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

Игнатова Анна Дмитриевна

Моделирование функционально-механического поведения сплавов с памятью формы на основе FeMn

Бакалаврская работа

Научный руководитель: доцент, канд.ф.-м.н. Евард Маргарита Евгеньевна

Рецензент: профессор, д.ф.-м.н. Пронина Юлия Григорьевна

Санкт-Петербург

SAINT-PERSBURG STATE UNIVERSITY

Mechanics and mathematical modelling

Deformable body mechanics

Anna Dmitrievna Ignatova

Modelling functional and mechanical behavior of FeMn-based shape memory alloys

Bachelor's Thesis

Scientific supervisor: Assoc. Prof., Cand. Sci. (Phys.-Math.) Margarita E. Evard

Reviewer: Prof., Dr. Sci. (Phys.-Math.) Julia G. Pronina

Saint-Petersburg

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.	
Глава 1. О	бзор литературы б
1.1.	Сплавы с памятью формы, их свойства и применение 6
1.2.	Мартенситные превращения в TiNi и FeMn 8
1.3.	Недостатки сплавов на основе FeMn и способы борьбы с ними 12
1.4.	Модели для описания поведения СПФ 16
1.5.	Микроструктурные модели В.А. Лихачева - В.Г. Малинина и А.Е.
	Волкова 19
1.6.	Обратимые и необратимые дефекты кристаллической решетки 22
Глава 2. М	Іоделирование поведения FeMn сплавов 25
2.1.	Цель работы 25
2.2.	Описание микроструктурной модели для FeMn 26
	2.2.1. Модель представительного объема материала с МП 26
	2.2.2. Описание кинетики МП 29
	2.2.3. Накопление дефектов в процессе аккомодации мартенсита
	и условия микропластического течения
2.3.	Схема расчета
Глава З. М	Іоделирование функционально-механического поведения сплава
Fe	Mn: расчеты и анализ результатов 35
Заключени	1e
Список ли	тературы 44

Введение

В 50-х годах был открыт новый вид сплавов – сплавы с памятью формы (СПФ). Разнообразие функциональных свойств СПФ позволяют решать многочисленные материаловедческие и инженерные задачи. Именно поэтому материалы этого класса находят широко применение в различных областях медицины и техники как элементы силовых и исполнительных механизмов, в самосооружающихся при изменении температуры конструкциях, при соединении труб, для гашения вибраций и т.д. [1]

В конце XX века уже более 20 материалов были причислены к СП Φ , а на сегодняшний день известно уже около 120. Возможность практического применения этих сплавов появилась только тогда, когда этот эффект был обнаружен в сплаве TiNi. Этот сплав, наряду с функциональными свойствами (память формы, псевдоупругость, обратимая память формы, способность генерировать реактивные напряжения), обладает достаточной прочностью, пластичностью и коррозионной стойкостью. Позже эффект памяти формы был обнаружен во многих материалах. При этом было установлено, что, кроме сплавов на основе TiNi и на основе меди (CuAlNi, CuAlMn, CuAlBe и др.), наиболее перспективными для практических приложений являются сплавы FeMn с содержанием марганца около 17%. Эти сплавы обладают памятью формы, хорошо поддаются механической обработке (в отличие от TiNi и сплавов на его основе), а присущий им широкий гистерезис превращения может быть полезен в специальных приложениях, требующих стабильности в большом интервале температур. Немаловажную роль играет и тот факт, что стоимость сплавов на основе железа и марганца существенно ниже стоимости сплавов TiNi. Вопросы экономии выходят на первый план, когда речь идет о массовом производстве или об изготовлении массивных изделий. таких. например, как демпферы И изоляторы вибрации, используемые для защиты зданий и сооружений от землетрясений.

Память формы и другие функциональные свойства сплавов FeMn были хорошо изучены к концу 20-го века. С переходом от лабораторных исследований к практическому применению возник ряд проблем, связанных, в первую очередь, с низким коэффициентом возврата деформации и низкой коррозионной стойкостью. В 1982 году А. Сато был открыт эффект памяти формы в сплавах Fe-Mn-Si [2]. Было показано, что увеличение доли кремния приводит к росту возвращаемой деформации. Разработка новых способов легирования сплава и его термомеханической обработки позволила существенно улучшить функциональные и механические характеристики сплава, а также повысить его коррозионную стойкость. Это привело к повышению интереса к данным сплавам.

К настоящему времени имеется множество экспериментальных результатов, касающихся сплавов на основе FeMn, но модели, полностью описывающей прогнозирующей механическое И ИХ поведение при превращении, существует. Поэтому мартенситном не моделирование функциональных свойств сплавов типа FeMn является актуальной темой исследования.

Глава 1. Обзор литературы

1.1. Сплавы с памятью формы, их свойства и применение

В начале пятидесятых годов прошлого столетия Г. В. Курдюмовым и Л.Г. были обнаружены необычные Хандросом физико-механические свойства сплава CuAl. Фазовые переходы, в которых наблюдалось обратимое изменение размеров кристаллов новой фазы при изменении температуры или напряжения, назвали термоупругими мартенситными превращениями. Дальнейшее изучение этих материалов показало, что с мартенситными превращениями связаны уникальные механические свойства, которые расширить границы применения металлов, впоследствии позволили названные сплавами с памятью формы. Отличительная особенность СПФ – это способность восстанавливать при изотермической разгрузке или во время нагрева значительные неупругие деформации.

У СПФ принято выделять несколько основных функциональных свойств: эффект памяти формы (ЭПФ), обратимая память формы, пластичность превращения, псевдоупругость или сверхупругость.

ЭПФ заключается в способности материала при изменении температуры (без нагрузки) полностью либо частично возвращать предварительно накопленные неупругие деформации (рис.1, кривая 1).



Эффект обратимой формы памяти Рис.1. Эффект памяти формы (1) и 2) (рис.1, кривая при обратимой памяти формы (2) термоциклировании может быть Материал, неоднократно воспроизведен. которому была задана значительная пластическая деформация, может самопроизвольно деформироваться при термоциклировании в интервале температур

мартенситных превращений. Причиной этого эффекта является возникновение в материале во время предварительного деформирования больших внутренних полей напряжений, которые полностью не исчезают при нагревании.

Эффект пластичности превращения (ЭПП) заключается способности В материала накапливать деформацию, даже при весьма малых напряжениях, BO время прохождения мартенситного превращения, которое сопровождается резким сопротивления снижением пластическому деформированию. На рис.2 показана зависимость деформации температуры, ОТ характерная для ЭПП.



Рис.2. Эффект пластичности превращения при постоянном напряжении

 Сверхупругость обусловлена способностью материала при разгрузке в изотермических условиях восстанавливать значительные неупругие деформации. Диапазон обратимых макродеформаций очень широк – от 1% до 30%. На рис.3 показаны характерные зависимости напряжений от деформации обычных сплавов (а) и СПФ (б).

Указанные необычные функционально-механические свойства сплавов с памятью формы позволяют использовать их в различных областях. Разработаны соединительные муфты для трубопроводов (рис.4) и термомеханических соединений, уплотнительные шайбы, штифты и зажимы [3].



Рис.3. Характерные кривые деформирования обычных материалов (a) и сплавов с памятью формы (б)

Огромные перспективы открываются при проектировании и создании мартенситных двигателей. Такие механизмы работают в непрерывном и шаговом режимах. Шаговые двигатели часто используют в медицинских целях при вытяжении костей и спрямления



Рис.4. Соединительные муфты

позвоночника. Также из СПФ изготавливают фильтры для кровозаменителей, зажимы артерий головного мозга, детали протезов, элементы конструкций насосов для искусственных сердец и т.д. [4]

СПФ используют в системах автоматического регулирования расхода и температуры, в силовом оборудовании и самосооружающихся конструкциях, а также в элементах робототехники.

1.2. Мартенситные превращения в TiNi и FeMn

Причиной необычных функциональных свойств СПФ является протекающее в этих металлах мартенситное превращение (МП). МП – это превращение решетки посредством деформации сдвига на основе кооперативного движения атомов.

Высокотемпературную фазу, из которой образуется низкотемпературная, принято называть аустенитом, а низкотемпературную (из которой образуется высокотемпературная) – мартенситом.

Для мартенситного превращения характерны следующие особенности:

- 1) Превращение является бездиффузионным.
- Превращение характеризуется деформацией формы (или поверхностным рельефом) постоянной величины.
- Кристаллы мартенсита имеют поверхность раздела между исходной и мартенситной фазами, которую называют плоскостью габитуса.
- Между решетками исходной и мартенситной фаз существуют определенные ориентационные соотношения.
- 5) В решетке мартенситной фазы всегда существуют дефекты [5].

Для обратимых мартенситных превращений характерна зависимость фазового состава от температуры, изображенная на рис.5. При охлаждении материала из аустенитного состояния мартенсит начинает образовываться при некоторой температуре M_s (температура начала МП). По мере дальнейшего охлаждения его количество увеличивается, пока по достижении температуры M_f (температура конца МП) весь объем не испытает превращение. Ниже температуры М_f термодинамически устойчивой оказывается лишь мартенситная фаза. Аналогично при нагревании мартенсит остается стабильным до температуры начала обратного мартенситного превращения – A_s и полностью превращается в аустенит при температуре конца обратного МП - A_f. Ширина гистерезиса кривых по температурной шкале, т.е. $A_s - M_f$ или $A_f - M_s$, может быть различной для разных материалов и сильно влияет на их механические свойства вблизи температур фазового превращения. Характеристики фазового превращения для

материалов с широким и узким гистерезисами представлены на рис.5а и 56, соответственно. Еще одной характеристической температурой является температура термодинамического равновесия, которая вычисляется по формуле: $T_0 = \frac{M_s + A_f}{2}$ [1].



Рис.5. Фазовые диаграммы для материалов с мартенситными превращениями. Широкий (а) и узкий (б) гистерезисы

При этом характер конкретного МП определяет особенности механического поведения.

Так, для TiNi характерно преобразование упорядоченной ОЦК (рис.6) - объемноцентрированной кубической решетки в моноклинную. Причем,



Рис.6. Фрагмент ОЦК решетки

мартенсит является низкосимметричным и МП не сопровождается перетасовочными движениями атомов. Выше сказанное объясняет тот факт, что обратное мартенситное превращение в TiNi протекает точно назад.

После реализации эффекта памяти формы в TiNi, недовозврат деформаций в некоторых случаях может и не наблюдаться, т.е. память формы совершенна. Такие высокие показатели являются следствием однозначной обратимости МП.

Мартенситные превращения в сплавах на основе FeMn связаны с преобразование гранецентрированной кубической решетки (таковой она является в аустенитном состоянии) в гексагональную плотноупакованную (мартенситное состояние) (ГЦК—ГПУ). На рис.7 представлены фрагменты решеток, имеющих соответствующее строение.



Рис.7. Фрагмент решетки ГЦК (а) и решетки ГПУ (б)

Известно, что ГЦК—ГПУ мартенситное превращение осуществляется путем сдвига вектора $s = a/6 < 11\overline{2} > в$ каждой второй плоскости {111} расстояния между которыми $d_0 = a\sqrt{3}/3$. Из-за тройной симметрии в плоскости сдвига для каждой из четырех плоскостей {111} существует три вектора S. Таким образом, возможных значения сдвига для образца 12 железомарганцевого существует возможных вариантов образования мартенсита.

Дисторсия превращения для ГЦК—ГПУ перехода, осуществляемого в плоскости (111) путем сдвига *a*/6[112], рассматриваемая в кристаллофизическом базисе, определяется так

$$D = \frac{s}{2d_0} \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1\\1\\\frac{1}{2} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} [111] = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1\\1 & 1 & 1\\\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

где $s = |\mathbf{s}|$.

Матрицы дисторсии для остальных вариантов превращения находятся, поворотом тензора D операторами, принадлежащими точечной группе симметрии аустенита, то есть с помощью двадцати четырех матриц вращения куба P_n :

$$D_n = P_n D P_n^{-1}$$
, $n = 1, \dots 24$.

Из-за симметрии тензора D оказывается, что среди D_n имеется всего 12 различных матриц, как это было выше показано путем прямого подсчета числа возможных вариантов образования мартенситных кристаллов [6].

Особенностью СПФ на основе FeMn является то, что при обратном превращении любой из трех сдвигов <1100> восстанавливает исходную ориентацию аустенита, за счёт чего превращение является многовариантным, поэтому коэффициент возврат неупругих деформаций после мартенситного превращения достаточно мал.

1.3. Недостатки сплавов на основе FeMn и способы борьбы с ними

Основными недостатками рассматриваемых сплавов являются низкий коэффициент возврата деформаций, а также низкая коррозионная стойкость.

На данные момент известно несколько способов борьбы с недостатками сплавов, в частности и железомарганцевых.

• Легирование

В разных отраслях применяются разные технологии легирования. В металлургии легирование производится в основном введением в расплав или шихту дополнительных веществ,

улучшающих механические, физические и химические свойства сплава.

ИЛИ

Тренировки
 Тренировкой сплавов называют термоциклический
 термомеханический процесс воздействия.

• Старение

Под старением понимают вылеживание сплава при нормальной комнатной температуре в течение нескольких суток (естественное старение) или выдержку в течение нескольких часов при повышенной температуре (искусственное старение).

• Прокатка

Прокатка – способ обработки металлов давлением. Прокатка делится на два типа: холодная и горячая (в зависимости от температуры обрабатываемого материала). Как и любой другой способ обработки металлов давлением прокатка служит не только для получения нужной формы изделия, но и для формирования у него определенной структуры и свойств.

Свойства железомарганцевых сплавов зависят от процентного соотношения входящих в него элементов, так, при большем содержании марганца можно существенно улучшить эффект памяти форы, но увеличение доли марганца возможно лишь при добавлении в сплав кремния. Авторами книги [7] было установлено, что при составе Fe-Mn-Si с 28 - 33% Mn и 4 - 6% Si как раз и достигается совершенная память формы. Ниже приведена диаграмма, показывающая зависимость ЭПФ от химического состава (рис.8).



Рис.8. Зависимость ЭПФ от процентного содержания Mn (Mn content) и Si (Si content) в сплавах Fe-Mn-Si при комнатной температуре

В работе [8] рассматривается сплав на основе Fe-Mn-Si легированный хромом (Cr) и никелем (Ni). В этот сплав стехиометрическим путем добавляют карбид ванадия (VC), выпадение мелких ориентированных частиц которого наблюдается после горячей прокатки и выдержки в течение от 2 до 5ч. при температурах 600-950 С°

Образцы были изогнуты на угол, соответствующий деформации 4%, при комнатной температуре. На рис.9 показано восстановление формы в зависимости от температуры старения для образцов, состаренных в течение 0.5 и 2ч. при различных температурах. Видно, что восстановление сильно зависит от температуры старения и времени старения. Можно подобрать оптимальный режим предварительной обработки для увеличения возвращаемой деформации.

Как уже было сказано выше, циклические воздействия положительно сказываются на свойствах сплавов. Так, тренировочный процесс, обусловленный незначительными деформациями (около 2.5%), для сплавов,

полученных отжигом при температуре 873К, позволяет получить идеальный ЭПФ уже после 5 циклов (рис.10).



Рис.9. Зависимость восстановления формы (shape recovery) от времени и температуры старения (aging temperature) образцов, подвергнутых деформации 4%

Рис. 10. Влияние количества циклов тренировки (the number times of training) на ЭПФ (SME) для сплава Fe-Mn(32%)-Si(6%)

Экспериментально установлено, что тренировочный процесс влияет на улучшение свойств СПФ. Почему же после тренировочного процесса увеличивается коэффициент возврата деформаций? На этот вопрос нет однозначного ответа. В статье [9] предложена одна из возможных причин такого поведения сплавов. На рис.11 приведены результаты электронномикроскопического исследования сплава Fe-Mn-Si-Cr-Ni, который испытал циклическое нагружение (20100 циклов) под напряжением 700МПа. На снимках хорошо видно, что в исходном состоянии в образце доля мартенсита невелика (по оценкам авторов – 9%), при этом мартенсит сосредоточен, в основном, вдоль границ зерен. После циклического нагружения доля образующегося мартенсита увеличивается до 28%, при этом мартенсит локализован в отдельных зернах, и в каждом таком зерне четко выражена ориентация образовавшегося мартенсита. Такая ориентированная структура имеет больше стимулов для восстановления деформации «точно назад», чем первоначальная неориентированная.



Рис.11. Электронно-микроскопические фотографии образца Fe-Mn-Si-Cr-Ni до (а) и после (б) циклического нагружения

Таким образом, существуют механизмы улучшения функциональных свойств СПФ на основе FeMn, что увеличивает привлекательность этих материалов с точки зрения коммерческого использования.

1.4. Модели для описания поведения СПФ

Расчет деформаций и напряжений, порождаемых мартенситными реакциями, является сложной задачей физики и механики кристаллических тел. Для сплавов с памятью формы не существует однозначной конечной зависимости между деформацией, напряжением и температурой. Обращение к концепции течения предполагает введение более чем одной поверхностей текучести, сильно зависящих от температуры, отказ от выполнения постулата Друкера, использование нетрадиционных параметров упрочнения. Многие исследователи большое внимание уделяют применению общих положений термодинамики, которые, конечно, выполняются и для СПФ. Однако, как это имеет место и для обычных материалов, эти законы, задавая ряд ограничений, не позволяют получить не только конкретный вид, но даже форму определяющих уравнений.

Все существующие модели можно с некоторой долей условности разделить на макроскопические (одноуровневые) и микроскопические (многоуровневые).

В макроскопических теориях (например, [10,12]) устанавливается связь между напряжением, деформацией, температурой, скоростями их изменения, а также внутренними структурными параметрами материала. К достоинствам макромоделей можно отнести относительно небольшой объем вычислений; возможность в простейших случаях получения решений в аналитическом более процедура нахождения виде; легкая материальных констант. Недостатками является низкая предсказательная сила. Верно описываются лишь некоторые режимы воздействия, которые были учтены при построении уравнений. Расхождение с экспериментом могут наблюдаться при расчете сложного напряженного состояния, которое обычно имеет место при нагружении тел сложной формы.

Микроструктурные теории (например, [10, 13, 14]) принимают во внимание многоуровневые деформации. Процессы деформирования рассматриваются на микроскопическом уровне с учетом особенностей симметрии и физических закономерностей элементарных актов деформации. Макроскопическая деформация рассчитывается путем процедуры усреднения микродеформаций отдельных структурных элементов, что позволяет учесть также и реальное строение материала. Достоинствами являются: большая

предсказательная сила описания; возможность сравнительно легкого развития теории при необходимости учёта каких-либо новых механизмов деформации. Недостатки микроскопических теорий: больший объем вычислений; сложность получения аналитических решений; менее ясная процедура определения материальных констант.

Ниже представлены несколько моделей, предложенных для расчета свойств материалов с фазовыми превращениями.

• Модель К. Танаки [10]

Одной из первых теорий, описывающих механическое поведение сплавов при протекании в них мартенситных превращений, является модель Танаки. Будучи сравнительно простой для проведения расчетов, данная теория позволила качественно верно описать основные механические эффекты в сплавах с памятью формы. Эту теорию можно отнести к классу макроскопических. Деформация, связанная с превращением, рассматривается как часть макроскопической деформации. В качестве структурного параметра, характеризующего превращение, выбирается объемная доля мартенсита.

• Модель Ф.Баумгарта, Й.Йорде и Х.-Г.Райсса [11]

Эта модель является одной из первых попыток феноменологического описания деформации и работоспособности СПФ. Был предложен ряд формул, выражающих наиболее важные механические характеристики деформирования Поскольку процесса сплавов. ОДНИМ ИЗ основных применений сплавов с памятью формы является использование их в качестве преобразователей тепловой энергии в работу в приводах различного назначения, то внимание в первую очередь уделено расчету деформации, накапливаемой и возвращаемой телом в рабочем цикле, а также величины полезной механической работы. Вывод основан на использовании законов

термодинамики и выборе конкретной формы зависимости термодинамического потенциала Гиббса от параметров состояния. При этом не вводится каких-либо дополнительных параметров, характеризующих превращение или фазовый состав материала. Особенности его поведения выводятся из специального вида зависимости потенциала Гиббса от напряжения и температуры.

• Модель А. Бертрама [12]

В этой модели механическое поведение СПФ описывается теорией течений с введением второй поверхности текучести. Нововведенная поверхность определяет напряжение «обратного» течения при разгрузке. Основные положения этой теории: скорость деформации аддитивна относительно упругих и неупругих частей; тензор напряжений является экспериментальной функцией деформаций и температуры. Имеются два условия течения (первое относится к состоянию при нагрузке, второе – при разгрузке). В обоих случаях действует ассоциированный закон течения. При надлежащем выборе функций, задающих условия течение, данная модель позволяет описывать основные деформационные явления, сопровождающее MΠ: псевдоупругое поведение, пластическую деформацию, эффект пластичности превращения.

1.5. Микроструктурные модели В.А. Лихачева - В.Г. Малинина и А.Е. Волкова.

Поскольку разработанная нами модель основывается на рассмотренной далее микроструктурной модели А.Е. Волкова, которая в свою очередь базируется на положениях структурно-аналитической теории прочности Лихачева – Малинина, рассмотрим эти модели более подробно.

• Модель В.А. Лихачева - В.Г. Малинина [13]

Поведение материала описывается на двух масштабных уровнях: на нижнем - микроуровне – где деформации и напряжения усреднены по малым объемам кристалла; и на верхнем – макроуровне – где деформации и перемещения получены усреднением уже по большему количеству взаимодействующих микрообластей нижнего уровня. На микроуровне определяющие уравнения формулируются В терминах скоростей микродеформаций. Но рассмотрение тензора скоростей микродеформаций недостаточно для описания макроскопических свойств материала и решения краевых задач механики. Из-за практической невозможности провести пространственное усреднение, его заменяют усреднением по ориентациям и статически распределенным характеристикам материала. Условно кристалл делится на две подобласти: одну, где эффективное напряжение больше приложенного, и другую, где меньше. Предположения о разделении кристалла на области сделано из-за движения дислокаций при пластическом деформировании. Как правило, это движение происходит неоднородно и создаваемая таким образом деформация является несовместной и приводит к образованию внутренних полей напряжений. Это в свою очередь приводит к тому, что приложенное напряжение ослабляется в зоне пластического сдвига и усиливается там, где сдвиг заторможен. Уравнения для микродеформаций и их скоростей задаются через объемную долю п-ого варианта мартенсита, а также дополняют законом, задающим кинетику превращения. В данном случае этот закон формулируется в терминах эффективных температурах. Bce вышесказанные соображения позволяют описать эволюционное уравнение для n-го варианта мартенсита. Так как аустенит и мартенсит имеют разные физические характеристики, то полная деформация зерен считается по правилу смеси.

• Модель А.Е. Волкова [14]

Модель является микроструктурной. Для описания деформаций вводятся понятия размера области и иерархия этих размеров. На каждом из структурных уровней используется аппарат механики сплошной среды. Деформации на разных структурных уровнях, а также наличие связи между ними устанавливаются с помощью операции усреднения. Предполагается, что имеются только три структурных уровня: представительный объем, объем зерна и объем, занятый одной фазой (аустенитом или одним из вариантов мартенсита). При формулировке определяющих уравнений для расчета деформации на микроуровне полная деформация делится на составляющие, соответствующие основным механизма деформирования: упругость, тепловое расширение, фазовое превращение, переориентация мартенсита, пластичность и микропластичность. Микропластичность здесь обозначает пластическую аккомодацию мартенсита. Далее мартенситное превращение рассматривается с точки зрения термодинамики. Вводится потенциал Гиббса для одного зерна, с помощью которого вычисляются термодинамическая сила, стимулирующая рост *n*-го варианта мартенсита, сила трения и сила смешивания. Формулируются условия протекания обратного прямого И мартенситного превращения, задается закон упрочнения.

Сформулированы уравнения и начальные условия для расчета как фазовой, так и микропластической (вызванной аккомодацией мартенсита) деформации тела. Эти соотношения будут рассмотрены позже в главе 2.

Описанные выше модели были апробированы при моделировании функциональных свойств СПФ на основе TiNi или сплавов на медной основе. Ни одна из них не учитывает специфики ГЦК—ГПУ превращения, протекающего в сплавах на основе FeMn.

Попытка такого учета была сделана в работе [15], однако этот поход не получил должного продолжения. В частности, в этой работе не

рассматривались деформационные дефекты, что не позволило использовать ее для прогнозирования циклического поведения железомарганцевых сплавов

1.6. Обратимые и необратимые дефекты кристаллической решетки

При росте мартенситного кристалла ввиду несовместности фазовой деформации возникают внутренние напряжения, вызывающие пластическую аккомодацию мартенсита, которая играет особую роль в формировании свойств сплавов с мартенситными превращениями, являясь процессом релаксации внутренних межфазных напряжений. Аккомодация происходит посредством необратимой пластической (микропластической) деформации в местах концентрации внутренних напряжений, уровень которых и упругая энергия тела снижаются. При этом происходит накопление дефектов, что, в конце концов, вызывает разрушение материала.

Основными дефектами, вызывающими пластическую деформацию и разрушение сплавов являются дислокации — линейные дефекты, для которых размер вдоль какой-либо линии велик ($L/a \gg 1$, где L – размер дефекта, a – межатомное расстояние) [16].

Мерой искажения кристаллической решетки являются вектор и контур Бюргерса. Если в деформированном кристалле провести контур вокруг дислокации, то соответствующий контур в идеальном кристалле окажется разомкнутым. Чтобы замкнуть контур, его нужно дополнить вектором Бюргерса \overline{b} . Предельными типами дислокаций являются краевые и винтовые дислокации. Вектор Бюргерса краевой дислокации перпендикулярен линии дислокации, а винтовой – параллелен. На рис. 12 показаны схемы краевой и винтовой дислокаций, а также вектор Бюргерса им соответствующий.

Линии дислокации могут образовывать замкнутые плоские петли внутри кристалла, которые называются дислокационными петлями. Отдельные участки дислокационной петли имеют чисто краевую или чисто винтовую ориентацию, а большая часть – смешанную ориентацию. Дислокационные петли могут как расширяться, так и сжиматься.



Рис.12. Схематический вид краевой (а) и винтовой (б) дислокаций. *b* - вектор Бюргерса с указанием соответствующих направлений относительно линий дислокации

В рамках микроструктурной модели [17, 18] все деформационные дефекты разделяют на две категории: дефекты, обратимые и необратимые деформацией. Обратимые дефекты можно сопоставить со скоплениями малых дислокационных петель. Такие дефекты создают ориентированные дальнодействующие поля напряжений. Ко вторым относятся неспособные к консервативному движению дефекты, образующиеся двойном при дислокаций, огибании поперечном скольжении ЭТИМИ дефектами препятствий и при их неполной аннигиляции. Создаваемые ими поля напряжений – короткодействующие. Уменьшение плотности дефектов первого сорта происходит вследствие пластической деформации другого знака или при их выходе на поверхность кристалла.

Количество необратимых, или рассеянных, дефектов увеличивается в результате движения обратимых дефектов. Уменьшение же их плотности происходит только за счет процессов «отдыха» при участии диффузионных процессов и, возможно, за счет заметания при движении межфазных границ при обратном мартенситном превращении.

Причиной раскрытия микротрещин является образование достаточно мощных скоплений обратимых деформацией дефектов (дислокаций), создающих ориентированные поля напряжений, а рассеянные дефекты «ослабляют» материал и ускоряют разрушение.

В работах [17, 18] было показано, что учет деформационных дефектов, образующихся результате микропластической (аккомодационной) В деформации позволяет в рамках микроструктурной модели получить хорошее соответствие с экспериментальными данными, а также прогнозировать долговечность сплавов основе TiNi. Учет на деформационных дефектов в сплавах FeMn сделан в настоящей работе.

Глава 2. Моделирование поведения FeMn сплавов

2.1. Цель работы

Основной целью этой работы является разработка модели функционально-механического поведения сплавов с памятью формы на основе FeMn, учитывающей специфику ГЦК—ГПУ превращения, а также накопление деформационных дефектов при микропластической деформации.

Для достижения цели необходимо решить следующие задачи:

- получить определяющие соотношения для описания прямого и обратного мартенситного ГЦК—ГПУ превращения с учетом влияния дефектов на микропластическую деформацию;
- на основе полученных соотношений, скорректировать компьютерную программу, которая описывает поведение FeMn сплавов, и отладить её;
- подобрать материальные константы, на основе имеющихся экспериментальных данных;
- выполнить моделирование эффекта пластичности превращения при охлаждении и нагреве; эффекта памяти формы; эффекта памяти формы после активной деформации; циклического знакопеременного нагружения; термоциклирования под постоянной нагрузкой, а также с разгрузкой при нагреве;
- сравнить результаты моделирования с имеющимися экспериментальными данными.

2.2 Описание микроструктурной модели для FeMn

2.2.1 Модель представительного объема материала с МП

Подобно тому, как это было сделано в работе [14], считали, что неупругое деформирование сплавов с МП осуществляется различными механизмами, которые происходят на нескольких структурных уровнях, имеющих различный характерный размер. На макроскопическом уровне выбирается объем V₀, который является точкой сплошной среды. При микроструктурном описании, чтобы иметь возможность изучать свойства материала на макроуровне, рассматривается более мелкий уровень. В $V_0(x)$ представляющей «макро-точку» области усреднения $x \in V$. выделяются области усреднения первого уровня $V_1^{\alpha}(x), \alpha = 1, 2, ...,$ каждой сопоставляется среднее значение деформации $\varepsilon^{(1)\alpha}(x)$. которых ИЗ гипотезу о возможности пространственного Используя усреднения деформации и схему Райсса "последовательного" соединения объемов, связь характеристиками деформаций между на макро И микроуровнях представляется таким образом:

$$\varepsilon^{(0)}(x) = \sum_{\alpha=1}^{A} \frac{|V_1^{\alpha}(x)|}{|V_0(x)|} \varepsilon^{(1)\alpha}(x), \tag{1}$$

где $|V_0(x)|$ и $|V_1^{\alpha}(x)|$ — объемы соответствующих областей, *А* – множество значений α .

Наличие связи (1) позволяет формулировать определяющие соотношения соответствующих микровеличин, если механизмы деформации на макроуровне известны.

Предполагается, что имеются лишь следующие структурные уровни: представительный объем V_0 , объем зерна V_1 и объем занятый одной фазой V_2 .

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

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

Здесь $\varepsilon^{(2)A}$, $\varepsilon^{(2)M}$ — деформации областей 2-го уровня, занятых аустенитом *n*-вариантом мартенсита; $\frac{1}{N}\Phi_n = \Phi^{(2)}$ — объемная доля областей, занятых *n* вариантом мартенсита; Φ^{gr} — полная объемная доля мартенсита в зерне на первом уровне усреднения, при прямом мартенситном превращении рассчитывается так:

$$\Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \Phi_n \,.$$

Как говорилось ранее в п.1.2, МП в сплавах на основе FeMn являются многовариантными. Используя предложенный в работе [15] подход, разобьем все ориентационные варианты мартенсита Φ_n на 4 зоны, такие, что в каждой из них при обратном превращении аустенит может расти за счёт любого из кристаллов Φ_n относящихся к этой зоне (рис.13). Количество мартенсита в каждой зоне будем характеризовать величиной:

$$\Phi_z^{zon} = \frac{1}{3} \sum_{n=3z-2}^{3z} \Phi_n$$
, $z = 1,2,3,4$,

где z — номер зоны; $(1/z) \Phi_z^{zon}$ — объемная доля мартенсита зоны z. Это рассуждение применимо к каждому зерну аустенита [6].

Переход к макроскопической деформации $\varepsilon^{(0)}$ производится посредством усреднения по всем зернам:

$$\varepsilon^{(0)} = \sum_{i=1}^{N_{gr}} f_i \left[\left(1 - \Phi^{gr}(\omega_i, P_i) \right) \varepsilon^{(2)A}(\omega_i, P_i) + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \Phi_n(\omega_i, P_i) \varepsilon^{(2)Mn}(\omega_i, P_i) \right],$$

где f_i — объемная доля зерен с ориентацией ω_i , P_i — структурный параметр, а N_{gr} — количество зерен.



Рис.13. Структурная иерархия модельного объекта типа FeMn

Стоит отметить, что при использовании формул (2) и (3) необходимо, чтобы тензоры деформаций были выражены в одном базисе, в качестве которого естественно выбрать лабораторный. Пересчет компонент тензора напряжений можно сделать с помощью матрицы поворота $R(\omega)$:

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

Для того чтобы сформулировать определяющие уравнения для расчета на микро-уровне деформации и доли мартенсита, удобно разделить полную деформацию на составляющие, соответствующие основным механизмам деформации, которыми для материалов с мартенситными превращениями являются:

- упругость малые обратимые изменения расстояний между узлами кристаллической решетки (атомами) или кристаллографическими плоскостями под действием приложенных сил;
- тепловое расширение изменение среднего расстояния между атомами вследствие изменения температуры;
- фазовое превращение изменение типа и/или параметров кристаллической решетки;
- микропластичность пластическая деформация, локализованная в местах концентрации напряжений, обусловленных ростом кристаллов мартенсита.

Одной из основных гипотез является предположение о возможности представления полной деформации в виде суммы составляющих деформаций, соответствующих каждому из механизмов:

$$\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(2)e} + \varepsilon^{(2)T} + \varepsilon^{(2)Ph} + \varepsilon^{(2)MP}$$

Верхние индексы "e", "T", "Ph", "MP" обозначают соответственно упругую, тепловую, фазовую и микропластическую деформацию на втором структурном уровне.

2.2.2 Описание кинетики МП

Изложенные ниже предположения основаны на микроструктурной модели [14], о которой говорилось ранее в п. 1.5.

Если рассматривать мартенситное превращение в сплавах с точки зрения термодинамики, то этот процесс является неравновесным. Однако, несмотря на неравновесность превращения в целом, при термоупругих мартенситных превращениях малым однонаправленным изменениям температуры или напряжения соответствуют малые изменения количества мартенсита и его конфигураций. Это обстоятельство позволяет описывать превращения, используя методы равновесной термодинамики, добавив к обычным силам силу трения.

Для двухфазной среды, состоящей из мартенсита и аустенита, термодинамический потенциал Гиббса для одного зерна можно записать в виде

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

где *G^{eig}* — собственный потенциал фаз, *G^{mix}* — энергия их смешивания, *G^A*, *G^{Mn}* — потенциалы аустенита и *n*-го варианта мартенсита.

Термодинамической силой, стимулирующей рост *n*-го варианта мартенсита, является производная:

$$F_n^t = -N \frac{\partial G^{eig}}{\partial \Phi_n} \ . \tag{4}$$

Учитывая соотношение (4), можно получить выражение для термодинамической силы в таком виде:

$$F_n^t = \frac{q_0}{T_0} (T - T_0) + \sigma_{ij} D_{ij}^{(n)} , \qquad (5)$$

где q_0 – скрытая теплота превращения, T_0 – температура равновесия фаз, σ_{ij} – тензор деформаций, а $D_{ij}^{(n)}$ — изотермические коэффициенты податливости при упругой деформации.

Кроме термодинамической силы на протекание превращения по *n*-му варианту влияют также сила трения *F*^{*f*} и сила смешивания

$$F_n^{mix} = -\frac{\partial G^{mix}}{\partial \Phi_n} \ . \tag{6}$$

В состоянии термодинамического равновесия $\partial G/\partial \Phi = 0$ и ввиду определений (3), (4) и (6) $F_n^t = F_n^{mix}$. Из-за наличия силы трения F^{fr} , препятствующей любому движению межфазной границы, превращение происходит при отклонении от равновесия и условие протекания можно записать в виде:

$$F_n^t = F_n^{mix} \pm F^{fr},\tag{7}$$

знак плюс выбирается для прямого, а минус для обратного превращения.

2.2.3. Накопление дефектов в процессе аккомодации мартенсита и условия микропластического течения

Аккомодационные явления в модели [14] вводились несколько иным образом — не были связаны с дефектами. Была введена мера Φ_n^p микропластической деформации, и потенциал смешивания тогда выглядел так:

$$G^{mix} = \sum_{n} (\mu/2) (\Phi_n - \Phi_n^p)^2 , \qquad (8)$$

где *µ* – коэффициент пропорциональности.

В нашей же модели рассмотрим процессы, связанные с аккомодацией мартенсита, аналогично тому, как это было сделано в работе [18].для сплава TiNi. Как говорилось ранее (1.6), дефекты разделены на две категории – обратимые и необратимые деформацией. Обратимые дефекты будем характеризовать их плотностью, заданной вектором \overline{b} , плотность необратимых дефектов — скалярной величиной *f*. Для описания плотностей дефектов были сформулированы следующие эволюционные уравнения:

$$\dot{b_n} = \dot{\varepsilon}_n^{mp} - \frac{|b_n|}{\beta^*} \dot{\varepsilon}_n^{mp} H(b_n \dot{\varepsilon}_n^{mp}), \qquad (9)$$

$$\dot{f} = \sum_{m=1}^{N} |\dot{\varepsilon}_{m}^{mp}| + r_{1}(f - f_{0})\dot{\Phi}_{M}H(-\dot{\Phi}_{M}), \qquad (10)$$

здесь β^* — материальная постоянная, определяющая максимальную плотность *b*-дефектов; H() — функция Хевисайда; $\Phi_M = \sum_{m=1}^{N} \Phi_m$ — общая доля мартенсита в зерне; f_0 — начальное значение плотности рассеянных дефектов; r_1 — материальная постоянная. В уравнении (9) первое слагаемое отвечает за образование новых ориентированных дефектов, а второе за выход их на поверхность тела. В уравнении (10) первое слагаемое является параметром, характеризующим накопленную пластическую деформацию, а второе определяет залечивание некоторого количества рассеянных дефектов при обратном превращении.

Дислокации внутри материала создают внутренние напряжения, создавая несовместную деформацию и изменяя его напряженное состояние. Именно их влияние, а не всей микропластической деформации должно быть учтено потенциалом смешивания. Из вышесказанного следует, что влияние пластической аккомодации на состояние тела можно учесть, вычитая в потенциале смешивания плотность ориентированных дефектов из мер фазовой деформации. В этом случае потенциал смешивания будет иметь вид:

$$G^{mix} = \frac{\mu}{2}(\Phi_n - b_n)^2 = \frac{\mu}{2}\widetilde{\Phi}_n^2$$

где $\widetilde{\Phi}_n = \Phi_n - b_n$.

Тогда выражение для силы смешивание выглядит таким образом:

$$F_n^{mix} = -\mu(\Phi_n - b_n) = -\mu\widetilde{\Phi}_n.$$
(11)

Условия микропластического течения для каждого из вариантов формулируются по аналогии с теорией течения в одномерном случае с изотропным и трансляционным упрочнением, где F_n^p обобщенная сила

$$|F_n^p - F_n^\rho| = F^y, \qquad d|F_n^p| > 0,$$
 (12)

здесь F_n^{ρ} характеризует трансляционное упрочнение, а F^{γ} изотропное.

Уравнения, связывающие параметры упрочнения с плотностями дефектов для простоты были приняты линейными:

$$F_n^
ho = a_
ho b_n$$
 , $F^y = a_y f$,

здесь *a_p* и *a_y* – материальные постоянные, связывающие плотности дефектов с обобщенными силами, характеризующими упрочнения.

2.3. Схема расчета

Считаем, что в начальном состоянии известны σ^0 , T^0 , Φ_n^0 , b_n^0 и f^0 – напряжение, температура, объемная доля мартенсита, плотности обратимых и необратимых дефектов. Зная приращения напряжения $\Delta \sigma$ и температуры ΔT , приращение фазы $\Delta \Phi_n$ находим следующим образом.

Условием протекания мартенситного превращения является наличие достаточной термодинамической силы (уравнение (7)). При этом для прямого превращения $\Delta F_n^t > 0$, а для обратного $\Delta F_n^t < 0$. Прямое превращение может осуществляться до тех пор, пока все зерно не будет занято мартенситом ($\Phi_{gr} \leq 1$), а обратное до тех пор, пока не равна нулю соответствующая зональная фаза ($\Phi_z^{zon} > 0$). Если же ни одно из условий и не выполнено, то мартенситного превращения нет и $\Delta \Phi_n = 0$.

Далее рассматриваем условие микропластического течения (12). При раскрытии модуля получаем два случая: для прямого и обратного МП, соответственно:

$$F_n^p - F_n^\rho > 0$$
, $F_n^p - F_n^\rho < 0$. (13)

Зная ΔF_n^t (формула (4)) и используя выражение (10), можем найти $\Delta \tilde{\Phi}_n$, Δb_n и Δf . При невыполнении условий (13), микропластическая деформация не происходит и приращение обратимых дефектов $\Delta b_n = 0$. После нахождения Δb можем вычислить Δf и $\Delta \Phi_n$, используя равенства (10) и (11), соответственно, а затем по формуле (2) вычислить приращение деформации.

Данный алгоритм был использован в расчетной программе, написанной на языке C++. В следующей главе приведены результаты вычислений.

Глава 3. Моделирование функционально-механического поведения сплава FeMn: расчеты и анализ результатов

Выполнено моделирование функционально-механического поведения FeMn сплава. Константы материала, приведенные в Таблице 1, выбирались таким образом, чтобы описывать поведение СПФ Fe-17,5% Mn, для которого имеются результаты механических испытаний [19, 20, 21].

Материальная константа	Значение
Характеристические температуры M_f , M_s , A_s , A_f	250, 310, 500, 560 K
Скрытая теплота превращения q_0	-75 МДж/м ³
Модуль Юнга для аустенита Е _А	200 ГПа
Модуль Юнга для мартенсита E_M	200 ГПа
Коэффициент Пуассона для аустенита v_A	0.33
Коэффициент Пуассона для мартенсита v_M	0.33
Константа изотропного упрочнения a_y	1.7 МПа
Константа трансляционного упрочнения a_{ρ}	0.85 МПа
Константа ориентированных дефектов β^*	3
Константа разупрочнения для f-дефектов r_1	0.001
Начальная сила микропластического течения $F_0^{\mathcal{Y}}$	3 МПа

Таблица 1. Материальные константы

Рис. 14 иллюстрирует накопление модельным образцом деформации при охлаждении (а) или нагреве (б) через интервал прямого (а) или обратного (б) мартенситного превращения под постоянным напряжением 100 МПа (эффект пластичности превращения). Полученные результаты качественно соответствуют результатам, приведенным в работе [19] (рис.15). Зависимость величины деформации пластичности превращения ε^{nn} от действующего на этапе охлаждения или нагревания напряжения приведена на рис. 16.



Рис.14. Зависимость деформации от температуры при охлаждении (а) и нагреве (б) под постоянной нагрузкой 100 МПа (расчет)







Рис.16. Диаграмма деформирования FeMn образца при охлаждении и нагреве в интервале температур мартенситного превращения (расчет)

В следующем модельном эксперименте исследовали поведение образца при охлаждении под напряжением 100 МПа и последующем нагреве при действующего разных значения напряжения (память формы после реализации эффекта пластичности превращения). Результаты приведены на рисунке 17. При полной разгрузке имеется небольшая остаточная деформация. По мере увеличения напряжения остаточная деформация растет, а при напряжениях 100 МПа и более деформация при нагревании не возвращается, а накапливается. На рис.18 приведены результаты прямых наблюдений [20]. Расчетная кривая нагрева образца в свободном состоянии качественно соответствует эксперименту.



Рис.17. Зависимость деформации от температуры при охлаждении под постоянным напряжением 100МПа и последующем нагреве в свободном состоянии и под напряжениями 50, 100, 200 и 300МПа (расчет)



Рис.18. Эффект памяти формы: 2 — FeMn после кручения на 13,5 % и охлаждения от 475 К до 300 К под напряжением 200 МПа (эксперимент)

Ниже (рис.19) представлены зависимости, характеризующие эффект памяти формы после активной деформации в мартенситном состоянии. С этой целью модельный образец, находящийся в аустенитном состоянии, был температуры ниже температуры конца мартенситного охлажден ЛО превращения – 200К, далее было приложено растягивающее напряжение 300МПа, а после этого произвели полную разгрузку и нагрели образец до температуры 600К. На рисунке 19(а) показана зависимость деформации от напряжения. Неупругая деформация, накапливаемая на участке *BC*, связана с переориентацией мартенсита. При разгрузке наблюдается частичное обратное преобразование, приводящее к возврату деформации (участок DE). Рисунок 19(б) демонстрирует возврат деформации при последующем нагреве — эффект памяти формы. На рис. 19(а) этому возврату соответствует участок *EF.* Рис. 20 демонстрирует экспериментальную зависимость для образцов, подвергнутых деформированию кручением и последующему нагреву [19].



Рис.19. ЭПФ после активной деформации. Зависимость деформации от напряжения (a), от температуры (б) (расчет)



Рис.20. Зависимости деформации от температуры во время нагрева под напряжением 40 МПа после деформирования кручением при 293 К на 25(1), 10(2), 5(3),1(4), -5(6), -10(7) и -25%(8) (эксперимент)

Выполнено моделирование циклического знакопеременного нагружения в изотермических условиях и циклического изменения температуры в полном интервале мартенситных превращений при различных условиях нагружения.

Ha рис.21 показано поведение модельного образца при его нагружении напряжениями -300 МПа и 300 МПа в знакопеременном мартенситном состоянии. Было реализовано 15 циклов нагружения. Упрочнение приводит к сужению петли по деформациям. При этом f-дефектов происходит увеличение плотности рассеянных (рис.22). Стабилизация наступает к 10 циклу.



Рис.21. Диаграмма циклического нагружения напряжениями -300МПа и 300МПа при температуре 200К (расчет)



Рис.22. Зависимость плотности f-дефектов от деформации для знакопеременного нагружения

Результаты моделирования термоциклов под постоянной нагрузкой 100 МПа приведены на рис.23. После реализации эффекта пластичности превращения при последующем нагреве происходит накопление деформации, которая частично возвращается при повторном охлаждении. Стабилизация состояния происходит за 3 цикла. Подобное поведение наблюдали экспериментальных работах [21] (рис.24), И В однако стабилизация петли наступала в 20-30 циклах. Добиться увеличения числа стабилизации можно путем уменьшения коэффициентов циклов ДО упрочнения a_y и a_ρ .Однако при низких коэффициентах упрочнения используемая при расчете схема оказывается нестабильной. В дальнейшем предполагается изменить расчетную схему. Накопление f-дефектов для данного модельного эксперимента показано на рис.25.



Рис.23. Зависимость деформации от температуры при термоциклировании под постоянной нагрузкой 100 МПа при растяжении (расчет)



Рис.24. Зависимость деформации от температуры при термоциклировании под постоянной нагрузкой 50 МПа при кручении (эксперимент)



Рис.25. Накопление f-дефектов в зависимости от температуры для образца при термоциклировании под постоянной нагрузкой 100МПа

Далее исследовали поведение образца при термоциклировании, но охлаждение производилось под напряжением 100 МПа, а нагрев в свободном состоянии. Зависимость деформации от температуры представлена на рис.26, рис.27 показаны зависимости плотностей рассеянных a на (a) и ориентированных (б) дефектов от температуры. Здесь, как и в предыдущем эксперименте, деформационная петля стабилизируется за 3 цикла. Ориентированные дефекты возникают В процессе мартенситного превращения, затем в результате упрочнения их плотность перестает меняться.



Рис.26. Зависимость деформации от температуры при циклическом охлаждении под напряжением 100МПа и нагреве в свободном состоянии (расчет)



Рис.27. Зависимость плотности f-дефектов (a) и b-дефектов (б) от температуры для образца, которые циклически охлаждали под напряжением 100МПа и нагревали в свободном состоянии

Что касается рис.22, 25 и 27, показывающих зависимости плотности fдефектов от температуры или деформации, то они полностью отражают предположения, сделанные ранее (пункт 1.6): происходит накопление рассеянных дефектов от цикла к циклу. Участки, где наблюдается их убывание (рис.21 и рис.23) можно объяснить тем, что существует некоторое разупрочнение, связанное с ненулевым значением константы r_1 в формуле (9).

Заключение

На основе положений апробированного ранее микроструктурного подхода разработана модель функционально-механического поведения сплавов с памятью формы на основе FeMn, учитывающая специфику ГЦК— ГПУ превращения, а также накопление деформационных дефектов при микропластической деформации.

Решены следующие задачи:

- сформулированы определяющие соотношения для описания фазовой и микропластической деформации, а также эволюции дефектов при прямом и обратном мартенситных превращениях.
- на основе полученных соотношений, составлена и отлажена компьютерная программа, для расчета поведения FeMn сплавов.
- подобраны значения материальных констант, на основе имеющихся экспериментальных данных;
- выполнено моделирование эффекта пластичности превращения при охлаждении и нагреве; эффекта памяти формы; эффекта памяти формы после активной деформации; циклического знакопеременного нагружения; термоциклирования под постоянной нагрузкой, а также с разгрузкой при нагреве.

Показано, что результаты моделирование находятся в хорошем качественном соответствии с имеющимися экспериментальными данными.

По результатам работы будет сделан доклад на международной конференции European Conference of Fracture – ECF21 (20-24 июня 2016 г, Катания, Италия). Принята к печати статья в журнале "Procedia Structural Integrity".

Список литературы

- Лихачев В.А., Кузьмин С.Л., Каменцева З.П. Эффект памяти формы — Л.: Изд-во Ленингр. Ун-та, 1987. — 216с.
- Sato A., Chishima E., Soma K., Mori. T. Shape memory effect in gamma-epsilon transformation in Fe–30Mn–1Si alloy single crystals //Acta Metall.1982. 30, 1177-1185.
- Харрисон, Дж. Д. Использование сплавов системы TiNi в механических и электрических соединениях / Эффекты памяти формы в сплавах. – М.: Металлургия. 1979. – С. 429-434.
- 4. Гюнтер В.Э. и др. Эффекты памяти формы и их применение в медицине. Новосибирск: Наука, 1992. 741с.
- Ооцука К., Симидзу К., Судзуки Ю. и др. Сплавы с памятью формы
 / Под ред. Фунакубо Х.: Пер. с японск. М.: Металлургия, 1990.
 224с.
- Evard M.E., Volkov A.E. Computer simulation of the shape memory effects in Fe-Mn type alloys accounting for the features of the fcc-hcp phase transformation / / Proceeding of SPIE. 1997. Vol.3345. P.178-183.
- 7. *Otsuka K., Wayman C.M.* Shape memory materials / Cambridge University Press 1998.
- Dong Z., Ulrich E. Klotz, Leinenbach C. et al. A novel Fe-Mn-Si shape memory alloy with improved shape recovery properties by VC precipitation / / Advanced engineering materials. 2009. Vol. 11. № 1-2. P.40-44.
- Koster M., Lee W.J., Schwarzenberger M., Leinenbach C. Cyclic deformation and structural fatigue behavior of an Fe–Mn–Si shape memory alloy / / Materials Science & Engineering A 637 (2015) 29-39.

- Tanaka K. A termomechanical sketch of shape memory effect: onedemensional tensile behavior / / Res Mechanica. 1986. Vol. 18. P. 251-263.
- Baumgart F., Jorde J., Reiss H.- G. Memory-Legierugen Eigenschaften, phänomenologische Theorie und Anwendunger / / Techn.Mitt.Krupp. Forsch. 1976. B. 34, H. 1. S. 1-16.
- Bertram A. Thermomechanical constructive equations for the description of shape memory effect in alloys / / Nucl. Engng. and Des. 1982. Vol. 74, N 2. P.173-182.
- 13. *Лихачев В. А., Малинин В.Г.* Структурно-аналитическая теория прочности. СПб.: Наука, 1993. 471с
- 14. Волков А.Е. Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях / / Изв. РАН. Сер. физическая. 2002. Т. 66. №9. С.1290-1297.
- 15. Evard M.E., Volkov A.E. Modelling of strain accumulation and recovery due to fcc-hcp transformation at thermocycles / / Proceedings of the SPIE. 1999. Vol.3687. P.330-334.
- 16. Владимиров В.И. Физическая теория пластичности и прочности. Часть І. Дефекты кристаллической решетки / Под ред. проф. Смирнова В.С. Ленинград, 1973.
- Evard M.E., Volkov A.E., Bobeleva O.V. An approach modelling fracture of shape memory alloy parts / / Smart Structures and Systems. 2006. Vol.2. P. 357-363.
- 18. Volkov A.E., Belyaev F.S., Evard M.E., Volkova N.A. Model of the Evolution of Deformation Defects and Irreversible Strain at Thermal Cycling of Stressed TiNi Alloy Specimen / / 2015. MATEC Web of Conferences 33.
- 19. *Кузьмин С.Л., Лихачев В.А., Рыбин В.В., Соколов О.Г.* Пластичность превращения и механическая память в

железомарганцевых сталях при кручении / / Препринт 489 ОЛФТИ им.А.Ф. Иоффе АН СССР. — Л.,1975. — 52 с.

- Кузьмин С.Л., Функционально-механические свойства материалов с эффектом памяти формы: Дис. на соискание уч. степени д-ра физ. мат. наук. — Л., 1991. — 309с.
- 21. Ершова Л.С., Богачева И.Н. Изучение фазового наклепа при ү↔є превращении в железомарганцовистом сплаве / / Физ. мет. и металловед. 1962. Т.13, вып.2. С.300-305.