



ОЦЕНКА ТЕНЗОРА ПРЕДЕЛЬНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ*

Мишустин И.В.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

АННОТАЦИЯ

Для более полного изучения разносопротивляемости поликристаллических сплавов с памятью формы (СПФ) без текстуры был использован алгоритм расчета тензора предельной неупругой деформации, накопленной в результате полного прямого фазового перехода под действием постоянного напряжения, по известным данным о геометрии кристаллических ячеек фаз и путях их трансформации. Алгоритм основан на допущении о равномерном распределении ориентаций ячеек аустенитной фазы в представительном объеме материала и заключается в выборе для каждой из этих ориентаций наиболее энергетически выгодного варианта ориентации мартенсита с последующим осреднением соответствующих формоизменений. На примере равноатомного никелида титана изучена зависимость девиатора предельной неупругой деформации прямого фазового перехода от направляющего девиатора внешнего напряжения, связь видов деформированного и напряженного состояния. Показано, что кристаллографические особенности СПФ приводят к его разносопротивляемости. При описании фазового перехода использовались тензоры малой деформации, конечной деформации Коши-Грина и логарифмической деформации Генки. Помимо осреднения указанных тензоров деформации выбранных вариантов ориентации мартенсита было проведено осреднение тензоров градиентов деформации с последующим вычислением тензоров предельной деформации указанных типов. Альтернативные способы осреднения привели к близким результатам. Вычисленный описанным способом девиатор предельной деформации фазового перехода однозначно связан с направляющим девиатором внешнего напряжения, независимо от его ориентации. Их главные оси совпадают, однако главные значения пропорциональны только при одноосном растяжении или сжатии. Девиатор предельной деформации фазового перехода представляется в виде суммы двух слагаемых, одно из которых пропорционально направляющему девиатору внешнего напряжения, а другое – ортогональному к нему направляющему девиатору. Построены зависимости интенсивностей слагаемых девиатора предельной деформации от параметра вида нагружения.

Ключевые слова: сплавы с памятью формы; поликристаллы; фазовые переходы; многовариантность; разносопротивляемость; оценка

ESTIMATION OF THE LIMIT STRAIN TENSOR OF A POLYCRYSTALLINE SHAPE MEMORY ALLOY

Mishustin Ilya V.

Institute of Applied Mechanics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИПРИМ РАН (тема гос.регистрации 121112200126-5) и при частичном финансовом содействии РФФИ (грант №20-20-01-00240).

ABSTRACT

For a more complete study of the resistance asymmetry of polycrystalline shape memory alloys (SMAs) without texture, an algorithm for calculating the tensor of limit inelastic strain accumulated in the process of a complete direct phase transition under the action of a constant stress, was used. Known data on the geometry of the crystal cells of the phases and the ways of their transformation are used in the calculation. The algorithm is based on the assumption of a uniform distribution of orientations of the austenite phase cells in a representative volume of the material and consists in choosing for each of these orientations the most energy efficient variant of martensite orientation with subsequent averaging of the corresponding shape changes. Using equiatomic titanium nickelide as an example, the dependence of the limit inelastic strain deviator on the directing deviator of external stress and the relationship between strain and stress states were studied. It is shown that the crystallographic features of the SMA lead to its resistance asymmetry. When describing the phase transition, small strain tensor, Cauchy-Green finite strain tensor, and Hencky logarithmic strain tensor were used. In addition to averaging the specified strain tensors of the selected variants of martensite orientation, the deformation gradient tensors were averaged, followed by the calculation of the limit strain tensors of the specified types. Alternative methods of averaging led to close results. The deviator of the limit strain of the phase transition calculated by the described method is uniquely associated with the directing deviator of the external stress, regardless of its orientation. Their principal axes coincide, but the principal values are proportional only in uniaxial tension or compression. The limit phase transition strain deviator is represented as the sum of two terms, one of which is proportional to the directing deviator of the external stress, and the other term is proportional to the directing deviator, orthogonal to the first one. The dependence curves of the intensities of the limit strain deviator terms on the loading type parameter are plotted.

Keywords: shape memory alloy; polycrystal; phase transition; multivariance; resistance asymmetry; estimation

ВВЕДЕНИЕ

Свойство разнсопротивляемости поликристаллических сплавов с памятью формы (СПФ) без текстуры заключается в зависимости их механического поведения от вида напряженного состояния. При этом они являются изотропными материалами. Одним из проявлений разнсопротивляемости является различие диаграмм монотонного нагружения в аустенитном и мартенситном состояниях (в режимах сверхупругости и мартенситной неупругости), а также зависимостей неупругой деформации, накопленной в результате полного прямого фазового перехода, от действующего при этом постоянного напряжения, выраженных в переменных интенсивность напряжений – интенсивность деформаций. Для разных видов напряженного состояния указанные кривые могут существенно отличаться как по форме, так и по абсолютным значениям.

Одной из причин такого поведения СПФ являются кристаллографические особенности происходящих в этих материалах термоупругих фазовых превращений, в частности многовариантность перехода из аустенитной фазы с высокосимметричной кристаллической решеткой в мартенситную фазу с менее симметричной ячейкой. Выбор варианта перехода аустенитной решетки определенной ориентации зависит от вида напряженного состояния, что приводит к зависимости от вида напряженного состояния осредненной деформации фазового перехода. Локальное напряжение можно считать равным внешнему при достаточно большой величине интенсивности последнего.

В работе [1] описан алгоритм расчета оценочных значений максимальной по модулю осевой деформации СПФ, накопленной в результате полного прямого фазового перехода под действием одноосного растяжения и одноосного сжатия, на основании данных о геометрии кристаллических ячеек фаз и путях их преобразования. Алгоритм заключается в выборе варианта фазового перехода, при котором внешние напряжения совершают максимальную работу, для каждой из ориентаций аустенитной решетки, равномерно распределенных в представительном объеме СПФ, с последующим осреднением связанных с этими переходами деформаций. Для СПФ разных составов и типов фазовых переходов получена оценка разносопротивляемости при одноосных растяжении и сжатии.

В модели нелинейного деформирования СПФ [2,3] собственная деформация группы зародившихся мартенситных образований (мартенситного элемента), отсчитываемая от аустенитного состояния, выражается как сумма

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = \tilde{\varepsilon}'_{ij} + \delta_{ij} \varepsilon_0, \quad \tilde{\varepsilon}'_{ij} = \varepsilon_{ij}^{\text{lim}}(\mu_\sigma) \varphi_1(\sigma_i), \quad \varepsilon_{ij}^{\text{lim}} = \frac{3}{2} \rho(\mu_\sigma) \sigma_{ij}^0 \quad (1)$$

девиаторной и шаровой частей, первая из которых является произведением материальной функции φ_1 , которая монотонная возрастает от 0 до 1 с ростом интенсивности напряжения σ_i и характеризует случайное распределение микронапряжений в представительном объеме, на девиатор предельной фазово-структурной деформации $\varepsilon_{ij}^{\text{lim}}$. Предполагается, что последний пропорционален направляющему девиатору действующего в момент зарождения напряжения $\sigma_{ij}^0 = \sigma'_{ij} / \sigma_i$, а интенсивность предельной фазово-структурной деформации ρ зависит от параметра вида напряженного состояния μ_σ . Шаровая часть тензора (1) является произведением единичного тензора (δ_{ij} – символ Кронекера) на постоянную для рассматриваемого материала линейную деформацию объемного эффекта прямого фазового перехода ε_0 .

В процессе прямого фазового перехода путем охлаждения под действием постоянного напряжения собственные деформации всех мартенситных элементов одинаковые и неизменные. В результате полного прямого перехода неупругая деформация представительного объема будет равна той же величине (1), а ее интенсивность связана с интенсивностью напряжения соотношением

$$\varepsilon_i = \rho(\mu_\sigma) \varphi_1(\sigma_i).$$

Предельное значение ρ является асимптотическим на соответствующей экспериментальной кривой. При ее построении помимо упругих нужно исключить пластические деформации, что представляет определенные трудности и может привести к значительной погрешности. С другой стороны, величина ρ коррелирует с теоретической оценкой, рассчитанной по описанному выше алгоритму, но не равна ей ввиду наличия границ зерен, дефектов кристаллической решетки и других несовершенств в реальном материале. Теоретическая оценка служит для установления характера зависимости $\rho(\mu_\sigma)$.

В других известных моделях деформирования СПФ [4-6] также предполагается пропорциональность девиаторов напряжения и фазово-структурной деформации, аналогичная формуле (1). Однако ряд экспериментов с нагружением, отличным от одноосного растяжения и сжатия, свидетельствует

о нарушении этого допущения, причем отклонение не сводится к эффектам второго порядка, подобным эффекту Пойнтинга в случае кручения тонкостенного цилиндра. В работе [7] описано испытание тонкостенного цилиндрического образца из поликристаллического сплава Ti-51.0 at %Ni при постоянной температуре в режимах сверхупругости и мартенситной неупругости R-фазы путем пропорционального осевого растяжения-сжатия и закручивания. Для определения деформированного состояния измерялись линейные деформации в осевом и окружном направлениях, а также соответствующая деформация сдвига. Результаты демонстрируют различие напряженного и деформированного состояний, особенно при сложном нагружении. Экспериментальные данные по исследованию аналогичных образцов из сплава Cu-12%Al-4%Mn при термоциклировании под напряжением через интервал температур фазовых переходов приведены в [8], где также наблюдается несовпадение типов напряженного и деформированного состояний в случае сложного нагружения. Поэтому представляется важным получить теоретическую оценку тензора предельной фазово-структурной деформации СПФ и установить его связь с направляющим девиатором напряжений.

1. АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ТЕНЗОРА ПРЕДЕЛЬНОЙ ФАЗОВО-СТРУКТУРНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Закон движения материальных точек при фазовом переходе в декартовой системе координат, связанной с мартенситной кристаллической решеткой, оси которой обозначим M1, M2, M3, описывается функциями $y_k(x_k)$, где x_k и y_k ($k=1, 2, 3$) – координаты материальных точек до и после фазового перехода. Компоненты тензора конечных деформаций Коши-Грина \mathbf{E}^{KG} выражаются в виде ($u_k = y_k - x_k$ – смещения точек) [9]

$$2\varepsilon_{Mij}^{KG} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial y_k}{\partial x_i} \frac{\partial y_k}{\partial x_j} - \delta_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}. \quad (2)$$

Тензор логарифмических деформаций Генки \mathbf{E}^H имеет общие с тензором Коши-Грина главные оси, его главные значения равны [10]

$$2\varepsilon_k^H = \ln(2\varepsilon_k^{KG} + 1), \quad (3)$$

а компоненты вычисляются по главным значениям с помощью матрицы поворота при переходе к главным осям. Для компонент тензора малых деформаций \mathbf{E}^L последнее слагаемое во втором выражении (2) равно нулю. В матричном виде эти тензоры записываются через тензор градиентов деформации \mathbf{F} с компонентами $f_{Mij} = \partial y_i / \partial x_j$ и единичную матрицу \mathbf{I} (верхним индексом T обозначено транспонирование)

$$\mathbf{E}^{KG} = 0.5(\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} - \mathbf{I}), \quad \mathbf{E}^L = 0.5(\mathbf{F}^T + \mathbf{F}) - \mathbf{I}. \quad (4)$$

Тензоры деформаций и градиентов деформаций всех возможных вариантов мартенситной решетки имеют одинаковые главные значения и шаровую часть, но разные направления главных осей. К одной системе координат, связанной с мартенситной кристаллической решеткой, могут относиться несколько ее вариантов, отличающиеся наклонами ребер (два варианта в случае моноклинной решетки). Значения компонент тензора деформации в декартовой

системе координат, связанной с аустенитной кристаллической решеткой, вычисляются как компоненты матрицы \mathbf{E}_A по формуле

$$\mathbf{E}_A = \mathbf{A}_0^T \cdot \mathbf{E}_M \cdot \mathbf{A}_0, \quad (5)$$

где \mathbf{E}_M – матрица, состоящая из компонент (2) того же тензора, \mathbf{A}_0 – матрица поворота координатных осей (косинусов углов между осями координат мартенсита и аустенита). Для аустенитной решетки определенной ориентации будем иметь m вариантов матрицы \mathbf{E}_A , где m – число вариантов матрицы \mathbf{E}_M , n – число вариантов ориентации осей мартенситной решетки, т.е. матрицы \mathbf{A}_0 .

Направление осей A1, A2, A3 системы координат, связанной с аустенитной решеткой, относительно отсчетной системы координат с осями 1, 2, 3 задается тремя углами последовательных поворотов при переходе от отсчетной к аустенитной системе координат. Будем считать, что этот переход осуществляется путем поворота системы координат вокруг оси 3 против часовой стрелки на угол φ_1 , затем вокруг оси 2* (в которую перешла ось 2) на угол φ_2 , и наконец, вокруг оси A1 (в которую переходит ось 1 после двух поворотов) на угол φ_3 . Соответствующие матрицы поворота равны

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 & 0 \\ \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} \cos \varphi_2 & 0 & \sin \varphi_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & 0 & \cos \varphi_2 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_3 & -\sin \varphi_3 \\ 0 & \sin \varphi_3 & \cos \varphi_3 \end{bmatrix}.$$

Тогда компоненты тензора деформации в отсчетной системе координат совпадают с компонентами матрицы

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{E}_A \cdot \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_3,$$

где матрица \mathbf{E}_A вычисляется по формуле (5).

Как видно, углы φ_1 и φ_2 однозначно задают направление оси A1 при изменении в диапазонах $\varphi_1 \in [0, 2\pi]$, $\varphi_2 \in [-\pi/2, \pi/2]$. Однако равномерное разбиение этих диапазонов не приводит к выбору равновероятных направлений оси A1 в пространстве (что в результате дальнейшего осреднения деформаций приводит к результатам, противоречащим изотропности материала). В этом можно убедиться, обратившись к геодезической аналогии, ввиду того, что углы φ_1 и φ_2 аналогичны долготе и широте. Набор их значений с шагами $\Delta \varphi_1$ и $\Delta \varphi_2$ задает на поверхности сферы радиуса R сетку меридианов и параллелей, которые при пересечении образуют сферические трапеции. Площадь трапеции, ограниченной меридианами φ_1 , $\varphi_1 + \Delta \varphi_1$ и параллелями φ_2 , $\varphi_2 + \Delta \varphi_2$, равна

$$S = R^2 \Delta \varphi_1 [\sin(\varphi_2 + \Delta \varphi_2) - \sin \varphi_2] = R^2 \Omega,$$

то есть сама эта площадь и соответствующий телесный угол Ω уменьшаются при приближении к полюсам. Чтобы все пространство было разбито на одинаковые телесные углы, нужно выбрать такой ряд значений угла φ_2 , чтобы $\sin \varphi_2$ менялся с постоянным шагом. Таким образом, равновероятные ориентации аустенитной решетки задаются путем равномерного разбиения диапазонов

$$\varphi_1 \in [0, 2\pi], \sin \varphi_2 \in [-1, 1], \varphi_3 \in [0, 2\pi].$$

Так как кристаллическая решетка аустенита обладает высокой степенью симметрии, эти диапазоны могут быть сокращены.

Итак, алгоритм расчета предполагает задание ряда равновероятных ориентаций аустенитной решетки, для каждой из таких ориентаций выбор наиболее энергетически выгодного варианта мартенситной решетки из всех возможных и далее осреднение тензоров деформации выбранных вариантов или осреднение их тензоров градиентов деформации с итоговым пересчетом по формулам (4) и (3). Энергетическая ценность определяется по критерию максимальной работы внешних напряжений на деформациях фазового перехода, показателем которой является свертка сопряженных тензоров напряжений и деформаций [11]: тензора напряжений Коши Σ с тензором малых деформаций E^L (tr – след матрицы или первый инвариант)

$$\Sigma : E^L = \text{tr}(\Sigma \cdot E^{LT})$$

либо второго тензора напряжений Пиола-Кирхгофа Σ^{PK2} с тензором конечных деформаций Коши-Грина E^{KG} , либо первого тензора напряжений Пиола-Кирхгофа Σ^{PK1} с тензором градиентов деформации F

$$\Sigma^{PK1} = \det(F) \Sigma \cdot (F^T)^{-1}, \quad \Sigma^{PK2} = F^{-1} \cdot \Sigma^{PK1}.$$

Если наиболее выгодных вариантов мартенситной решетки больше одного, то берется среднее арифметическое соответствующих тензоров деформаций или градиентов деформаций.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ РАВНОАТОМНОГО TiNi

В качестве примера СПФ рассмотрим никелид титана равноатомного состава. Его аустенитная фаза имеет ОЦК решетку B2, которая переходит в мартенситную моноклинную решетку B19'. Упрощенная схема перехода, приведенная в [12], показана на рис.1 (более сложная описана в [13]).

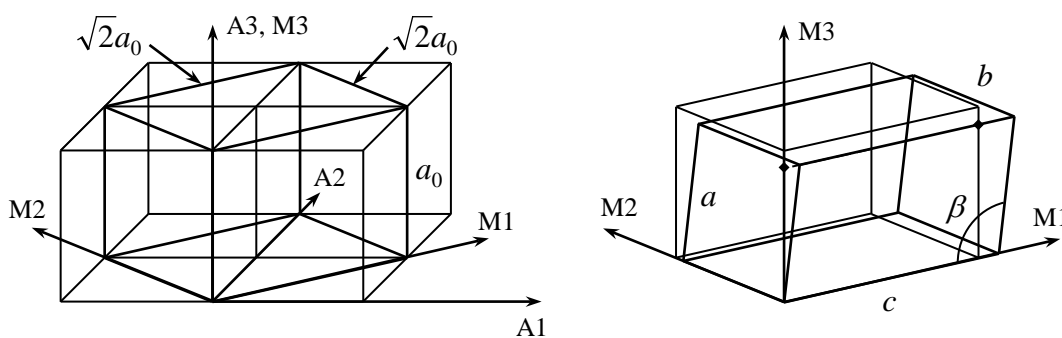


Рис.1. Схема фазового перехода B2 → B19'.

Согласно этой схеме прямоугольный параллелепипед, образованный из половин четырех ОЦК ячеек, имеющих общее ребро, переходит в наклонный параллелепипед с прямоугольным основанием и измененными длинами ребер (сдвиг происходит в плоскости M1M3, ромбами отмечены точки пересечения линий). Длины ребер и угол наклона согласно [14] равны

$$a_0 = 0.3015 \text{ нм}, \quad \sqrt{2}a_0 = 0.4264 \text{ нм},$$

$$a = 0.2889 \text{ нм}, \quad b = 0.412 \text{ нм}, \quad c = 0.4622 \text{ нм}, \quad \beta = 96.8^\circ.$$

В привязке к мартенситной решетке имеем по два тензора деформаций и градиентов деформаций с ненулевыми компонентами в осях M1, M2, M3

$$f_{M11} = \lambda c/a_0, \quad f_{M22} = \lambda b/a_0, \quad \lambda = 1/\sqrt{2},$$

$$f_{M33} = (a/a_0) \cos \bar{\beta}, \quad f_{M13} = f_{M31} = (a/a_0) \sin \bar{\beta},$$

$$\varepsilon_{M11}^L = \lambda c/a_0 - 1, \quad \varepsilon_{M22}^L = \lambda b/a_0 - 1,$$

$$\varepsilon_{M33}^L = (a/a_0) \cos \bar{\beta} - 1, \quad \varepsilon_{M13}^L = \varepsilon_{M31}^L = 0.5(a/a_0) \sin \bar{\beta},$$

$$\varepsilon_{M11}^{KG} = 0.5 \left[0.5(c/a_0)^2 - 1 \right], \quad \varepsilon_{M22}^{KG} = 0.5 \left[0.5(b/a_0)^2 - 1 \right],$$

$$\varepsilon_{M33}^{KG} = 0.5 \left[(a/a_0)^2 - 1 \right], \quad \varepsilon_{M13}^{KG} = \varepsilon_{M31}^{KG} = 0.5 \lambda (ac/a_0^2) \sin \bar{\beta},$$

отличающиеся за счет знака угла сдвига $\bar{\beta} = \pm(\beta - \pi/2)$. Матрица направляющих косинусов \mathbf{A}_0 может иметь 6 вариантов

$$\mathbf{A}_0^{(1)} = \begin{bmatrix} \lambda & \lambda & 0 \\ -\lambda & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_0^{(2)} = \begin{bmatrix} \lambda & -\lambda & 0 \\ \lambda & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_0^{(3)} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & \lambda \\ \lambda & 0 & -\lambda \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{A}_0^{(4)} = \begin{bmatrix} -\lambda & 0 & \lambda \\ \lambda & 0 & \lambda \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_0^{(5)} = \begin{bmatrix} 0 & \lambda & \lambda \\ 0 & -\lambda & \lambda \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_0^{(6)} = \begin{bmatrix} 0 & \lambda & -\lambda \\ 0 & \lambda & \lambda \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Итого при фазовом переходе из аустенитной решетки определенного направления могут сформироваться 12 вариантов мартенситной решетки. Нужно выбрать тот (или те), при формировании которого заданные внешние напряжения совершают максимальную работу.

Девиаторы предельной фазово-структурной деформации, рассчитанные по описанному выше алгоритму в случаях одноосного растяжения и сжатия, приведены в Таблице 1. В первой строке находится параметр вида заданного напряженного состояния $\mu_\sigma = 27 \det(\boldsymbol{\Sigma}') / (2\sigma_i^3)$, во второй – направляющий девиатор напряжений, ниже – полученный девиатор тензора малых деформаций, интенсивность деформаций и параметр вида деформированного состояния $\mu_\varepsilon = 4 \det(\mathbf{E}^L) / \varepsilon_i^3$. Как видно, в этих случаях нагружения девиатор \mathbf{E}^L пропорционален $\boldsymbol{\Sigma}'$, виды деформированного и напряженного состояний совпадают. В двух нижних строках таблицы приведены девиаторные части тензоров конечных деформаций Коши-Грина и тензора логарифмических деформаций Генки, которые тоже пропорциональны $\boldsymbol{\Sigma}'$. Интенсивности предельной деформации при растяжении и сжатии отличаются примерно в полтора раза, что демонстрирует разносопротивляемость материала.

В Таблице 2 приведены аналогичные данные для случая действия сдвиговой нагрузки в различных плоскостях.

Таблица 1.

Результаты расчета при растяжении и сжатии.

μ_σ	1	-1
Σ'	$\begin{bmatrix} 0.6667 & 0 & 0 \\ 0 & -0.3333 & 0 \\ 0 & 0 & -0.3333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.6667 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3333 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3333 \end{bmatrix}$
\mathbf{E}'^L	$\begin{bmatrix} 0.0847 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0424 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0424 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.0603 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0302 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0302 \end{bmatrix}$
ε_i	0.0847	0.0603
μ_ε	1	-1
\mathbf{E}'^{KG}	$\begin{bmatrix} 0.0861 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0431 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0431 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.0610 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0305 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0305 \end{bmatrix}$
\mathbf{E}'^H	$\begin{bmatrix} 0.0820 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0410 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0410 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.0597 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0299 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0299 \end{bmatrix}$

Таблица 2.

Результаты расчета при сдвиге.

μ_σ	0	0
Σ'	$\begin{bmatrix} 0.5774 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.5774 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0.5774 & 0 \\ 0.5774 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
\mathbf{E}'^L	$\begin{bmatrix} 0.0808 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0263 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0545 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.0131 & 0.0677 & 0 \\ 0.0677 & 0.0131 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0263 \end{bmatrix}$
ε_i	0.0825	0.0824
μ_ε	0.8269	0.8264
\mathbf{E}'^{KG}	$\begin{bmatrix} 0.0823 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0273 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0550 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.0136 & 0.0687 & 0 \\ 0.0687 & 0.0136 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0273 \end{bmatrix}$
\mathbf{E}'^H	$\begin{bmatrix} 0.0780 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0242 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0538 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.0121 & 0.0659 & 0 \\ 0.0659 & 0.0121 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0242 \end{bmatrix}$

Здесь уже тензоры деформаций не пропорциональны направляющему девиатору напряжений. Это свойство не зависит от плоскости сдвига, также как интенсивность предельных деформаций и значение параметра вида деформированного состояния (разница получилась в последнем знаке из-за вычислительной погрешности). Вид деформированного состояния близок к растяжению, причем дополнительные к пропорциональным компоненты тензора деформации сопоставимы с ними по абсолютной величине. Аналогичный эффект наблюдается при сложном нагружении.

Альтернативные расчеты тензоров предельных деформаций через осредненные тензоры градиентов деформации приводят к близким результатам. Различия значений компонент тензоров сравнимы с вычислительной ошибкой.

Вычисленный описанным способом девиатор предельной кристаллографической деформации фазового перехода ε_{ij}^C однозначно связан с направляющим девиатором внешнего напряжения σ_{ij}^0 . Расчеты показывают, что главные оси этих девиаторов совпадают, однако главные значения пропорциональны только при одноосном растяжении или сжатии. Для описания общей зависимости используем выражение

$$\varepsilon_{ij}^C(\sigma_{ij}^0) = \frac{3}{2}\rho_1(\mu_\sigma)\sigma_{ij}^0 + \frac{3}{2}\rho_2(\mu_\sigma)\sigma_{ij}^X, \quad (6)$$

где σ_{ij}^X – направляющий девиатор, ортогональный σ_{ij}^0 (их свертка равна нулю) и имеющий те же главные оси. Компоненты σ_{ij}^0 и σ_{ij}^X в главных осях связаны соотношениями

$$\begin{aligned} (\sigma_1^0)^2 + (\sigma_2^0)^2 + \sigma_1^0\sigma_2^0 &= \frac{1}{3}, \quad \sigma_3^0 = -\sigma_1^0 - \sigma_2^0, \quad \sigma_3^X = -\sigma_1^X - \sigma_2^X, \\ (\sigma_1^X)^2 + (\sigma_2^X)^2 + \sigma_1^X\sigma_2^X &= \frac{1}{3}, \quad (2\sigma_1^0 + \sigma_2^0)\sigma_1^X + (\sigma_1^0 + 2\sigma_2^0)\sigma_2^X = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Из последних двух равенств можно найти σ_1^X и σ_2^X с точностью до знака

$$\sigma_1^X = \frac{\delta_0}{\sqrt{3}}(\sigma_1^0 + 2\sigma_2^0), \quad \sigma_2^X = \frac{-\delta_0}{\sqrt{3}}(2\sigma_1^0 + \sigma_2^0). \quad (8)$$

Значение переключателя δ_0 (1 или -1) будет установлено далее.

Согласно выражению (6) компоненты девиатора ε_{ij}^C в главных осях связаны с компонентами введенных направляющих девиаторов соотношениями

$$\varepsilon_1^C = \frac{3}{2}(\rho_1\sigma_1^0 + \rho_2\sigma_1^X), \quad \varepsilon_2^C = \frac{3}{2}(\rho_1\sigma_2^0 + \rho_2\sigma_2^X), \quad \varepsilon_3^C = -\varepsilon_1^C - \varepsilon_2^C$$

откуда с учетом (8) и первого равенства (7) получим

$$\rho_1 = \varepsilon_1^C(2\sigma_1^0 + \sigma_2^0) + \varepsilon_2^C(\sigma_1^0 + 2\sigma_2^0), \quad \rho_2 = \delta_0\sqrt{3}(\varepsilon_1^C\sigma_2^0 - \varepsilon_2^C\sigma_1^0), \quad (9)$$

то есть разложение (6) однозначное. Компоненты σ_1^0 и σ_2^0 связаны первым соотношением (7) и выражаются через третий инвариант девиатора σ_{ij}^0 или пропорциональный ему параметр вида напряженного состояния μ_σ . Из расчетов ε_{ij}^C следует, что $\rho_1 > 0$ при любом нагружении, а $\rho_2 = 0$ для нагружения типа одноосного растяжения или сжатия и $\rho_2 > 0$ при ином нагружении, если третий инвариант девиатора σ_{ij}^X отрицательный. В частности, при сдвиговом нагружении

(см. Таблицу 2) σ_{ij}^X описывает сжатие в поперечном к плоскости сдвига направлении. Условие $\det \sigma_{ij}^X < 0$ с учетом (7), (8) выполняется при

$$\delta_0 = \text{sign} \left[(9\sigma_1^0 \sigma_2^0 + 2)(\sigma_1^0 - \sigma_2^0) \right]. \quad (10)$$

Аргумент sign равен нулю при нагружениях типа одноосного растяжения или сжатия. Тогда значение δ_0 не важно, так как согласно расчетам девиаторы ε_{ij}^C и σ_{ij}^0 пропорциональны, а $\rho_2 = 0$ по второй формуле (9).

На рис.2 приведены зависимости интенсивности $\rho = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2}$ девиатора предельной кристаллографической деформации и вычисленных по формулам (9), (10) интенсивностей ρ_1 , ρ_2 его слагаемых в выражении (6) от параметра вида нагружения μ_σ для равноатомного TiNi при осреднении тензоров малых деформаций. Как видно, это величины одного порядка. ρ_1 растет монотонно с увеличением μ_σ . ρ_2 имеет максимальное значение при $\mu_\sigma = -0.9$. ρ меняется медленно, почти линейно в диапазоне $-0.4 \leq \mu_\sigma \leq 1$ и резко уменьшается при приближении нагружения к одноосному сжатию $\mu_\sigma = -1$.

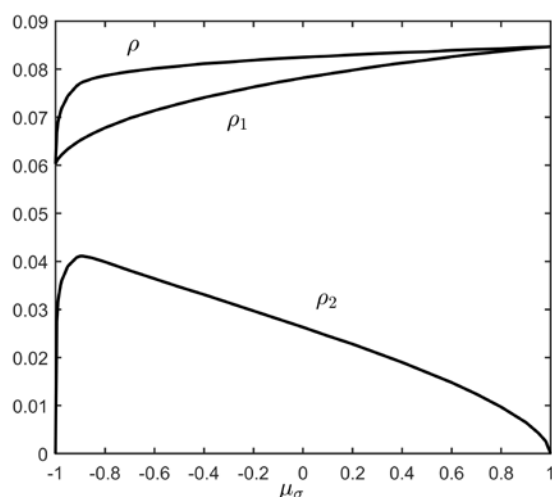


Рис.2. Зависимость ρ , ρ_1 и ρ_2 от параметра вида нагружения μ_σ .

На рис.3 показана зависимость параметра вида предельного деформированного состояния при фазовом переходе μ_ε от параметра вида нагружения μ_σ , полученная в результате того же расчета. Можно сделать вывод, что предельное деформированное и напряженное состояния сплава сильно отличаются, кроме состояний, близких к одноосному растяжению или сжатию. Поэтому в модели деформирования СПФ следует предположить, что девиатор предельной фазово-структурной деформации $\varepsilon_{ij}^{\text{lim}}$ связан с σ_{ij}^0 не как в последнем равенстве (1), а подобно выражению (6).

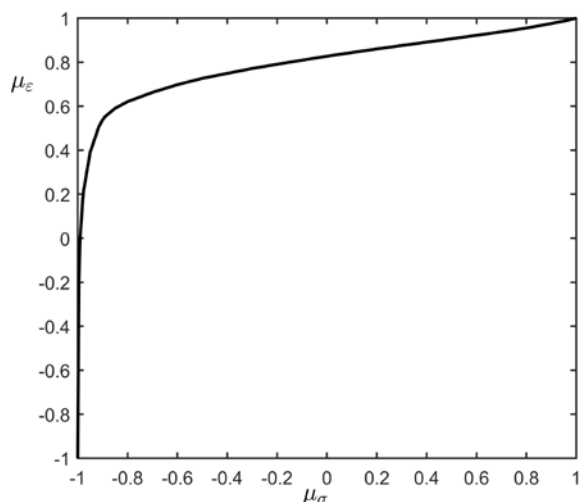


Рис.3. Зависимость параметра вида предельного деформированного состояния μ_ϵ от параметра вида нагружения μ_σ .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описан алгоритм расчета тензора предельной неупругой деформации поликристаллического СПФ без текстуры, накопленной в результате прямого фазового перехода. Этот алгоритм предполагает задание ряда равновероятных ориентаций аустенитной решетки, для каждой из таких ориентаций выбор наиболее энергетически выгодного варианта мартенситной решетки из всех возможных и далее осреднение тензоров деформации выбранных вариантов. Энергетическая ценность определяется по критерию максимальной работы внешних напряжений на деформации фазового перехода. Для равноатомного никелида титана выполнен расчет тензоров предельных деформаций – малых деформаций, конечных деформаций Коши-Грина и логарифмических деформаций Генки при различных видах нагружения. Изучена зависимость тензора предельной неупругой деформации прямого фазового перехода от направляющего девиатора внешнего напряжения, связь видов деформированного и напряженного состояния. Предложено новое выражение собственной деформации группы зародившихся мартенситных образований с дополнительным слагаемым, пропорциональным направляющему девиатору, ортогональному к направляющему девиатору внешних напряжений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Movchan A.A., Mishustin I.V. *Nanostructural prediction of shape memory alloys resistance asymmetry* // Nanoscience and Technology. – 2019. – Vol.10. – No.3. – Pp.233-245.
2. Мишустин И.В. *Модель деформирования сплава с памятью формы с учетом разносопротивляемости* // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2017. – Т.23. – №4. – С.484-498.
3. Mishustin, I.V. *Nanostructural Model of Shape Memory Alloy with Resistance Asymmetry Behavior* // Nanoscience and Technology. – 2018. – Vol.9. – No.2. – Pp.165-181.

4. Lexcellent C. *Shape-memory alloys handbook*. – London: ISTE Ltd and John Wiley & Sons Inc., 2013. – 379 p.
5. Lagoudas D.C. (Ed.). *Shape Memory Alloys: Modeling and Engineering Applications*. – Springer, 2008. – 436 p.
6. Ziolkowski A. *Pseudoelasticity of Shape Memory Alloys: Theory and Experimental Studies*. – Elsevier, 2015. – 246 p.
7. Raniecki B., Dietrich L., Kowalewski Z., Socha G., Miyazaki S., Tanaka K., Ziółkowski A. *Experimental methodology for TiNi shape memory alloy testing under complex stress state* // Archives of Mechanics. – 1999. – Vol.51. – No.6. – Pp.727-744.
8. Малинин В.Г., Малинина Н.А., Малинин Г.В., Перелыгин А.И. *Исследование влияние вида напряженного состояния на эффект памяти формы методами структурно-аналитической мезомеханики* // Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологий. – 2012. – №2(292). – С.3-9.
9. Грин А., Адкинс Дж. *Большие упругие деформации и нелинейная механика сплошной среды*. – М.: Мир, 1965. – 456 с.
10. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. *Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения*. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
11. Аннин Б.Д., Коробейников С.Н. *Обобщенные сопряженные тензоры напряжений и деформаций* // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2004. – Т.7. – №3. – С.21-43.
12. Knowles K.M., Smith D.A. *The crystallography of the martensitic transformation in equiatomic nickel-titanium* // Acta Metallurgica. – 1981. – Vol.29. – No.1. – Pp.101-110.
13. Kibey S., Sehitoglu H., Johnson D.D. *Energy landscape for martensitic phase transformation in shape memory NiTi* // Acta Materialia. – 2009. – Vol.57. – No.5. – Pp.1624-1629.
14. Otsuka K., Sawamura T., Shimizu K. *Crystal Structure and Internal Defects of Equiatomic TiNi Martensite* // Physica Status Solidi (A). – 1971. – Vol.5. – No.2. – Pp.457-470.

REFERENCES

1. Movchan A.A., Mishustin I.V. *Nanostructural prediction of shape memory alloys resistance asymmetry*. Nanoscience and Technology, 2019, Vol.10, No.3, Pp.233-245.
2. Mishustin I.V. *Model' deformirovaniya splava s pamyat'yu formy s uchetom raznosoprotivlyaemosti [Model of shape memory alloy deformation with resistance asymmetry]*. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii, 2017, Vol.23, No.4, Pp.484-498.
3. Mishustin, I.V. *Nanostructural Model of Shape Memory Alloy with Resistance Asymmetry Behavior*. Nanoscience and Technology, 2018, Vol.9, No.2, Pp.165-181.
4. Lexcellent C. *Shape-memory alloys handbook*. London, ISTE Ltd and John Wiley & Sons Inc., 2013, 379 p.
5. Lagoudas D.C. (Ed.). *Shape Memory Alloys: Modeling and Engineering Applications*. Springer, 2008, 436 p.
6. Ziolkowski A. *Pseudoelasticity of Shape Memory Alloys: Theory and Experimental Studies*. Elsevier, 2015, 246 p.

7. Raniecki B., Dietrich L., Kowalewski Z., Socha G., Miyazaki S., Tanaka K., Ziółkowski A. *Experimental methodology for TiNi shape memory alloy testing under complex stress state*. Archives of Mechanics, 1999, Vol.51, No.6, Pp.727-744.
8. Malinin V.G., Malinina N.A., Malinin G.V., Perelygin A.I. *Issledovanie vliyaniya napryazhennogo sostoyaniya na ehffekt pamyati formy metodami strukturno-analiticheskoy mezomekhaniki [Research of influence of stress state on the shape memory effect by methods of structural-analytical mesomechanics]*. Fundamental'nye i prikladnye problemy tekhniki i tekhnologij, 2012, No.2(292), Pp.3-9.
9. Green A.E., Adkins J.E. *Large Elastic Deformations and Non-linear Continuum Mechanics*. Oxford: Clarendon Press, 1960, 348 p.
10. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I. *Bol'shie uprugoplasticheskie deformatsii: teoriya, algoritmy, prilozheniya [Large elastic-plastic deformation: theory, algorithms and applications]*. Moskva, Nauka, 1986, 232 p.
11. Annin, B.D., Korobejnikov, S.N. *Obobshchennyye sopryazhennyye tenzory napryazhenij i deformatsij [Generalized conjugated tensors of stress and deformation]*. Sibirskij zhurnal industrial'noj matematiki, 2004, Vol.7, No.3, Pp.21-43.
12. Knowles K.M., Smith D.A. *The crystallography of the martensitic transformation in equiatomic nickel-titanium*. Acta Metallurgica, 1981, Vol.29, No.1, Pp.101-110.
13. Kibey S., Sehitoglu H., Johnson D.D. *Energy landscape for martensitic phase transformation in shape memory NiTi*. Acta Materialia, 2009, Vol.57, No.5, Pp.1624-1629.
14. Otsuka K., Sawamura T., Shimizu K. *Crystal Structure and Internal Defects of Equiatomic TiNi Martensite*. Physica Status Solidi (A), 1971, Vol.5, No.2, Pp.457-470.

Поступила в редакцию 27 мая 2022 года.

Сведения об авторе:

Мишустин Илья Владимирович – к.ф.-м.н., с.н.с., ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия; e-mail: lewis@nextmail.ru