

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

БЕЛЯЕВ Федор Степанович

МИКРОСТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ НЕОБРАТИМОЙ ДЕФОРМАЦИИ
И ДЕФЕКТОВ В СПЛАВАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

01.02.04-Механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Санкт-Петербург 2016

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор кафедры теории упругости СПбГУ
Волков Александр Евгеньевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор,
Мовчан Андрей Александрович
(Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт прикладной
механики Российской академии наук
(ИПРИМ РАН), главный научный сотрудник
отдела механики адаптивных композиционных
материалов и систем)

доктор физико-математических наук,
Гуткин Михаил Юрьевич
(Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт проблем
машиноведения Российской академии наук
(ИПМаш РАН), главный научный сотрудник
лаборатории механики наноматериалов и
теории дефектов)

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт механики
сплошных сред Уральского отделения
Российской академии наук (ИМСС УрО РАН)

Защита состоится 24 ноября 2016 года в 14 часов на заседании
диссертационного совета Д 212.232.30 на базе Санкт-Петербургского
государственного университета по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Старый
Петергоф, Университетский пр., 28, математико-механический факультет,
ауд. 405.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им.
М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета по адресу:
199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9 и на сайте:
<https://disser.spbu.ru/disser/soiskatelyu-uchjonoj-stepeni/dis-list/details/14/1069.html>

Автореферат разослан " ____ " _____ 2016 года.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук

Е.В. Кустова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Сплавы с памятью формы (СПФ) относятся к группе перспективных «умных» материалов. Они демонстрируют такие эффекты как пластичность превращения (накопление большой деформации при охлаждении под нагрузкой), память формы (восстановление накопленной деформации при нагреве), псевдоупругость (возможность получения большой деформации при нагружении и ее возврат при разгрузке). Эти сплавы благодаря уникальным возможностям поведения нашли широкое применение в технике и медицине: из них изготавливают термомеханические муфты, термочувствительные элементы, детали силовых установок, виброзащитные элементы, устройства расчеховки и развертывания, рабочие элементы приводов, различные медицинские стенты, скрепки и зажимы. Для успешного проектирования этих и других устройств необходима разработка надежных средств расчета деформационного поведения и методов оценки усталостных свойств этих материалов. Решению данной задачи посвящены усилия многих исследователей в России и в мире. Эти обстоятельства обосновывают актуальность настоящей работы.

Большинство существующих в настоящее время микроструктурных моделей фокусируется на описании обратимой (фазовой) деформации СПФ. При расчете рабочих элементов из СПФ, работающих в условиях циклических воздействий напряжения и/или температуры, важно рассчитывать не только обратимую деформацию, но и необратимую. Необратимая деформация приводит к изменению геометрических и функциональных характеристик элемента из СПФ, снижая его эксплуатационный ресурс. Несмотря на множество подходов описания необратимой деформации, макроскопические модели, как правило, ограничиваются простым нагружением, а микроструктурные не дают удовлетворительного описания деформации при циклических нагрузках. Для оценки надежности и срока службы элементов из СПФ, работающих в режиме циклической нагрузки, кроме накопления необратимой деформации, необходимо учитывать усталостную долговечность. К настоящему времени получено много экспериментальных результатов о поведении СПФ при различных циклических воздействиях. Несмотря на это, методы прогнозирования циклической долговечности СПФ развиты слабо. Большинство из них основано на использовании закона Коффина-Мэнсона. Такой подход позволяет получать хорошие количественные оценки, однако его нельзя использовать для построения универсального критерия долговечности из-за неоднозначности определения постоянных при разных режимах циклического воздействия. Другой подход, описанный в работе (Волков А.Е., Евард М.Е., Бобелева О.В. Моделирование накопления дефектов и повреждаемости в процессе пластической деформации мартенсита в сплавах с памятью формы // Материаловедение, 2006. № 12. С. 2-5.), использует критерий разрушения, встроенный в микроструктурную модель. Это позволяет получать оценки долговечности для различных режимов воздействий, но данный критерий не

учитывает влияние на разрушение действующего напряжения, что может приводить к неверным результатам.

В связи с вышесказанным, **основной целью кандидатской диссертации** является: построение микроструктурной модели сплавов с памятью формы, позволяющей рассчитывать обратимую фазовую и необратимую микропластическую деформацию, прогнозировать усталостную долговечность с учетом взаимодействия вариантов мартенсита, накопления деформационных дефектов и поврежденности в процессе микропластической деформации. Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать способ учета взаимодействия вариантов мартенсита в никелиде титана, обуславливающего образование согласованных пар вариантов.
2. Разработать модель микропластической деформации, учитывающую изотропное и трансляционное упрочнения в связи с накоплением ориентированных и рассеянных деформационных дефектов.
3. Разработать и включить в модель новый деформационно-силовой критерий разрушения, учитывающий влияние напряжений, деформационных дефектов и поврежденность материала.
4. Составить алгоритм для расчета напряженно-деформированного состояния СПФ на основе разработанной модели и написать реализующую его компьютерную программу.
5. Изучить влияние материальных постоянных на общую деформацию при однократном и циклическом воздействии. Определить методику выбора материальных постоянных, позволяющую калибровать модель для описания конкретного материала.
6. Выполнить для эквиатомного сплава никелида титана моделирование охлаждения и нагрева под различными напряжениями; рассчитать обратимую и необратимую деформацию в условиях реализации эффекта двусторонней памяти формы, циклического изменения температуры или напряжения, мягкого рабочего цикла мартенситного двигателя; определить число циклов до разрушения при термо- и механоциклировании.

Научная новизна

Для микроструктурной модели, в которой варианты мартенсита представлены бейновскими вариантами фазовой деформации, построена матрица взаимодействия вариантов мартенсита в никелиде титана, приводящего к его росту в виде согласованных пар. Впервые разработана микроструктурная модель СПФ, позволяющая описывать обратимую (фазовую) деформацию, необратимую (микропластическую) деформацию и поврежденность материала с позиций концепции эволюции деформационных дефектов, а также прогнозировать усталостную долговечность образца. Выполнены расчеты необратимой деформации, накопления деформационных дефектов, трансляционного и изотропного упрочнения. Сформулирован новый деформационно-силовой критерий прочности, учитывающий влияние среднего давления, деформационных дефектов и поврежденности материала. Определены

способы нахождения и алгоритмы подбора всех материальных постоянных. Выполнен подбор материальных постоянных для моделирования деформационного поведения эквиатомного сплава никелида титана. Выполнены расчеты термоциклической и механоциклической долговечности, согласующиеся с известными экспериментальными результатами.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическое значение данной работы заключается в том, что разработанная модель может быть использована для описания функциональных свойств, накопления необратимой деформации и прогнозирования усталостной долговечности СПФ; она может служить основой для выявления вкладов различных механизмов деформации в формирование функционально-механических свойств СПФ и, соответственно, для дальнейшего развития теоретического описания деформации СПФ. **Практическое значение** работы состоит в том, что модель может применяться при разработке функциональных элементов приводов и других устройств из СПФ, работающих в условиях циклических воздействий напряжения и температуры, для выбора геометрических характеристик, силовых и температурных режимов, обеспечивающих стабильность свойств сплава и, следовательно, рабочих характеристик устройства.

Методология и методы исследования

При разработке модели использовались хорошо зарекомендовавшие себя подходы описания деформации СПФ: рассмотрение деформации на нескольких структурных уровнях, связанных между собой операторами усреднения; описание мартенситного превращения с помощью методов равновесной термодинамики, выражение энергии взаимодействия вариантов мартенсита в виде квадратичной формы. Использовались представления о связи необратимой деформации, трансляционного и изотропного упрочнения с плотностями деформационных дефектов. Для формулировки критерия разрушения использовалась концепция поврежденности как фактора, снижающего прочность материала.

Положения, выносимые на защиту

1. Описание энергии взаимодействия бейновских вариантов мартенсита в никелиде титана с помощью предложенной в данной работе матрицы квадратичной формы.
2. Модель микропластической деформации, учитывающая изотропное и трансляционное упрочнения, порожденные накоплением ориентированных и рассеянных деформационных дефектов.
3. Деформационно-силовой критерий разрушения, учитывающий влияние гидростатической и сдвиговой компонент напряжения, деформационных дефектов и поврежденности материала.
4. Расчетные зависимости необратимой деформации от номера цикла при термоциклировании под различными напряжениями, необратимой

деформации и работы от номера цикла для рабочего элемента в мягком (управляемом напряжением) цикле; числа циклов до разрушения от действующего напряжения при термоциклировании и от максимальной деформации при механоциклировании.

Достоверность полученных результатов обеспечена соответствием предположений, послуживших основой для разработанной теории, проверенным физическим представлениям о механизмах реализации мартенситных превращений, пластической деформации и разрушения, возможностью разработанной модели описывать известные деформационные эффекты в СПФ, согласием расчетных данных с результатами экспериментов.

Апробация диссертации

Результаты работы были представлены на всероссийских и международных конференциях:

1. VII-я международная конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (MPFP – 2013), г. Тамбов, июнь 2013.
2. LIV международная конференция «Актуальные проблемы прочности», г. Екатеринбург, ноябрь 2013.
3. «XXI Петербургские чтения по проблемам прочности», г. Санкт-Петербург, апрель 2014.
4. «Седьмые Поляховские чтения», г. Санкт-Петербург, февраль 2015.
5. «European Symposium on Martensitic Transformations» (ESOMAT-2015), г. Антверпен, Бельгия, сентябрь 2015.
6. «XXII Петербургские чтения по проблемам прочности», г. Санкт-Петербург, апрель 2016.
7. LVII международная конференция «Актуальные проблемы прочности», г. Севастополь, май 2016.

Публикации

По материалам работы имеется 7 публикаций, из них 4 в изданиях из перечня ВАК, из которых 2 в изданиях, индексируемых "Scopus" и 1 в издании, индексируемом "Web of Science".

Личный вклад автора

В работах 1 – 7 автор разработал способ описания роста мартенсита в виде согласованных пар, построил модель микропластической деформации на основе концепции дефектов и поврежденности, составил алгоритм расчета на основе полученной микроструктурной модели, провел численные эксперименты по деформированию и разрушению СПФ, участвовал в обсуждении полученных данных и подготовке публикаций, научный руководитель А.Е. Волков осуществлял постановку задач исследования, участвовал в обсуждении полученных результатов и подготовке публикаций, М.Е. Евард участвовала в анализе результатов. В работах 2 и 4 Н.А. Волкова участвовала в выполнении некоторых расчетов.

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, заключения и списка используемой литературы, состоящего из 112 наименований. Работа изложена на 118 страницах, иллюстрирована 32 рисунками и содержит 5 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении кратко изложено содержание работы, обозначена ее актуальность и практическая значимость, сформулированы цель и задачи исследования, научная новизна и основные положения, выносимые на защиту.

В главе 1 представлен аналитический обзор литературы в котором рассмотрены различные подходы, применяемые для моделирования деформационного поведения СПФ. Особое внимание уделено рассмотрению микроструктурных моделей. Проанализированы такие аспекты моделирования как описание обратимой (фазовой) деформации, описание необратимой деформации, прогнозирование долговечности СПФ при циклических воздействиях. Сделан вывод о том, что методы моделирования необратимой деформации и оценки долговечности СПФ развиты слабо, указаны недостатки существующих подходов. На основе выполненного аналитического обзора сформулированы цель и задачи исследования.

В главе 2, состоящей из трех подразделов, описано построение модели фазовой деформации; определен вид матрицы взаимодействия бейновских вариантов мартенсита в никелиде титана; изучено влияние энергии взаимодействия мартенситных вариантов на фазовую деформацию. **Подраздел 2.1** посвящен разработке метода описания фазовой деформации, учитывающего взаимодействие бейновских вариантов мартенсита. Построение модели выполнено в рамках концепции, сформулированной в работе (Волков А.Е. Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях. // Изв. Академии Наук. Сер. Физическая. 2002. Т.66, № 9. С. 1290 – 1297.): принят аналогичный выбор структурных уровней и переход от микроуровня к макроуровню посредством усреднения деформации. Предметом описания модели является представительный объем, состоящий из зерен с различными ориентациями кристаллографических осей. Зерна, в свою очередь, состоят из аустенита и ориентационных кристаллографически эквивалентных вариантов мартенсита. Применяется гипотеза Райсса, согласно которой деформация представительного объема находится посредством усреднения деформации зерен, при этом пространственное усреднение заменено усреднением по ориентациям кристаллографических осей зерен поликристалла. Предполагается возможным использовать тензоры малых деформаций.

Деформация зерна выражается в виде суммы упругой, термической и фазовой деформаций: $\varepsilon^{gr} = \varepsilon^{gre} + \varepsilon^{grT} + \varepsilon^{grPh}$. Упругая и термическая деформации аустенита и вариантов мартенсита вычисляются обычным образом по закону Дюгамеля – Неймана. Для описания фазовой деформации зерна вводится набор переменных Φ_n , таких что Φ_n/N есть объемная доля n -го варианта мартенсита в зерне (N – число вариантов мартенсита). С помощью этих

переменных фазовая деформация $\varepsilon^{grPh} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n D^n$, где D^n – тензор деформации n -го варианта мартенсита относительно аустенита (тензор бейновской деформации). Величины Φ_n являются внутренними переменными модели, их изменение определяется на основе расчета сопряженных с ними обобщенных термодинамических сил, для вычисления которых использован термодинамический потенциал Гиббса:

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

Где G^{eig} – собственный потенциал фаз, состоящий из потенциалов аустенита G^A и вариантов мартенсита G^{Mn} ; G^{mix} – потенциал «смешивания», определяющий энергию взаимодействия фаз. В вышеуказанной работе считается что варианты формируются независимо, не оказывая влияния друг на друга, однако это не соответствует действительности, так как рост обособленных вариантов мартенсита вызывает большую несовместность деформации и, как следствие, большую упругую энергию межфазных напряжений. Многие наблюдения показывают, что мартенсит формируется в виде пар согласованных вариантов (ПСВ), что создает гораздо меньшую несовместность деформации. Неучет данного факта вносит ошибку в оценку энергии взаимодействия фаз и снижает предсказательную силу модели, поэтому возникает необходимость в использовании выражения для потенциала «смешивания» G^{mix} , учитывающего особенности взаимодействия вариантов. Точный расчет этого потенциала является очень сложной задачей, но хорошую оценку дает квадратичная форма $G^{mix} = \frac{\mu}{2} \sum_{m,n} A_{mn} \Phi_m \Phi_n$. Величину энергии взаимодействия фаз определяет материальная постоянная μ . Матрица A_{mn} позволяет учесть взаимодействие вариантов мартенсита, способствующее их росту в составе согласованных пар.

Матрица A_{mn} имеет следующую структуру: ее диагональные элементы равны единице ($A_{nn} = 1, n = 1, \dots, N$) и соответствующие слагаемые в G^{mix} определяют собственный вклад каждого варианта в упругую энергию; недиагональные элементы отвечают за взаимодействие вариантов. Если два варианта m и n могут образовывать согласованную пару, то соответствующий элемент $A_{mn} = -\alpha$ (α – некоторая положительная материальная постоянная, отвечающая за силу взаимодействия вариантов), в противном случае $A_{mn} = 0$. Таким образом, при одновременном росте согласованных вариантов m и n в выражение потенциала G^{mix} войдет слагаемое $-\mu\alpha\Phi_m\Phi_n$, которое и отвечает за снижение энергии межфазных напряжений по сравнению с индивидуальным ростом вариантов мартенсита.

Движущая сила роста n -го варианта мартенсита (т.е. роста величины Φ_n), определена как производная потенциала Гиббса по переменной Φ_n :

$$F_n = -N \frac{\partial G}{\partial \Phi_n} \approx \frac{q_0}{T_0} (T - T_0) + \sigma_{ij} : D_{ij}^n - \mu \sum_{m=1}^N A_{mn} \Phi_m,$$

здесь T – температура, σ_{ij} – приложенное внешнее напряжение, q_0 – скрытая теплота мартенситного превращения, T_0 – температура равновесия фаз, при которой потенциалы Гиббса аустенита и мартенсита равны. При этом, благодаря выбору выражения для G^{mix} , чем больше вырастает какой-либо мартенситный кристалл в аустените, тем больший термодинамический стимул он создает для роста согласованных с ним вариантов.

Условия превращения записываются в виде: $F_n = \pm F^{fr}$, где знак плюс соответствует прямому превращению, а минус – обратному. Величина F^{fr} – сила «трения» – материальная константа, обуславливающая гистерезис мартенситного превращения.

В подразделе 2.2 определен вид матрицы A_{mn} для никелида титана. Выбор этого сплава в качестве объекта описания обусловлен его распространенностью, а также набором свойств, выделяющих его среди прочих СПФ: высокими значениями восстанавливаемой деформации и развиваемых усилий, высокой коррозионной стойкостью, близостью температур фазового превращения к комнатным. В никелиде титана при переходе из аустенитного состояния в мартенситное происходит превращение высокосимметричной кубической решетки В2 в низкосимметричную моноклинную В19'. Существует 12 различных бейновских вариантов деформации и, соответственно, матрица A_{mn} имеет размеры 12x12. Данные, о том, какие варианты могут образовывать согласованные пары, заимствованы из работы (Madangopal K., Singh J.B., Banerjee S. The Nature of Self-Accommodation in Ni-Ti Shape Memory Alloys // Scripta Metallurgica, Vol. 29, 1993, pp. 725-728.). При надлежащей нумерации вариантов матрица взаимодействия имеет следующий вид:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & & & \\ & A_1 & & \\ & & A_1 & \\ & & & A_1 \end{pmatrix}; A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha & -\alpha & 0 \\ -\alpha & 1 & 0 & -\alpha \\ -\alpha & 0 & 1 & -\alpha \\ 0 & -\alpha & -\alpha & 1 \end{pmatrix}.$$

Данная матрица имеет блочную структуру: на ее диагонали расположены три одинаковых блока 4x4, остальные элементы равны нулю. Таким образом, варианты разделяются на три группы (1, 2, 3, 4), (5, 6, 7, 8), (9, 10, 11, 12). Каждый вариант может составить согласованную пару с двумя другими из своей группы и не взаимодействует с вариантами других групп.

В подразделе 2.3 описаны методы определения материальных постоянных, необходимых для расчета конкретного материала. Характеристические температуры M_s, M_f, A_s, A_f и скрытая теплота превращения q_0 определяются из данных дифференциальной сканирующей калориметрии. Для определения температуры термодинамического равновесия фаз T_0 используется приближение: $T_0 = (M_s + A_f)/2$. Показано, что для постоянных F^{fr} и μ верны формулы $F^{fr} = -q_0(A_f - M_s)/2T_0$; $\mu = -q_0(M_s - M_f)/T_0 D_x$, где D_x является суммой элементов какой-либо из строчек матрицы A_{mn} . Для никелида титана $D_x = 1 - 2\alpha$. Из требования положительной определенности квадратичной формы потенциала смешивания и физического смысла постоянной α найден интервал ее допустимых значений: $\alpha \in [0; 0.5)$. Определение значения

постоянной α осуществлено с помощью подбора. Для этого выполнена серия численных экспериментов охлаждение - нагрев под постоянным растягивающим напряжением для различных значений α . Расчетные результаты обратимой деформации от величины α для нагрузок 50, 100 и 200 МПа представлены на рисунке 1 (а). Изучено влияние параметра α на максимальное значение обратимой деформации при активном деформировании сплава в псевдоупругом состоянии. Расчетные зависимости максимальной деформации от значения параметра α для различных напряжений представлены на рисунке 1 (б). Обе серии численных экспериментов показывают, что обратимая деформация снижается при увеличении параметра α . Это связано с ростом сил, вызывающих увеличение объемной доли вариантов, согласованных с уже растущими вариантами. Таким образом, объемная доля вариантов, наиболее благоприятных по отношению к приложенному напряжению, снижается в пользу не самых благоприятных, но входящих в согласованную с ними пару, вследствие чего снижается общая деформация.

Этот факт хорошо демонстрирует рисунок 2, показывающий объемные доли вариантов мартенсита в одном из зерен после охлаждения под нагрузкой 50 МПа для различных значений α . Рамками выделены три группы взаимодействующих вариантов. В каждой группе можно выделить два благоприятных варианта (их объемная доля выше) и два неблагоприятных. Видно, что при увеличении постоянной α , объемная доля благоприятных вариантов снижается, а неблагоприятных возрастает. При этом объемная доля каждой из групп остается неизменной. Сделан вывод, что постоянная α определяет распределение объемных долей вариантов, входящих в согласованные пары, не меняя объемную долю самих пар. Таким образом, α определяет микроструктурное строение мартенситных пластин и через изменение фазовой деформации влияет на общую деформацию представительного объема.

Исходя из этого, параметр α необходимо подбирать таким образом,

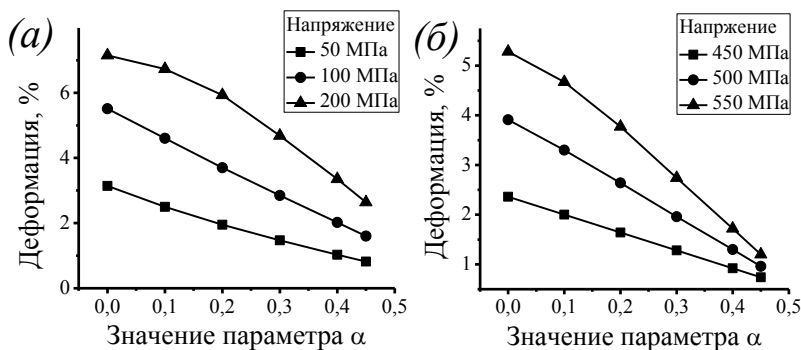


Рисунок 1 – Зависимости величины максимальной деформации от значения параметра α при термоциклировании (а) и активной деформации (б).

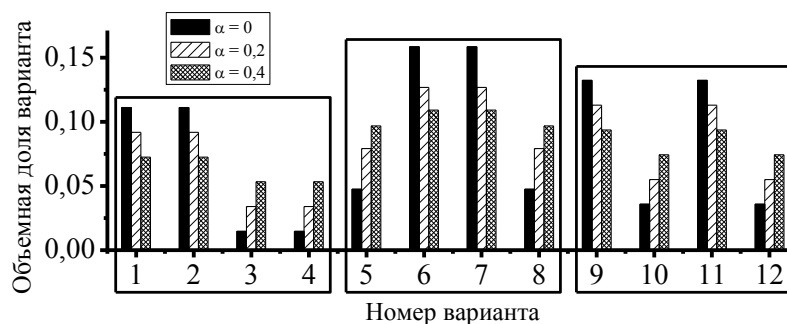


Рисунок 2 – Распределение объемных долей вариантов мартенсита после охлаждения под нагрузкой.

чтобы расчетное значение обратимой деформации совпадало с экспериментальным. Для увеличения данной деформации в расчете необходимо снизить значение α , а для уменьшения – увеличить.

В главе 3, состоящей из трех подразделов, описано построение модели микропластической деформации и дефектов, методы определения значений материальных постоянных; приведены результаты расчетов деформации при различных термомеханических воздействиях.

Подраздел 3.1 посвящен разработке модели микропластической деформации. Ее точный расчет – очень сложная задача, поэтому вводятся упрощающие предположения. Предполагается, что растущий мартенситный вариант создает межфазные напряжения, которые вызывают пластическую деформацию сонаправленную с фазовой деформацией этого варианта. Так происходит пластическая аккомодация мартенсита. Так как пластическая деформация не вызывает изменения объема, то считается, что тензор микропластической деформации, порожденной n -м мартенситным вариантом, пропорционален девиатору фазовой деформации этого варианта $devD^n$. Для описания микропластической деформации используется набор переменных ε_n^{mp} , которые являются мерами микропластических деформаций, соответствующих каждому из вариантов мартенсита. Микропластическая деформация зерна $\varepsilon^{gr MP}$ вычисляется с помощью усреднения по вариантам мартенсита:

$$\varepsilon^{gr MP} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \kappa \varepsilon_n^{mp} devD^n,$$

где κ – масштабирующий коэффициент. В связи с учетом в модели микропластической деформации, описывающее ее слагаемое было добавлено в формулу общей деформации зерна: $\varepsilon^{gr} = \varepsilon^{gr e} + \varepsilon^{gr T} + \varepsilon^{gr Ph} + \varepsilon^{gr MP}$.

Микропластическая деформация происходит посредством образования и движения дефектов кристаллической решетки, создающих дальнедействующие поля напряжений (ориентированные дефекты). Кристаллы n -го варианта мартенсита в зерне порождают одинаково ориентированные дефекты, поэтому каждому варианту можно сопоставить плотность ориентированных дефектов b_n . Создаваемые ими напряжения препятствуют их движению, т.е. создают трансляционное (кинематическое) упрочнение. Ориентированные дефекты могут выхолить на внешнюю поверхность тела, в результате чего их плотность уменьшается, но созданная их движением микропластическая деформация остается. К ориентированным дефектам можно отнести, например, скопления дислокационных петель в зонах сдвига.

Кроме ориентированных дефектов при аккомодации мартенсита образуются рассеянные дефекты, не создающие дальнедействующих полей напряжений. Плотность рассеянных дефектов в зерне не разделяется в зависимости от породивших их вариантов и определяется единой величиной f . Примером таких дефектов являются дефекты, образующиеся при пересечении дислокаций, огибании ими препятствий или неполной их аннигиляции. Рассеянные дефекты образуются в процессе движения и взаимодействия дислокаций, поэтому увеличение их плотности связывается с суммарной

пластической деформацией в зерне. Исследования необратимой деформации в СПФ показывают, что при обратном превращении происходит снижение упрочнения (А. Sibirev, S. Belyaev, N. Resnina Softening process during reverse martensitic transformation in TiNi shape memory alloy // Journal of Alloys and Compounds, №661. 2016. pp. 155-160), что можно объяснить залечиванием части рассеянных дефектов. С учетом вышеприведенных рассуждений для описания плотностей дефектов предложены следующие эволюционные уравнения:

$$\dot{b}_n = \dot{\varepsilon}_n^{mp} - \frac{|b_n|}{\beta^*} \dot{\varepsilon}_n^{mp} H(b_n \dot{\varepsilon}_n^{mp}); \quad \dot{f} = \sum_{m=1}^N |\dot{\varepsilon}_m^{mp}| + r_1(f - f_0) \dot{\Phi}_M H(-\dot{\Phi}_M).$$

где 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 (равновесное) значение плотности рассеянных дефектов; r_1 - материальная постоянная. В уравнении для b -дефектов первое слагаемое отвечает за образование новых ориентированных дефектов, а второе за их выход на поверхность тела. В уравнении для f -дефектов первое слагаемое описывает по сути изменение суммарного параметра Одкависта, а второе определяет залечивание рассеянных дефектов при обратном превращении. Стоит отметить, что плотности b_n и f не сопоставляются с какими-либо конкретными дефектами и не имеют размерности, но являются лишь мерами количества ориентированных и рассеянных дефектов.

В формулировке термодинамического потенциала смешивания при наличии дефектов учтено, что ориентированные дефекты снижают упругую энергию межфазных напряжений. Математически это выражается путем вычитания в потенциале смешивания плотности ориентированных дефектов из мер фазовой деформации:

$$G^{mix} = \frac{\mu}{2} \sum_{m,n} A_{mn} (\Phi_m - b_m)(\Phi_n - b_n).$$

Для нахождения внутренних переменных, связанных с процессами пластической аккомодации и микропластической деформации, введены условия микропластического течения для каждого из вариантов мартенсита. Они формулируются по аналогии с теорией течения в одномерном случае при наличии изотропного и трансляционного упрочнений, при этом роль напряжений играет обобщенная сила F_n^p , вызывающая изменение плотности b_n :

$$|F_n^p - F_n^\rho| = F^y, \quad d|F_n^p| > 0,$$

где F_n^ρ характеризует трансляционное упрочнение, F^y изотропное, а сила F_n^p равна производной потенциала Гиббса по b_n :

$$F_n^p = -N \frac{\partial G}{\partial b_n} = \mu \sum_{m=1}^N A_{mn} (\Phi_m - b_m).$$

В данной модели предполагается, что трансляционное упрочнение связано с ориентированными дефектами, а изотропное - с рассеянными дефектами, поскольку они препятствуют движению дислокаций, тем самым повышая предел текучести. Замыкающие уравнения, связывающие параметры упрочнения F_n^ρ и F^y с плотностями дефектов приняты линейными:

$$F_n^\rho = a_\rho b_n, \quad F^y = a_y f,$$

где a_p и a_y – материальные постоянные. Таким образом, уравнения, описывающие эволюцию плотностей дефектов, задают законы упрочнения.

Построенная модель микропластической деформации и дефектов дает необходимые и достаточные уравнения для расчета эволюции всех внутренних переменных, связанных с пластической аккомодацией мартенсита.

Подраздел 3.2 посвящен описанию методов определения материальных постоянных для конкретного материала. Представлены способы определения начальных значений упрочнений и плотностей дефектов. Изучено влияние накопления дефектов на развитие микропластической деформации. Представлены алгоритмы подбора постоянных, отвечающих за накопление дефектов и их связь с деформацией. Произведен подбор материальных постоянных для эквиаомного никелида титана.

В **подразделе 3.3** приведены результаты расчетов необратимой деформации никелида титана. Рассчитано изменение обратимой и необратимой деформации при охлаждении и нагреве через интервал мартенситных превращений при постоянном растягивающем напряжении, а также, когда напряжения при охлаждении и нагреве различны. Выполнено моделирование эффекта двусторонней памяти формы после предварительного термоцикла под постоянным напряжением. Для изучения накопления необратимой деформации при циклических термомеханических воздействиях проведено моделирование термоциклирования под постоянным напряжением. Выполнено моделирование рабочего элемента мартенситного двигателя, работающего в режиме «мягкого» (управляемого напряжением) цикла. Для данного режима рассчитано накопление необратимой деформации в процессе работы и полезная работа в зависимости от номера цикла.

На рисунке 3 представлены расчетные зависимости необратимой деформации в цикле от номера цикла, полученные при моделировании термоциклирования образца под постоянным напряжением 50 МПа (а) и 200 МПа (б), в сравнении с аналогичными экспериментальными данными. Видно, что расчетные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным. Расчетные зависимости являются убывающими, причем характер убывания хорошо описывается убывающей экспонентой.

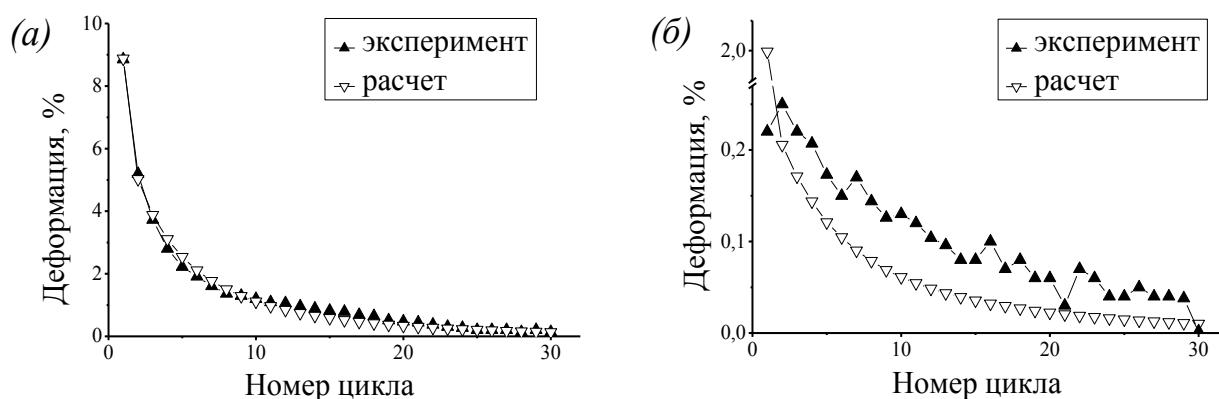


Рисунок 3 - Зависимости необратимой деформации в цикле от номера цикла при термоциклировании под напряжением 200 МПа (а) и 50 МПа (б), расчет и эксперимент (А. Sibirev et al., 2014).

На рисунке 4 представлены зависимости удельной работы в цикле от номера цикла для термомеханических воздействий, соответствующих рабочему элементу теплового мартенситного двигателя с мягким (управляемом напряжением) циклом, с одинаковыми напряжениями при охлаждении 50 МПа, и различными напряжениями при нагреве. На этом рисунке видно, что удельная механическая работа возрастает в течении первых 20-30 циклов, а затем стабилизируется на некотором постоянном уровне.

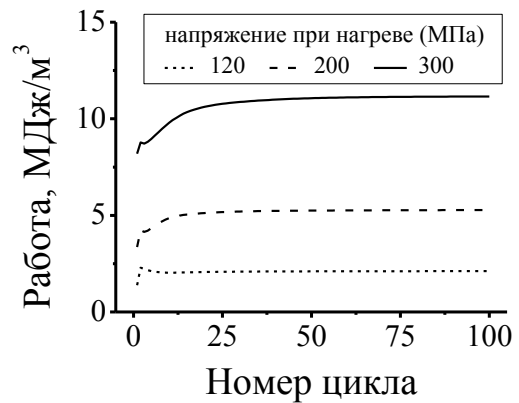


Рисунок 4 - Зависимости удельной механической работы в цикле от номера цикла для различных напряжений при нагреве в мягком режиме.

В главе 4, состоящей из трех подразделов, в модель введен критерий разрушения; описана процедура подбора значений материальных постоянных, используемых для расчета разрушения; приведены данные расчетов числа циклов до разрушения при различных циклических воздействиях.

В подразделе 4.1 обоснован критерий разрушения, учитывающий, влияние действующего напряжения, плотностей деформационных дефектов и поврежденности материала. Повреждение материала происходит за счет образования и развития пор, нано- и микротрещин. Для описания повреждений материала введено понятие дефектности материала. В данной работе принято, что дефектность материала в зерне p , пропорциональна суммарной микропластической деформации этого зерна:

$$\dot{p} = B \sum_{m=1}^N |\dot{\epsilon}_m^{mp}|,$$

где B – материальная постоянная, учитывающая развитие дефектности при микропластической деформации.

Критерий разрушения на микроуровне, связанный с n -ым вариантом мартенсита, имеет вид:

$$k_1 \frac{tr(\sigma)}{3} + (1 + k_2 |b_n|) T_\sigma = \frac{\tau_F}{1 + p},$$

где $tr(\sigma)$ и T_σ – след тензора напряжений и интенсивность касательных напряжений; τ_F – предел прочности материала на сдвиг; k_1, k_2 – материальные постоянные. Этот критерий подобен критерию Шлейхера – Надаи, учитывающему влияние на разрушение среднего давления и интенсивности касательных напряжений. Постоянная k_1 отвечает за силу влияния среднего давления на процесс разрушения. Скопления ориентированных дефектов, описываемые плотностью b_n , выступают как концентраторы напряжения. Постоянная k_2 определяет масштаб влияния ориентированных дефектов на разрушение. Дефектность p ослабляет материал, снижая его предел прочности.

Величина $\tau_F/(1+p)$ является эффективным пределом прочности: в отсутствии дефектности ($p=0$) оно равно значению параметра τ_F , а при ее увеличении снижается.

В качестве условия разрушения зерна принято выполнение критерия разрушения на микроуровне для одного из вариантов мартенсита этого зерна. Представительный объем считается разрушенным, если разрушилось хотя бы одно из его зерен. Таким образом, представительный объем разрушается при выполнении критерия разрушения на микроуровне для хотя бы одного варианта мартенсита в хотя бы одном из его зерен.

В **подразделе 4.2** описана методика подбора материальных постоянных k_1 , k_2 , B , используемых при описании разрушения.

В **подразделе 4.3** приведены результаты моделирования разрушения сплава никелида титана при различных циклических термомеханических воздействиях. Получена зависимость числа циклов до разрушения от напряжения при термоциклировании под постоянным растягивающим напряжением, которая хорошо совпадает с имеющимися экспериментальными данными (рисунок 5 (а)). Близость расчетной зависимости на рисунке 5 (а) к прямой линии в полулогарифмических координатах позволяет сделать вывод об экспоненциальной зависимости числа циклов до разрушения от величины приложенного напряжения при термоциклировании.

Кроме этого, производилось описание разрушения при механоциклировании. Выполнено моделирование разрушения при циклическом растяжении-сжатии до различных значений деформации. Расчетные и экспериментальные значения числа циклов до разрушения в зависимости от значения максимальной деформации показаны на рисунке 5 (б). Сделан расчет числа циклов до разрушения для цикла: растяжение до фиксированной деформации – разгрузка. Расчетная зависимость числа циклов до разрушения от значения максимальной деформации в сравнении с экспериментальными данными приведена на рисунке 5 (в). Расчетные зависимости на рисунках 5 (б) и (в) в двойных логарифмических координатах близки к прямым линиям, что позволяет судить о степенной зависимости числа циклов до разрушения от максимальной деформации при механоциклировании в псевдоупругом режиме.

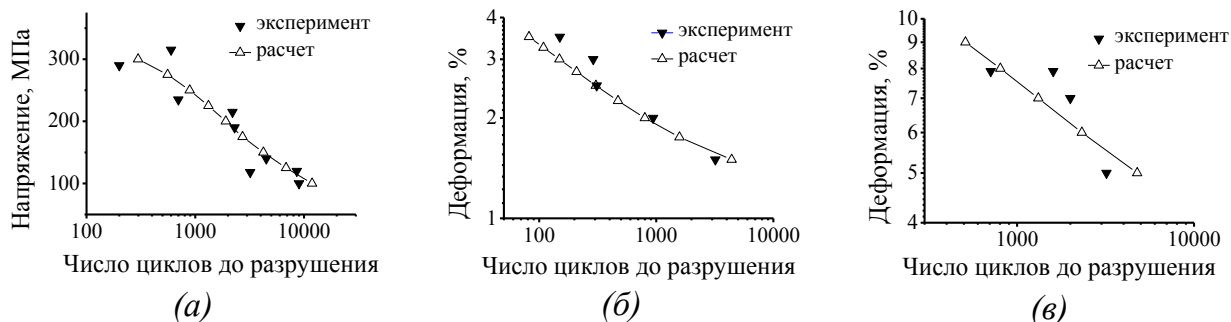


Рисунок 5 - Число циклов до разрушения при термоциклировании под различными напряжениями расчет и эксперимент (Беляев С.П. и др., 1987) (а); при циклическом двустороннем деформировании расчет и эксперимент (S. Miyazaki et al., 1999) (б); при циклическом деформировании до фиксированной деформации расчет и эксперимент (Андреев В.А. и др., 2007)(в).

Рисунок 5 показывает, что построенная модель с деформационно-силовым критерием разрушения дает хорошее соответствие расчетных результатов и экспериментальных данных при описании малоциклового усталостного разрушения сплавов с памятью формы.

Было произведено моделирование работы до разрушения элемента из никелида титана в условиях мягкого цикла. Для ряда экспериментов с одинаковыми напряжениями при охлаждении, равными 50 МПа и различными напряжениями при нагреве было рассчитано число циклов до разрушения. Полученная зависимость числа циклов до разрушения от напряжения при нагреве представлена на рисунке 6. Из этого рисунка видно, что расчетная зависимость близка к прямой линии в полулогарифмических координатах, что позволяет сделать вывод об экспоненциальной зависимости числа циклов до разрушения от величины напряжения, приложенного при нагреве.

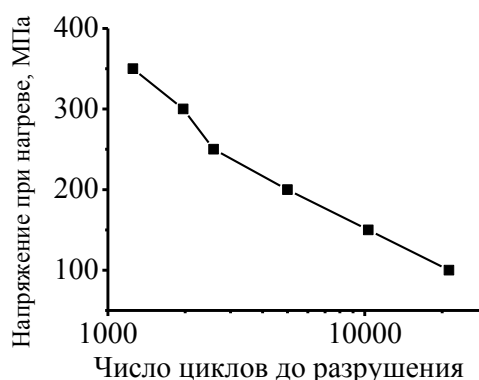


Рисунок 6 – Число циклов до разрушения при работе в условиях мягкого цикла в зависимости от напряжения при нагреве.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения диссертационной работы достигнута поставленная цель, сделаны следующие выводы и получены следующие основные результаты.

Разработана микроструктурная модель сплавов с памятью формы, позволяющая рассчитывать обратимую фазовую и необратимую микропластическую деформацию, прогнозировать усталостную долговечность этих материалов. Выполненные с ее помощью расчеты показали, что:

1. Предложенный способ учета энергии взаимодействия бейновских вариантов мартенсита в модели и полученная матрица взаимодействия позволяют описывать формирование согласованных пар вариантов мартенсита в никелиде титана. Показано, что чем больше энергия взаимодействия вариантов, тем меньше обратимая фазовая деформация.
2. Расчет микропластической деформации с учетом деформационных дефектов, отвечающих за изотропное и трансляционное упрочнение, позволяет для циклических термомеханических воздействий описывать зависимость необратимой деформации за один цикл от номера цикла. Расчеты показывают, что при различных приложенных напряжениях эта зависимость хорошо аппроксимируется убывающей экспонентой.
3. Разработанная модель с включенным в нее деформационно-силовым критерием разрушения позволяет получать хорошую оценку долговечности элементов из сплавов с памятью формы при различных циклических термомеханических воздействиях, согласующуюся с известными

экспериментами на никелиде титана. При термоциклировании под постоянным напряжением число циклов до разрушения экспоненциально зависит от величины приложенного напряжения. При циклическом деформировании СПФ в аустенитном состоянии зависимость числа циклов до разрушения от амплитуды деформации близка к степенной в том случае, когда эта амплитуда достаточна для развития псевдоупругости.

4. Расчет удельной механической работы, производимой никелидом титана в мягком рабочем цикле, показывает, что эта работа возрастает в продолжение 20-30 циклов после чего стабилизируется. При одинаковом напряжении, действующем при охлаждении, число циклов до разрушения экспоненциально зависит от напряжения, действующего при нагреве. При удельной работе за цикл 3 МДж/м³ разрушение достигается при более чем 10⁴ циклов.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК:

1. Беляев Ф.С., Волков А.Е., Евард М.Е. Микроструктурное моделирование обратимой и необратимой деформации при циклическом термомеханическом нагружении никелида титана // Вестник Тамбовского университета. Сер. Естественные и технические науки. - Тамбов, 2013. - Т. 18. - № 4. - С. 2025-2026.
2. Belyaev F.S., Volkov A.E., Evard M.E., Volkova N.A. A Microstructural model of SMA with Microplastic Deformation and Defects Accumulation: Application to Thermocyclic Loading // MaterialsToday: Proceedings, Volume 2, Supplement 3, 2015, P. S583–S587. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.matpr.2015.07.352>
3. Беляев Ф.С., Волков А.Е. Влияние взаимодействия вариантов мартенсита на обратимую фазовую деформацию в сплавах с памятью формы // Механика композиционных материалов и конструкций. - 2015. - Т. 21. - № 2. - С. 190-196.
4. 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 // MATEC Web of Conferences. 2015. V. 33. art. 03013. 5p. DOI: <http://dx.doi.org/10.1051/matecconf/20153303013>

Статьи в других изданиях

5. Беляев Ф.С., Волков А.Е., Евард М.Е. Микроструктурное моделирование деформационных эффектов в сплаве с памятью формы при двухкомпонентном напряженном состоянии // Тезисы докладов 54 международной конференции "Актуальные проблемы прочности". - Екатеринбург, 2013. - С. 182.
6. Беляев Ф.С. Влияние взаимодействия вариантов мартенсита на обратимую и необратимую деформацию в сплавах с памятью формы // Тезисы докладов Международной научной конференции по механике "Седьмые Поляховские чтения". - М.: Издатель И.В. Балабанов, 2015. - С. 157.

7. Belyaev F.S., Volkov A.E., Evard M.E. Modeling of deformation and functional properties of shape memory alloys based on a microstructural approach // Shape Memory Alloys: Properties, Technologies, Opportunities. / Resnina N.N., Rubanik V.V. (eds.). Pfaffikon, Switzerland: Trans Tech Publications Ltd, 2015. pp. 20-37.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 16-31-00216 и грант №15-01-07657 и при финансовой поддержке Правительства РФ, программа мегагрантов (грант № 14.B25.31.0017).