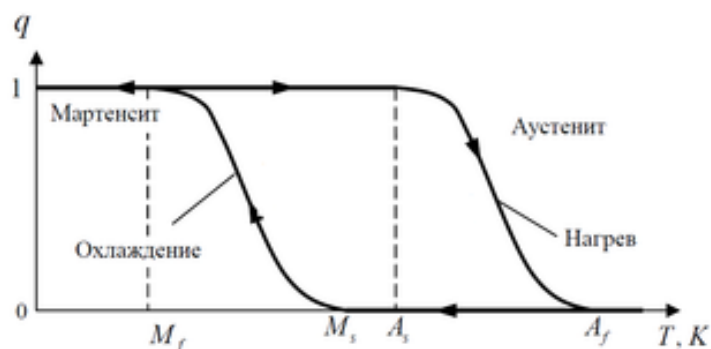


Рис.6 Зависимость объемной доли мартенсита от температуры [1,2,9]

Описание процесса: Образование мартенсита начинается при охлаждении из аустенитного состояния при температуре M_s . Далее по мере понижения температуры происходит увеличение объемной доли мартенсита. При достижении температуры M_f материал полностью переходит в мартенситную фазу (т.е. мартенсит занимает весь объем). Аналогично при нагревании обратное превращение начинается после достижения температуры A_s и материал полностью переходит в аустенит при температуре A_f . Температуры M_s и M_f называются температурами начала и окончания прямого мартенситного превращения, а температуры A_s и A_f – температурами начала и окончания обратного перехода соответственно [2]. Эти температуры мартенситных превращений, а также гистерезис превращения, вычисляемый как $H=A_f-M_s$ и являющийся различным для разных материалов, считаются параметрами мартенситных превращений. Они зависят от структуры, химического состава сплава, а также от его термической и механической обработок [14]. Как показывает опыт, набор явлений, которые связаны с мартенситными реакциями обнаруживается при температурах, находящихся в интервале M_f-A_f .

Таким образом, механизмы деформирования сплавов с памятью формы отличаются от механизмов деформирования обычных материалов, благодаря чему они могут демонстрировать необычные эффекты.

1.3 Применение сплавов, обладающих эффектом памяти формы.

В зависимости от температуры мартенситного превращения и механических свойств, сплавы, обладающие памятью формы, могут использоваться практически во всех областях, где применяются металлические материалы. Например, в медицине, космосе, добывающей промышленности, производстве всевозможных температурных датчиков и приводов, робототехнике при создании тепломеханических устройств и т.п.

Сплавы с памятью формы обладают способностью к возврату деформаций, благодаря чему их можно запрограммировать на довольно сложные движения, такие, например, которые выполняют самосооружающиеся конструкции. Одними из самых известных примеров называют самораскрывающиеся космические антенны, самовыдвигающиеся телескопические устройства, трансформируемые стержневые несущие конструкции (фермы) и т.п. (рис.7) Также, если использовать способность металла к проявлению многократно обратимой памяти формы, то можно сделать такие трансформирующиеся конструкции, которые будут совершать саморазвертывание и самосборку.

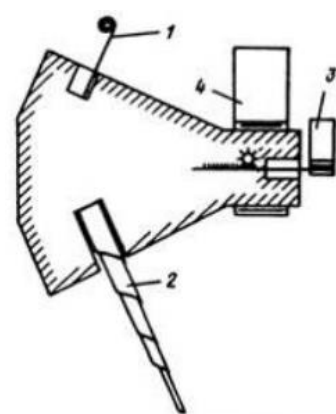


Рис. 7 Схема космического аппарата с самотрансформирующимися элементами:
1 – антенна;
2 – мех. стабилизатор;
3 – излучатель энергии;
4 – солнечная батарея [13]

Еще одной областью применения СПФ является создание плотных и неразъемных соединений: скрепление труб с помощью муфт из сплавов с памятью формы.

Также материалы, обладающие этим эффектом, широко применяются в медицине, например, в качестве имплантируемых в организм длительно функционирующих материалов. Они проявляют высокие эластичные свойства, способны изменять свою форму при изменении температуры и не разрушаться в условиях знакопеременной нагрузки. [12]

1.4 Основные материалы с эффектом памяти формы. Преимущества материала с памятью формы на основе CuAlNi.

Наиболее перспективным и распространенным из всех материалов с памятью формы является нитинол (TiNi). Именно его часто используют в устройствах и приборах разного назначения. Так происходит еще и потому, что он имеет ряд других полезных свойств помимо памяти формы: он обладает высокой коррозионной стойкостью, технологичностью и значительной прочностью. Но этот сплав имеет и ряд недостатков, таких как высокая стоимость, сложность в обработке деталей и отсутствие совершенной памяти формы при высоких температурах. В связи с этим стали рассматривать сплавы на основе меди. Одним из самых известных является сплав CuAlNi.

В настоящее время во многих отраслях промышленности рассматривается возможность использования эффекта памяти формы, следовательно, важным фактором стала экономичность в производстве сплавов. Также сплавы на основе меди отличаются наличием гистерезиса, который уже, чем у сплавов на основе никеля. В связи с этим использование сплавов на основе Cu выгоднее, чем на основе TiNi.

Рассмотрим различные состояния и фазы сплава CuAlNi. Интервал составов сплавов, которые могут практически применяться в качестве сплавов с эффектом памяти формы, определяется областью, в которой при высокой температуре существует β -фаза, т.е. ограничен составом, близким к Cu-14Al-4Ni. В равновесных условиях при определенной температуре происходит превращение, и β -фаза распадается на 2 другие: на γ -фазу при охлаждении, которая индуцируется напряжениями при температурах близких

к M_s , и на β_1' – фазу, которая образуется при приложении напряжений при температурах много больших, чем A_f [7].

В настоящей работе будет рассмотрено превращение $\beta_1(\text{DO}_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ в монокристалле на основе CuAlNi. Исследование проводится именно для этого сплава в связи с необходимостью использования материалов, которые показывают хорошие свойства (например, узкий гистерезис) во многих приложениях. В качестве примера можно привести создание виброзащитных устройств с элементами из СПФ, рассмотренных в тезисном докладе [6], которые являются одним из способов решения проблемы защиты аппаратуры, находящейся на борту малых космических аппаратов от вибрации.

1.5 Моделирование. Макро- и Микроструктурная модели

При построении теории деформации кристаллических тел всегда возникает вопрос о том, как именно будет рассматриваться модель: на макро или микро- уровне. При рассмотрении тел сплошной среды, всегда говорят о выборе физически бесконечно малого объема V_0 , который на самом верхнем макроскопическом уровне рассматривается как точка сплошной среды, для которой естественным образом вводятся вектора перемещения, а также тензоры деформации и напряжения. А вот на микроструктурном уровне нас интересует не точка, а ее «строение», благодаря которому формируются основные свойства всего материала на макроуровне.

Построение микроструктурной модели материала с мартенситными превращениями основывается на положениях, выдвинутых Г.В.Курдюмовым. Одними из основных признаков таких превращений является их бездиффузионность и согласованное кооперативное перемещение атомов на расстояния меньше межатомного. Рассматривая превращение, важно учитывать его многовариантность, которая, в свою очередь, обусловлена симметрией кристаллической решетки исходной фазы, как правило, кубической. В таком простом случае решетки количество

элементов симметрии равно 24, и, значит, имеется до 24 вариантов превращения, деформации которых вычисляются по соответствующим формулам. Если решетка конечной фазы и тензор чистой деформации также содержат в себе элементы симметрии, то некоторые из вариантов превращения могут совпасть, и тогда общее количество вариантов N станет равным одному из делителей числа 24. В связи с этим существует формула, позволяющая подсчитать деформацию зерна с учетом объемных долей мартенсита каждого из вариантов.

При этом необходимо учесть одну из основных гипотез, принимаемых в большинстве моделей, которая состоит в предположении о представлении полной деформации как суммы следующих компонент:

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^t + \varepsilon^{ph},$$

где ε^e – упругая деформация, ε^t – тепловое расширение, ε^{ph} – фазовое превращение

Поскольку на микроскопическом уровне внутри зерна могут находиться области $N + 1$ типов: аустенит и N вариантов мартенсита, можно выразить деформацию всего зерна ε^{gr} посредством усреднения:

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

где $\frac{1}{N} \Phi_n$ – объемная доля n -го варианта мартенсита, ε^A – тензор деформации аустенита, ε^{Mn} – тензор деформации n -ого варианта мартенсита.

При этом объемная доля мартенсита во всем объеме зерна $\Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_n \Phi_n$.

Следовательно, одна из компонент, т.е. фазовая деформация зерна, – это усреднение по всем мартенситным вариантам, т.е. $\varepsilon^{ph} = \frac{1}{N} \sum_n \Phi_n D_n$, где D_n – деформация n -го варианта в мартенсите. При этом подразумевается, что величины ε^{gr} , Φ^{gr} , ε^A , ε^{Mn} , Φ_n зависят от точки x и параметра ω – ориентации зерна, характеризующих объем зерна.

Важным фактом при построении модели является учет базиса. При рассмотрении всего зерна и расчете деформации в нем удобнее пользоваться

лабораторным базисом, а вот в ходе превращения для вычисления деформации аустенита и образовавшегося мартенсита естественным базисом является кристаллофизический. Поэтому необходим пересчет компонент тензора $\varepsilon^{(1)}$ к лабораторному базису с помощью матрицы тензора поворота $R(\omega)$:

$$\varepsilon_{ij}^{(1)} = R_{ip}(\omega) R_{jq}(\omega) \varepsilon_{pq}^{(1)}, \quad (2)$$

где индексы i, j обозначают компоненты, относящиеся к лабораторному базису, а индексы p, q — к кристаллофизическому [3].

1.6 Анизотропный закон Гука. Тензоры упругих постоянных и податливостей.

При построении модели необходимо учитывать различные факторы, влияющие на свойства материала, которые отражаются в различных константах. Поскольку объектом моделирования в данной работе является сплав с памятью формы CuAlNi, который в аустенитном состоянии демонстрирует существенную анизотропию упругих свойств, важно понимать, как изменится известный всем закон Гука ($\sigma = E\varepsilon$, который является важнейшим соотношением для вычисления напряжений или деформаций в упругом изотропном теле), если среда станет анизотропной, т.е. свойства материала станут различными для различных направлений. В таком случае возникает следующее определяющее уравнение, связывающее тензор напряжений и тензор деформаций:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad \text{где } C_{ijkl} \text{ – тензор упругих постоянных} \quad (3)$$

$$\text{и } \varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad \text{где } S_{ijkl} \text{ – тензор упругих податливостей} \quad (4)$$

Соотношение (3) называется обобщенным законом Гука. Коэффициенты C_{ijkl} образуют тензор упругих констант 6×6 , который содержит 81 компоненту. Однако, благодаря симметрии обоих тензоров (деформации и напряжений) количество констант уменьшается до 36.

Для удобства записи было введено шестимерное пространство векторов

$$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6), \varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6),$$

$$\text{где } \sigma_1 = \sigma_{11}, \sigma_2 = \sigma_{22}, \sigma_3 = \sigma_{33}, \sigma_4 = \sigma_{23}, \sigma_5 = \sigma_{13}, \sigma_6 = 2\sigma_{12},$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{11}, \varepsilon_2 = \varepsilon_{22}, \varepsilon_3 = \varepsilon_{33}, \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{23}, \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{13}, \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{12}$$

Тогда закон Гука (3) принимает вид $\sigma_k = C_{kl}\varepsilon_l$, $k, l = 1, 2, \dots, 6$.

Если тело обладает свойствами симметрии упругих свойств (имеет ось или плоскость симметрии), то часть компонент тензора упругих постоянных обращается в ноль. Так, например, для ортотропной среды, т.е. для среды, обладающей тремя взаимно перпендикулярными плоскостями симметрии, тензор коэффициентов выглядит следующим образом:

$$[C_{kl}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix}$$

Таким образом независимых компонент стало 12 (а если еще и $C_{kl} = C_{lk}$, то останется всего 9).

В случае изотропной среды (т.е. упругие свойства среды не зависят от выбора системы координат, использованной для их описания) любая плоскость и любая ось являются плоскостью или осью симметрии, следовательно, число независимых постоянных сводится к двум: λ и μ - постоянным Ламе.

$$[C_{kl}] = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}$$

Где постоянные Ламе связаны с коэффициентом Пуассона и модулем Юнга следующим образом:

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (5) \quad [16]$$

Глава 2. Цели и методики исследования

2.1 Цели исследования.

Анализ данных литературы, приведенный в предыдущей главе, показывает, что сплав с памятью формы CuAlNi является перспективным объектом для изучения как с экономической точки зрения, так и со стороны функциональных свойств и может найти множество применения в различных областях науки. Но в отличие от изотропных материалов, моделирование функционального поведения усложняется, в первую очередь, за счет анизотропии упругих свойств. А значит, необходимо учесть этот факт.

Следовательно, целью работы является изучение функционально-механического поведения сплава с памятью формы CuAlNi и моделирование одной из типичных задач механики и материаловедения: реализация эффекта псевдоупругости.

В связи с поставленной в работе целью, были решены **следующие задачи**:

1. Расчет тензора деформации для превращения $\beta_1(\text{DO3}) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ в монокристалле CuAlNi
2. Расчет кристаллографического ресурса для полученного тензора деформации
3. Учет анизотропии упругих постоянных в аустенитном состоянии
4. Построение модели для рассмотренного в пункте 1 превращения
5. Исследование зависимости угла наклона в аустенитной фазе от ориентации монокристалла
6. Сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными
7. Учет зависимости упругих постоянных от температуры в сплавах CuAlNi и построение σ - ε диаграмм для конкретных ориентаций.

2.2 Объекты и методики исследования.

Построение модели, в основе которой лежит микроструктурная модель, описанная в параграфе 1.5, производится в среде Visual studio. На данный момент предшественниками был создан мощный фундамент для описания функционально-механических свойств сплавов с памятью формы. Однако, модель не учитывала анизотропию упругих постоянных, что важно для получения правильной картины о свойствах материала.

С введением в рассмотрение данного факта необходимо учесть, что вычисления станут подчиняться уже закону Гука не для изотропной среды, а для анизотропной, т.е. более общему случаю, который описывается матрицами размера 6×6 . Это неизбежно повлияло на несколько частей уже написанного проекта. Во-первых, в программе необходимо было создать класс матриц размера 6 на 6 , описать для них методы, которые позволяют складывать эти матрицы, умножать их на числа и т.д. Во-вторых, учесть то, в каких частях проекта будет использоваться анизотропный закон Гука.

Для проверки работоспособности разработанной программы выполнено моделирование эффекта псевдоупругости в сплаве типа CuAlNi , для чего модельный образец подвергался нагружению при определенной температуре, после чего производилась разгрузка.

Глава 3. Результаты экспериментальных исследований.

3.1 Построение матрицы деформации при превращении $\beta_1(D03) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ в монокристалле CuAlNi.

При построении микроструктурной модели превращения одним из параметров является матрица деформации.

Рассмотрим превращение $D03 \leftrightarrow 18R$ в монокристалле CuAlNi. Если взять некий объем, состоящий из зерен, то за счет упорядоченности рассматриваемой кристаллической решетки, имеется возможность выделить отдельные кристаллографические направления, т.е. задать векторы, выходящие из начала координат и упирающиеся в узлы решетки.

Мартенситное превращение данного сплава с ЭПФ можно рассматривать в 2 этапа [4]:

- ① Деформация плоскости (110) исходной фазы (растяжение и сжатие)
- ② Сдвиг в плоскости (110), характеризующийся вектором $\bar{s} = \frac{1}{18} [\bar{1}10]$

Рассмотрим подробнее ①:

На этом этапе аустенитная плоскость (110) превращается в мартенситную плоскость (001) за счет сжатия вдоль [001] и удлинения вдоль $[\bar{1}10]$. Во время превращения угол α (изображенный на рис.9) меняет свое значение с $70^\circ 32'$ на 60° (что характерно плотно-упакованной структуре).

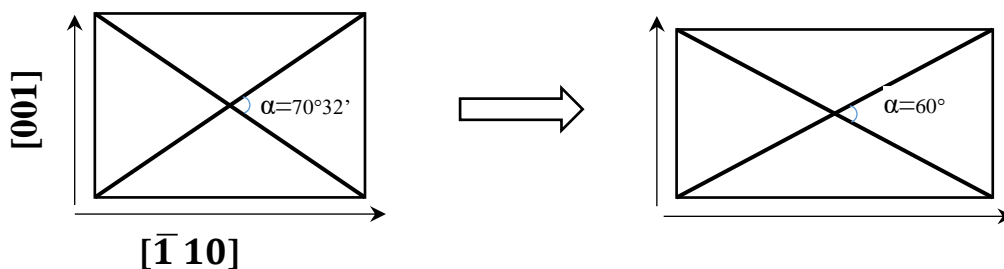


Рисунок 9

Для того чтобы найти градиент деформации $(F^{(1)})_e$ для 1-го этапа надо выразить относительное удлинение вдоль $[\bar{1}10]$ с помощью ε_1 и относительное сжатие вдоль $[001]$ с помощью ε_2 . Будем считать, что эти величины неотрицательны.

Введем нормированный базис $f = \{\frac{1}{\sqrt{2}}[110], \frac{1}{\sqrt{2}}[\bar{1}10], [001]\}$. Тогда градиент деформации в этом базисе:

$$(F^{(1)})_f = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

Следующим шагом найдем матрицу перехода от исходного базиса $e = \{[100], [010], [001]\}$ к базису f . Обозначим эту матрицу за $(A)_e^f$.

$$(A)_e^f = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Зная это, можно посчитать градиент деформации в базисе e :

$$\begin{aligned} (F^{(1)})_e &= (A)_e^f (F^{(1)})_f ((A)_e^f)^{-1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \varepsilon_2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 - \varepsilon_1 & 0 \\ 1 & 1 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}(1 - \varepsilon_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 + \varepsilon_1 & -\varepsilon_1 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 2 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1 - \varepsilon_2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

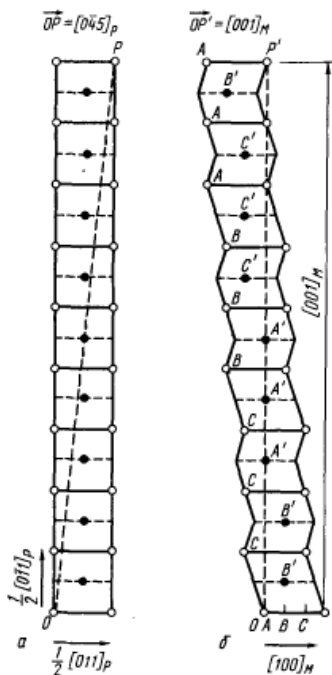


Рис.10 Сдвиг и перемещение при превращении из аустенитной фазы D03 в мартенситную 18R [15]

Новый базис, в котором происходит сдвиг (т.е. в растянутом и сжатом базисе f), обозначим за g . Далее для нахождения матрицы градиент в этом новом базисе необходимо воспользоваться формулой:

$$(F^{(2)})_g = I + \bar{s} \otimes \bar{n}, \text{ где } \bar{s}_g = \frac{1}{18}[\bar{1}10] \text{ - это вектор смещения и } \bar{n} = [110]$$

Итого:

$$\begin{aligned} (F^{(2)})_g &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{18} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (\bar{1} \ 1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{18} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{17}{18} & \frac{1}{18} & 0 \\ -\frac{1}{18} & \frac{19}{18} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Наконец, для нахождения матрицы градиента деформации в базисе e надо рассмотреть композицию матриц:

$$\begin{aligned} (F)_e &= (F^{(1)})_e (F^{(2)})_g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 + \varepsilon_1 & -\varepsilon_1 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 2 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1 - \varepsilon_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{17}{18} & \frac{1}{18} & 0 \\ -\frac{1}{18} & \frac{19}{18} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 2 + \varepsilon_1 & -\varepsilon_1 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 2 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1 - \varepsilon_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 17 & 1 & 0 \\ -1 & 19 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{18} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 34 + 18\varepsilon_1 & 2 - 18\varepsilon_1 & 0 \\ -2 - 18\varepsilon_1 & 38 + 18\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 36 - 36\varepsilon_2 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{18} \begin{pmatrix} 17 + 9\varepsilon_1 & 1 - 9\varepsilon_1 & 0 \\ -1 - 9\varepsilon_1 & 19 + 9\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 18 - 18\varepsilon_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

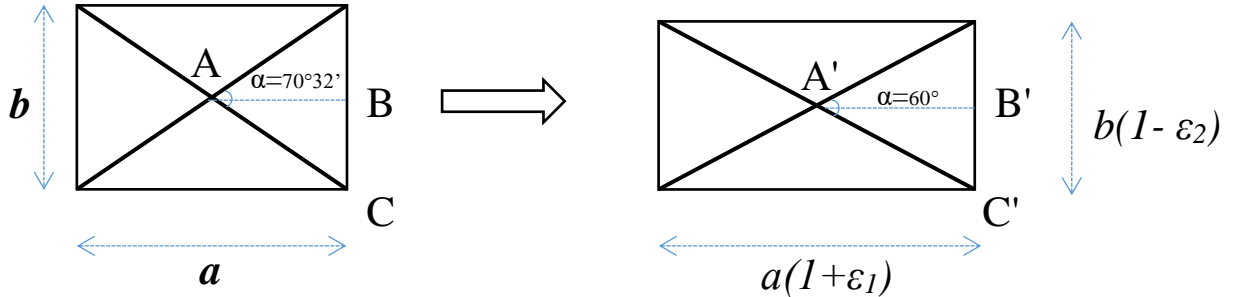
Теперь необходимо найти значения ε_1 и ε_2 . Для этого воспользуемся знанием об изменении угла α , а также о том, что изменение относительного объема, вычисляемое по формуле: $\theta = \det(F) - 1$, может быть принято равным 0.

Найдем $\det(F)$:

$$\begin{aligned} \det(F) &= \det\left(\frac{1}{18} \begin{pmatrix} 17 + 9\varepsilon_1 & 1 - 9\varepsilon_1 & 0 \\ -1 - 9\varepsilon_1 & 19 + 9\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 18 - 18\varepsilon_2 \end{pmatrix}\right) = \\ &= \frac{1}{18^3} [18(1 - \varepsilon_2)((17 + 9\varepsilon_1)(19 + 9\varepsilon_1) + (1 - 9\varepsilon_1)(1 + 9\varepsilon_1))] = \\ &= \frac{1}{18^2} [(1 - \varepsilon_2)(17 * 19 + 9\varepsilon_1 * 36 + 81\varepsilon_1^2 + 1 - 81\varepsilon_1^2)] = (1 - \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_1) \end{aligned}$$

Из геометрии, найдем соотношение между ε_1 и ε_2 :

Ниже показано преобразование одного из слоев исходной высокотемпературной фазы (аустените) в один из 6 типов возможных слоев плотно упакованной решетки в низкотемпературной фазе (мартенсите)



Если рассмотреть прямоугольные треугольники $\operatorname{tg} \left(\frac{70^\circ 32'}{2} \right) = \frac{b}{a} \approx 0,707$,

$$\operatorname{tg} \left(\frac{60^\circ}{2} \right) = \frac{b(1-\varepsilon_2)}{a(1+\varepsilon_1)} \approx 0,577$$

Отсюда следует, что $\frac{(1-\varepsilon_2)}{(1+\varepsilon_1)} = 0,816$

Решая систему $\begin{cases} \frac{(1-\varepsilon_2)}{(1+\varepsilon_1)} = 0,816 \\ (1-\varepsilon_2)(1+\varepsilon_1) - 1 = 0 \end{cases}$, находим, что $\begin{cases} \varepsilon_1 = 0,107 \\ \varepsilon_2 = 0,098 \end{cases}$

Исходя из полученного матрица градиента деформации будет:

$$(F) = \begin{pmatrix} 0,998 & 0,002 & 0 \\ -0,109 & 1,109 & 0 \\ 0 & 0 & 0,902 \end{pmatrix}, \text{ а значит тензор деформации Грина-}$$

Лагранжа представится в следующем виде:

$$D = \frac{1}{2}(F^T F - I) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0,998 & -0,109 & 0 \\ 0,002 & 1,109 & 0 \\ 0 & 0 & 0,902 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,998 & 0,002 & 0 \\ -0,109 & 1,109 & 0 \\ 0 & 0 & 0,902 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,0039 & -0,0594 & 0 \\ -0,0594 & 0,1149 & 0 \\ 0 & 0 & -0,0932 \end{pmatrix}$$

3.2 Расчет кристаллографического ресурса для превращения $\beta 1(\text{DO3}) \leftrightarrow \beta 1'(18\text{R})$ в монокристалле CuAlNi

Кристаллографический ресурс обратимой деформации СПФ в приближении монокристалла определяется максимальной деформацией кристаллической решетки при термоупругом мартенситном превращении.

Теоретически его можно рассчитать благодаря компонентам тензора деформации Грина-Лагранжа, полученного в параграфе 3.1.

Итак, для того, чтобы определить ресурс, необходимо найти главные значения удлинений, которые вычисляются следующим образом:

$$E^{\Gamma L}_1 = \sqrt{1 + 2\lambda_1} - 1$$

$$E^{\Gamma L}_2 = \sqrt{1 + 2\lambda_2} - 1$$

$$E^{\Gamma L}_3 = \sqrt{1 + 2\lambda_3} - 1,$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ - собственные числа матрицы, отвечающей тензору деформации Грина-Лагранжа [17].

Найдем собственные числа матрицы деформаций:

$$\begin{aligned} \text{Det}(D) &= \begin{vmatrix} 0,0039 - \lambda & -0,0594 & 0 \\ -0,0594 & 0,1149 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -0,0932 - \lambda \end{vmatrix} = \\ &= -\lambda^3 + 0.0256 \lambda^2 + 0.0141\lambda + 0.00026 \end{aligned}$$

Решив кубическое уравнение, получаем, что

$$\lambda_1 = -0.0946, \quad \lambda_2 = 0.1398, \quad \lambda_3 = -0.0196$$

Следовательно,

$$E^{\Gamma L}_1 = -0.0996 \ (\approx -10\%)$$

$$E^{\Gamma L}_2 = 0.13 \ (13\%)$$

$$E^{\Gamma L}_3 = -0.0198 \ (\approx -2\%)$$

Таким образом кристаллографический ресурс на растяжении равен 13%, на сжатие - -10%.

3.3 Учет анизотропии упругих постоянных при построении микроструктурной модели.

При моделировании функционально-механического поведения сплавов с памятью формы важно знать упругие константы обеих фаз (аустенитной и мартенситной), поскольку они отражают фундаментальные термодинамические свойства и участвуют в законе Гука. В частности, говоря

об упругих свойствах кубических высокотемпературных фаз в сплавах с памятью формы, эти константы относительно хорошо известны.

Рассматриваемый в данной работе сплав на основе Cu, а точнее его аустенитная фаза β_1 , известна своей большой упругой анизотропией, а вот что касается мартенситной фазы, все немного сложнее. К сожалению, существуют только очень ограниченные экспериментальные данные для упругих свойств низкотемпературной мартенситной фазы. Это связано в основном с тем, что возникают экспериментальные трудности с подготовкой большого количества монокристаллов низкой симметрии мартенситных фаз, которые необходимы для ультразвуковых экспериментальных методов, обычно используемых для оценки упругости констант. Одним из методов определения констант является оптимизированный подход к импульсному эхо-перекрытию акустического метода, которым и были найдены упругие константы аустенита [5], используемые в данной работе.

Оценка упругих констант происходит с помощью ультразвукового импульсного метода, основанного на измерении скорости распространения квазипродольных и квазипоперечных акустических волн в общих направлениях кристалла.

Чтобы точно оценить упругие константы анизотропных материалов (как, например, CuAlNi в настоящей работе) традиционным импульсным ультразвуковым методом, монокристаллические образцы должны разрезаться вдоль конкретных направлений кристалла с высокой точностью. Для кубических кристаллов три независимых константы упругости C_{11} , C_{12} , C_{44} удобно оценить с помощью акустических скоростей, измеренных в $[1\ 0\ 0]$ и $[1\ 1\ 0]$ направлениях). В случае более низких структур симметрии нужно производить больше измерений на нескольких образцах, чтобы оценить все независимые упругие постоянные [5].

3.4 Общий вид тензоров упругих констант и податливостей для рассматриваемого превращения $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$.

При моделировании термоупругого превращения расчет полной деформации происходит по формулам, представленным в параграфе 1.5, в которых необходимо рассматривать каждое состояние, в котором находится материал, т.е. исходное аустенитное, промежуточное – двухфазное состояние и итоговое мартенситное. Это учитывается в формуле для «смеси» (1). Таким образом, необходимо знать упругие константы как для аустенита, так и для мартенсита.

Для начала рассмотрим исходное состояние - аустенит, обладающее сильной анизотропией упругих свойств, которая, в свою очередь, отражается при задании тензоров модулей упругости C_{ijkl} (или модулей упругих податливостей S_{ijkl}). За счет того, что исходная высокотемпературная фаза представлена кубической решеткой, она содержит в себе много плоскостей и осей симметрии, а значит констант в записи тензора остается всего 9, различными из которых являются только 3, что упрощает задачу. Также при высокой температуре сложности в получении и выращивании монокристалла нет, во многих уже имеющихся работах с помощью различных методов оценки упругих констант были произведены подсчеты для сплавов на основе меди и разным содержанием алюминия и никеля. Так, в настоящей работе, опираясь на данные литературы [5] для сплава Cu-14wt.%Al-4.1 wt.%Ni, тензоры выглядят следующим образом:

$$[C_{\text{anizA}}] = \begin{bmatrix} 143.1 & 124.3 & 124.3 & 0 & 0 & 0 \\ 124.3 & 143.1 & 124.3 & 0 & 0 & 0 \\ 124.3 & 124.3 & 143.1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 94.1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 94.1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 94.1 \end{bmatrix}$$

$$[S_{\text{anizA}}] = \begin{bmatrix} 0.0363 & -0.0169 & -0.0169 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0169 & 0.0363 & -0.0169 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0169 & -0.0169 & 0.0363 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0106 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0106 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0106 \end{bmatrix}$$

Что касается упругих констант для мартенситной фазы, то вообще говоря, при превращении происходит образование 12 вариантов мартенсита. В настоящей работе в связи с недостатком экспериментальных данных об упругих константах в литературе, было принято решение ввести в рассмотрение следующее предположение: пусть весь образовавшийся мартенсит считается изотропным. С учетом такой гипотезы, моделирование немного упрощается. Матрица упругих постоянных может быть получена на

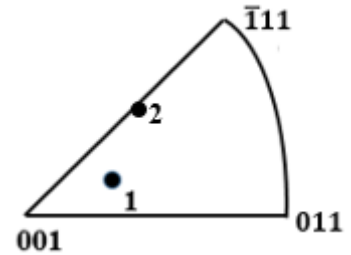


Рис.13 Стереографический треугольник для фазы β_1
 1 - 26° , 6, 22 ,
 2 - 45° , 14, 22

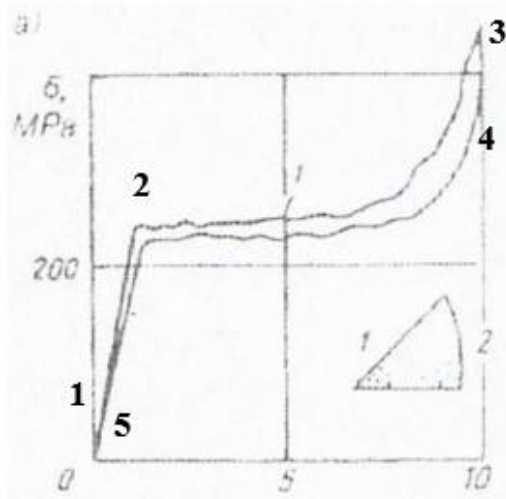


Рис.11 Кривая растяжения для монокристалла CuAlNi [11]

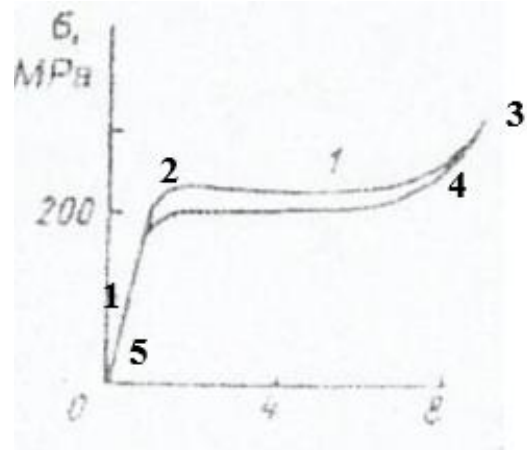


Рис.12 Кривая растяжения для монокристалла CuAlNi при $T=293\text{K}$ [11]

основе анализа данных, приведенных в справочнике для сплавов с памятью формы CuAlNi [11]. Так, благодаря графику на рис.(11) с помощью оцифровки данных и закона Гука для изотропных сред ($\sigma = E\epsilon$) можно определить значение модуля Юнга для конечного участка превращения 3-4,

который и отображает ситуацию, когда прямое превращение завершилось, и весь объем заполнился мартенситом. Значения напряжений и соответствующих им деформаций, а также значение модуля Юнга приведены в таблице 1.

Аналогично можно поступить с еще одним экспериментальным графиком из справочника для сплава CuAlNi (рис.12). Результаты приведены в таблице 2.

Далее для получения результатов, хорошо согласующихся с уже имеющимися в работе Н. Horikawa для сплава Cu-14Al-4Ni, были рассмотрены графики зависимости напряжения от деформации для следующих ориентаций: 45°, 14, 22 и 26°, 6, 22 на стереографическом треугольнике (рис. 13). Результаты приведены в таблице 3.

σ, МПа	357	364	377	390
ε, %	9.93	9.97	10	10.04
$E = \frac{390-357}{10.04-9.93} 100\% = 30000 \text{ МПа} = 30 \text{ ГПа}$				

Таблица 1

σ, МПа	313.6	306.1	297.5	288.6
ε, %	8.9	8.8	8.7	8.6
$E = \frac{313.6-288.6}{8.9-8.6} 100\% = 8333 \text{ МПа} = 8.3 \text{ ГПа}$				

Таблица 2

Ориентация 45°, 14, 22	σ, МПа	314	221,4	211
	ε, %	6.3	6	5.86
	$E = \frac{314-211}{6.3-5.86} 100\% = 23000 \text{ МПа} = 23 \text{ ГПа}$			
Ориентация 45°, 14, 22	σ, МПа	238	192.5	162
	ε, %	9.3	9.2	9
	$E = \frac{238-162}{9.3-9} 100\% = 25000 \text{ МПа} = 25 \text{ ГПа}$			

Таблица 3

На основе полученных значений модуля Юнга, построим матрицы упругих констант. При этом для построения матриц для изотропной среды (параграф 1.6) необходимо знать еще коэффициент Пуассона. В данной работе будем считать $\nu = 0,33$. Тогда по (4) следует:

В 1-м случае (для рис.11): $\lambda = 17,3 \text{ МПа}$, $\mu = 11,5 \text{ МПа}$,

во 2-м случае (для рис.12): $\lambda = 4,79 \text{ МПа}$, $\mu = 3,19 \text{ МПа}$,

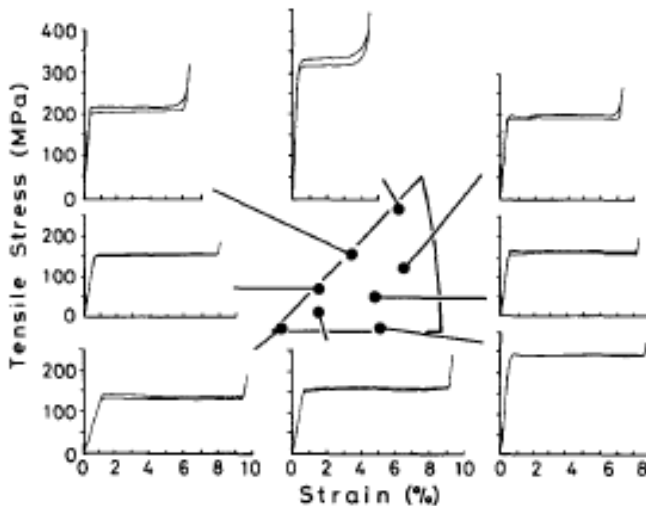


Рис.13 Ориентационная зависимость σ - ϵ кривых для превращения $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ [7]

В случае 3 можно заметить, что наклон части кривой, относящейся к уже мартенситной фазе практически одинаковый для всех ориентаций (рис.13), следовательно, можно считать, что и в работе Н. Horikawa [7] мартенсит является изотропным.

Тогда можно взять среднее значение модуля Юнга, равное 24 ГПа.

Таким образом, матрицы упругих постоянных и податливостей (в ГПа) для мартенситной фазы выглядят следующим образом:

$$\text{В 1-м случае: } [C_{\text{анизM}}] = \begin{bmatrix} 40.3 & 17.3 & 17.3 & 0 & 0 & 0 \\ 17.3 & 40.3 & 17.3 & 0 & 0 & 0 \\ 17.3 & 17.3 & 40.3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 11.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 11.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11.5 \end{bmatrix}$$

$$[S_{\text{анизM}}] = \begin{bmatrix} 0.0334 & -0.01 & -0.01 & 0 & 0 & 0 \\ -0.01 & 0.0334 & -0.01 & 0 & 0 & 0 \\ -0.01 & -0.01 & 0.0334 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.087 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.087 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.087 \end{bmatrix}$$

$$\text{Во 2-м случае: } [C_{\text{анизM}}] = \begin{bmatrix} 11.17 & 3.19 & 3.19 & 0 & 0 & 0 \\ 3.19 & 11.17 & 3.19 & 0 & 0 & 0 \\ 3.19 & 3.19 & 11.17 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4.79 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4.79 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4.79 \end{bmatrix}$$

$$[S_{\text{анизM}}] = \begin{bmatrix} 0.1025 & -0.0228 & -0.0228 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0228 & 0.1025 & -0.0228 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0228 & -0.0228 & 0.1025 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2088 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2088 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2088 \end{bmatrix}$$

$$\text{В 3-м случае: } [C_{\text{анизM}}] = \begin{bmatrix} 32.3 & 13.9 & 13.9 & 0 & 0 & 0 \\ 13.9 & 32.3 & 13.9 & 0 & 0 & 0 \\ 13.9 & 13.9 & 32.3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9.2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9.2 \end{bmatrix}$$

$$[S_{\text{анизM}}] = \begin{bmatrix} 0.0418 & -0.0126 & -0.0126 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0126 & 0.0418 & -0.0126 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0126 & -0.0126 & 0.0418 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1087 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.1087 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.1087 \end{bmatrix}$$

3.5 Результаты моделирования эффекта псевдоупругости. Сравнение с данными Н. Horikawa.

На основе законов и предположений, сделанных выше, в работе было произведено непосредственно моделирование эффекта псевдоупругости для сплава на основе CuAlNi.

Для проверки работы построенной модели был выбран монокристалл Cu-14wt.%Al-4.1 wt.%Ni, выращенный по методу Бриджмена, для которого уже известны компоненты тензора упругих постоянных и податливостей (матрицы приведены в параграфе 3.5).

В качестве матрицы деформации решетки, которая является параметром модели, была выбрана матрица, полученная в параграфе 3.1.

$$D = \begin{pmatrix} 0,0039 & -0,0594 & 0 \\ -0,0594 & 0,1149 & 0 \\ 0 & 0 & -0,0932 \end{pmatrix}$$

Эксперимент проводился при следующих температурах превращения:

$$M_f = 239 \text{ К}; M_s = 242 \text{ К}; A_s = 245 \text{ К}; A_f = 250 \text{ К};$$

При этом скрытая теплота превращения q была выбрана равной -10 МДж/м^3 , а температура проведения эксперимента $T = 296 \text{ К}$.

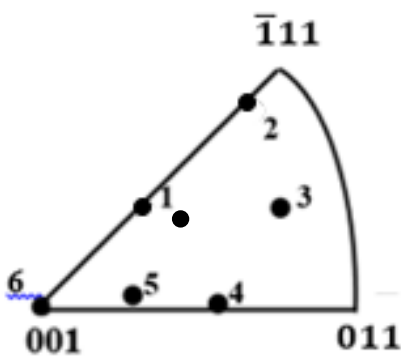


Рис.14 Стереографический треугольник для фазы β_1

- 1 - 45° ; 8, 22 ,
- 2 - 45° ; 23, 22,
- 3 - 27° ; 19, 22 ,
- 4 - 0° ; 14, 22,
- 5 - 2° ; 7, 22 ,
- 6 - 27° ; 0, 22

Основываясь на результатах в статье [7] о зависимости σ - ϵ кривых от ориентации исходной фазы, в настоящей работе были проведены аналогичные эксперименты для различных ориентаций монокристалла CuAlNi, представленных на стереографическом треугольнике (рис.14). К каждой из них была применена настоящая модель, т.е. реализовывался эффект псевдоупругости.

По результатам проведенного эксперимента, основанного на построенной модели, на σ - ϵ диаграммах (рис.15) можно наблюдать следующее:

1. Для всех ориентаций, т.е для всех превращений наблюдается узкий гистерезис, который характерен для сплавов на основе меди;

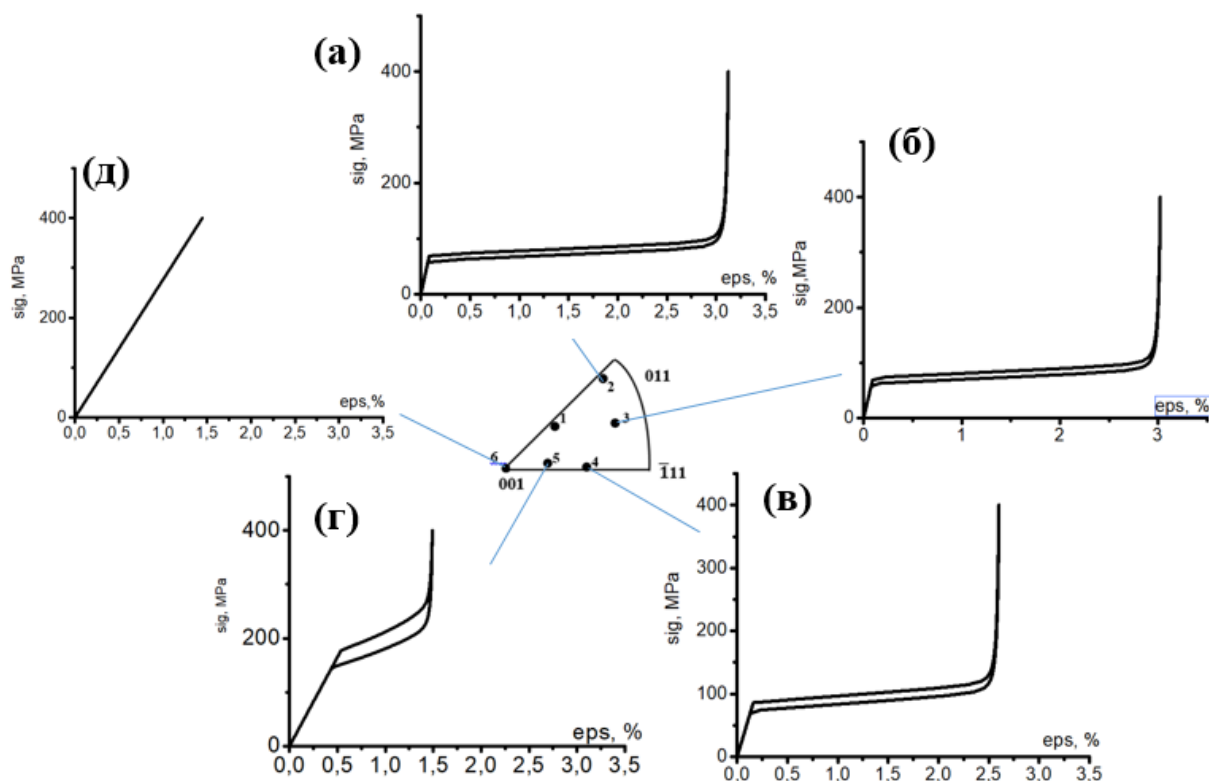


Рис.15 Ориентационная зависимость σ - ϵ кривых в аустенитной фазе для превращения $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ в сплаве CuAlNi, полученная в результате эксперимента.

(а) 45° , 23, 22 (б) 27° , 19, 22 (в) 0° , 14, 22 (г) 2° , 7, 22 (д) 27° , 1, 22

2. В зависимости от ориентации рассматриваемого монокристалла наблюдается различие в наклоне упругого участка кривых. (Аналогичный результат можно увидеть и на диаграммах, приведенных в работах *Н. Horikawa* (рис. 13)). При этом чем ближе точки, отображающие ориентацию монокристалла, находятся к углу стереографического треугольника, тем угол отклонения упругой части кривой к оси деформаций меньше, а соответственно нормальное значение модуля уменьшается (см.рис. 15). Так, на рис.15(д) значение тангенса угла наклона равно 27.65 ГПа, а на рис. 15(а) – 80.4 ГПа.

3. Для ориентации б на рис.14 не происходит фазового превращения, т.е. на σ - ϵ диаграмме мы наблюдаем только прямолинейный участок. Таким образом, эту точку можно считать особой.

4. Появляется необычное явление: для ориентаций, близких к углу стереографического треугольника, при увеличении напряжения от 400 МПа до 800 МПа наблюдается следующее (рис.16) :

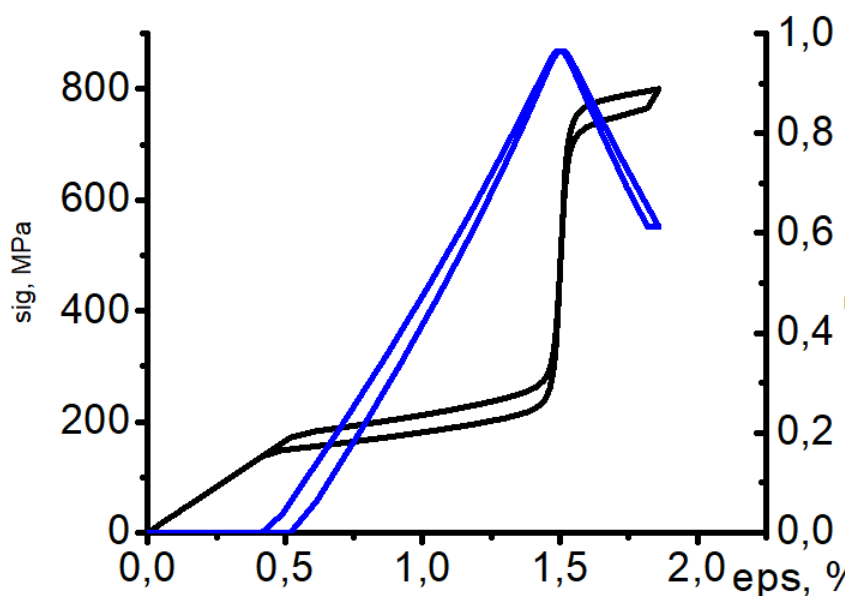


Рис.16 Диаграмма для ориентации (α) 2°, 7, 22 при нагружении до 800 МПа

В данном случае обратное мартенситное превращение происходит раньше, чем на рис.16. А именно: начиная с напряжения 130 МПа начинается прямое превращение, оно длится до тех пор, пока значение напряжения не стало равным 491 МПа. По окончании этого превращения фаза практически достигла значения 1, т.е. материал заполнил мартенсит, после чего, ожидалось, что обратное превращение наступит только при разгрузке. Но процесс происходит иначе: напряжения продолжают возрастать до 800 МПа, следовательно, деформация увеличивается, а вот значение фазы начинает уменьшаться. Тем самым, в той точке, где напряжения оказались равными 640 МПа, наблюдается начало обратного превращения.

Проводя анализ полученных экспериментальных данных на σ - ϵ диаграммах, можно заметить, что максимальная деформация на графиках не превышает рассчитанного в параграфе 3.2 кристаллографического ресурса на растяжение, составляющего 13%. Так, наибольшее значение деформации достигается на графике (а) рис.15 и составляет 3,1 %.

Все наблюдения выше подтверждают, что построенная модель не противоречит известным фактам о сплавах на основе CuAlNi, отображенным в некоторых источниках, а данные эксперимента качественно совпадают с данными из уже имеющейся литературы.

3.6 Учет зависимости упругих констант аустенитной фазы от температуры проведения эксперимента

На основе исследований, проведенных в работе [18], было выявлено, что упругие константы изменяются в зависимости от температуры проведения эксперимента. Таким образом, можно провести эксперимент, основанный на этих данных. Для этого необходимо пересчитать матрицы упругих постоянных для рассматриваемых температур проведения эксперимента и построить σ - ε диаграммы, чтобы провести сравнение.

В данной работе будем проводить эксперименты при следующих температурах:

- 1) $T=296$ К
- 2) $T=348$ К

Тогда, по графику, приведенному на рис.18 [18] находим значения констант C_L , C' и C_{44} , которые связаны с C_{11} , C_{12} и C_{44} следующим образом:

$$\frac{C_{11} - C_{12}}{2} = C'$$

$$\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2} = C_L$$

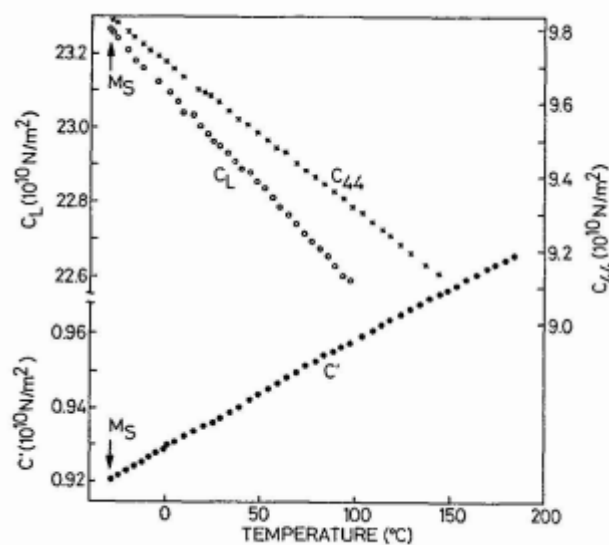


Рис.18 Упругие константы C_L , C' и C_{44} для монокристалла Cu-14 wt. % Al-1 wt. % Ni. [18]

(*)

В случае 1) после решения системы (*) с учетом перевода Кельвин в градусы получаем следующий результат:

$$C_{11} = 14.43 \cdot 10^{10} \text{Па} = 143 \text{ ГПа}$$

$$C_{12} = 12.53 \cdot 10^{10} \text{Па} = 125.3 \text{ ГПа}$$

$$C_{44} = 9.4 \cdot 10^{10} \text{Па} = 94 \text{ ГПа}$$

В случае 2) :

$$C_{11} = 14.295 \cdot 10^{10} \text{Па} = 142.5 \text{ ГПа}$$

$$C_{12} = 12.425 \cdot 10^{10} \text{Па} = 124.25 \text{ ГПа}$$

$$C_{44} = 9.64 \cdot 10^{10} \text{Па} = 96.4 \text{ ГПа}$$

Для расчетов были выбраны значения температур, соответствующие экспериментальным данным, приведенным в работе [18]

$$M_f = 263 \text{ К}; M_s = 266 \text{ К}; A_s = 269 \text{ К}; A_f = 274 \text{ К};$$

В связи с этим изменится зависимость деформации от напряжения (рис.19 (а) и (б)):

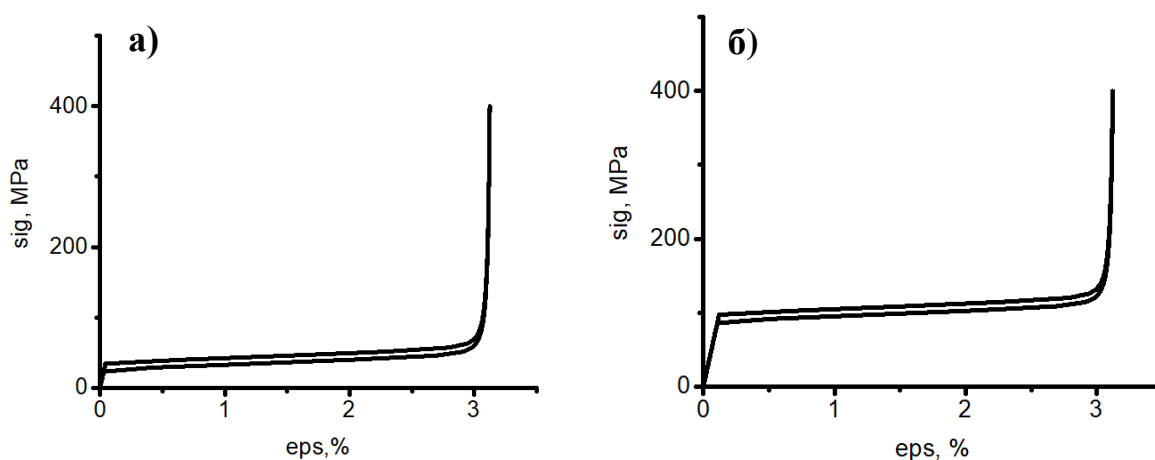


Рис.19 σ - ε диаграммы в зависимости от температуры проведения эксперимента для ориентации 45° , 23, 22 (а) $T=296\text{К}$ (б) $T=348\text{К}$

Сравнивая полученные графики, можно увидеть, что с повышением температуры проведения эксперимента происходит увеличение предела текучести, и убедиться в том, что настоящая модель не противоречит известным фактам. А также в связи с изменением матриц упругих констант происходит небольшое изменение угла наклона упругого участка.

Заключение.

По результатам работы можно сделать следующие выводы:

1. Построенная ранее микроструктурная модель описывала различные эффекты и функциональные свойства сплавов с памятью формы, но только для изотропных материалов. В данной работе показано, что в уже разработанную ранее микроструктурную модель можно ввести возможность учета анизотропии упругих постоянных, тем самым расширив класс рассматриваемых материалов.
2. Выполнено моделирование эффекта псевдоупругости в монокристалле на основе CuAlNi различных ориентаций с введенным предположением об изотропности мартенситной фазы при превращении.
3. Проведена серия экспериментов реализации эффекта псевдоупругости для различных ориентаций монокристалла CuAlNi. Исследование полученных данных показало, что угол наклона упругого участка на $\sigma - \epsilon$ диаграммах различен для монокристаллов различных ориентаций. В результате выявлено, что угол отклонения упругой части кривой к оси деформаций уменьшается при приближении к углу стереографического треугольника. Таким образом, в зависимости от ориентации монокристалла наблюдается изменение тангенса угла наклона от 27.65 ГПа до 80.4 ГПа.
4. Произведен подбор параметров, необходимых для построения микроструктурной модели, благодаря которым появилась возможность проверки полученных экспериментальных данных с уже имеющимися в литературе. Было выявлено, что результаты моделирования находятся в хорошем соответствии с имеющимися экспериментальными данными.
5. На основе данных литературы о зависимости упругих констант от температуры проведения эксперимента выполнено моделирование упругого поведения для нескольких температур в изотропном монокристалле различных ориентаций.

Результаты работы доложены на Двенадцатой студенческой конференции-конкурсе «ХИМИЯ, ФИЗИКА И МЕХАНИКА МАТЕРИАЛОВ».

Двенадцатая студенческая конференция-конкурс «ХИМИЯ, ФИЗИКА И МЕХАНИКА МАТЕРИАЛОВ», 8 дек. 2017г., Санкт-Петербург. Сборник тезисов. - СПб.: СОЛО, 2017. –55-56 с.

Список литературы:

- [1] Ооцука К., Симидзу К., Судзуки Ю. и др. Сплавы с эффектом памяти формы. Под ред. Фунакубо Х.: пер. с японского. – М.: Металлургия, 1990. – 224 с.
- [2] Лихачев В. А., Кузьмин С. Л., Каменцева З. П. Эффект памяти формы. Л.: Издательство Ленинградского университета, 1987. – 216 с.
- [3] А.Е.Волков//Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях»
- [4] M.E.Evard, A.E.Volkov, K.V.Red'kina// Modeling of functional properties of CuAlNi shape memory alloy
- [5]P.Sedlak, H.Seiner, M.Landa, V.Novak, P.Sittner, L1.Manosa// Elastic constants of bcc austenite and 2H orthjrombic martensite in CuAlNi shape memory alloy
- [6] Волков А.Е., Евард М.Е., Редькина К.В.//Тезисные доклады54 международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Россия, Екатеринбург, 11-15 ноября 2013), Екатеринбург. 2013, 164 с.
- [7] H.Horikawa, S.Ichinose, K. Morri, S.Miyazaki and K.Otsuka, Orientation dependence of stress-induced martensitic transformation in CuAlNi alloy, 1988
- [8] Курдюмов Г. В., Явления закалки и отпуска стали, М., 1960; Физическое металловедение, под редакцией Р. Кана, выпуск 2, М., 1968; Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения. Сборник статей, М., 1972.
- [9] Пушин В.Г., Прокошкин С.Д., Валиев Р.З. и др. Сплавы никелида титана с памятью формы. Ч.1. Структура, фазовые превращения и свойства. // Под ред. В.Г. Пушина. – Екатеринбург: Уро РАН, 2006. – 439 с.
- [10] М. Х. Рабинович, О. А. Кайбышев, В. Г. Трифионов. Уфимский авиационный институт им. Орджоникидзе. ISSN 0026-0819. «Металловедение и термическая обработка металлов», № 3. 1978 г.
- [11] В. Г. Шипша Металлы и сплавы. Справочник, 2005

- [12] Тихонов А. С., Герасимов А. П., Прохорова И. И.// Применение эффекта памяти формы в современном машиностроении, Москва: Машиностроение, 1981. — 80 с.
- [13] Зборщик, А. М.// Конспект лекций по дисциплине «Новые материалы в металлургии» – Донецк: ГВУЗ «ДонНТУ», 2008
- [14] Brailovski V., Prokoshkin S., Terriault P., Trochu F.// Shape memory alloys: Fundamental, Modeling and Applications - Quebec: Ecole de Technologie Supérieure, 2003
- [15] H. Funakubo (Ed.) // Shape memory alloys, 1987
- [16] Дж. Мейз. Теория и задачи механики сплошных сред. Издательство МИР, Москва, 1974.
- [17] А.И. Кошелев, М.А. Нарбут// Механика деформируемого твердого тела, Санкт-Петербург – 2002
- [18] G. Hausch, E. Török// Influence of the thermoelastic martensitic transformation and anelastic properties of β_1 -CuAlNi alloys, 1981