Роговой А. А., Столбова О. С.

A. A. Rogovoi, O. S. Stolbova

КОНЕЧНЫЕ ДЕФОРМАЦИИ В СПЛАВАХ И ПОЛИМЕРАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

FINAL DEFORMATIONS IN ALLOYS AND POLYMERS WITH MEMORY OF THE SHAPE

Роговой Анатолий Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией нелинейной механики деформируемого твёрдого тела Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук (Россия, Пермь); 614013, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1; тел.: + 7 (342) 237-84-61. E-mail: rogovoy@icmm.ru.

Mr. Anatoliy A. Rogovoi – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Head of the Laboratory of Nonlinear Mechanics of Solids, Institute of Continuous Media Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (Russia, Perm); 614013, Perm, 1 Academician Korolev str.; tel.: + 7 (342) 237-84-61. E-mail: rogovoy@icmm.ru.

Столбова Ольга Серафимовна – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории нелинейной механики деформируемого твёрдого тела Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук (Россия, Пермь); 614013, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1; тел.: + 7 (342) 237-84-61. E-mail: sos@icmm.ru.

Ms. Olga S. Stolbova – Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Research Fellow, Institute of Continuous Media Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (Russia, Perm); 614013, Perm, 1 Academician Korolev str.; tel.: + 7 (342) 237-84-61. E-mail: sos@icmm.ru.

Аннотация. В рамках больших деформаций предлагаются математические модели поведения сплавов, ферромагнитных материалов и полимеров с памятью форм, кинетические и определяющие уравнения которых удовлетворяют принципам объективности и термодинамики. Приведена вариационная формулировка краевых задач. Соотношения модели иллюстрируются решением задач о конечных деформациях простейших конструкций при прямом и обратном аустенитно-мартенситном фазовом переходе в сплавах и ферросплавных материалах с памятью формы и релаксационном переходе из высокоэластичного состояния в застеклованное в полимерах с памятью форм.

Summary. Within the framework of large deformations, mathematical models of the behavior of alloys, ferromagnetic materials and polymers with shape memory are proposed, the kinetic and determining equations of which satisfy the principles of objectivity and thermodynamics. A variation formulation of boundary value problems is given. The model relationships are illustrated by the solution of problems on finite deformations of the simplest structures with a direct and inverse austenitic martensitic phase transition in alloys and ferroalloy materials with shape memory and a relaxation transition from a highly elastic state to vitrified in polymers with shape memory.

Ключевые слова: конечные деформации, определяющие уравнения, память формы, фазовый переход, релаксационный переход, сплавы, полимеры, перестройка структуры, кристаллическая решётка, функция отклика материала.

Key words: finite deformations, determining equations, shape memory, phase transition, relaxation transition, alloys, polymers, structure rearrangement, crystal lattice, material response function.

УДК 539.3

Сплавы и полимеры, в которых наблюдается эффект памяти формы, относятся к классу функциональных материалов. Такие материалы могут контролируемым образом изменять свои свойства в ответ на воздействие различных внешних полей, например: температурного, электрического или магнитного. Эффект памяти формы (ЭПФ) связан с перестройкой структуры, происходящей в материале при изменении инициирующих полей в определённой области, причём новая структура, возникшая при изменении поля в одном направлении (прямой переход), возвращается к своему прообразу при обратном изменении поля (обратный переход).

Механизмы возникновения новой структуры у разных материалов могут быть разными. В сплавах с памятью формы (СПФ) под действием температурных и (или) силовых полей преобразуется кристаллическая решётка, что приводит к дополнительным фазовым деформациям [10].

В ферромагнитных сплавах с памятью формы (ФСФ) (сплавы Гейслера) преобразование кристаллической решётки может происходить также при приложении магнитного поля [1]. В полимерах с памятью формы (ППФ) в процессе релаксационного перехода из высокоэластичного состояния в застеклованное (охлаждение материала) деформация, имеющаяся в высокоэластичной фазе, «замораживается» в момент перехода, и деформации, возникающие в застеклованной фазе при дальнейшем деформировании, накладываются на эти «замороженные». При нагревании последние постепенно «размораживаются» [11].

Для описания поведения сплавов и полимеров с памятью формы используется подход, представленный в работе [12]. В рамках данного подхода строятся корректные соотношения, удовлетворяющие принципам термодинамики и объективности, позволяющие описать поведение сложных сред в рамках конечных деформаций. Основная идея подхода состоит в том, что рассматриваемый упруго-неупругий процесс трактуется как упругий с напряжённой отсчётной конфигурацией. В качестве последней принимается промежуточная упругая конфигурация κ_* , близкая к текущей κ и получающаяся из последней при малой упругой разгрузке. Формализацией указанной близости является введение малого положительного параметра ε у вектора перемещения $\mathbf{u}$, определяющего положение точек в текущей конфигурации по отношению к промежуточной. Это позволяет представить все кинематические величины в виде рядов по этому малому параметру с удержанием только линейных слагаемых и, в результате, построить для любого закона упругости определяющие уравнения с начальными напряжениями и функциями отклика материала на малые упругие деформации относительно промежуточной конфигурации.

1. Основные соотношения при конечных деформациях

В соответствии с рассматриваемым подходом градиент места в текущем состоянии $\mathbf{F}$ запишется через градиент места относительно промежуточной конфигурации $\mathbf{F}_*$ в виде $\mathbf{F} = (\mathbf{g} + \varepsilon \mathbf{h}) \cdot \mathbf{F}_*$, где $\mathbf{h} = (\nabla_* \mathbf{u})^T$ – градиент вектора перемещений $\mathbf{u}$ из промежуточной конфигурации κ_* в близкую текущую κ ; ∇_* – оператор Гамильтона в промежуточной конфигурации; $\mathbf{g}$ – единичный тензор. Тогда мера $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$ и тензор $\mathbf{E} = (\mathbf{C} - \mathbf{g})/2$ деформации Коши – Грина относительно конфигурации κ_* запишутся следующим образом:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_* + 2\varepsilon \mathbf{F}_*^T \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{F}_* \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_* + \varepsilon \mathbf{F}_*^T \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{F}_* = \mathbf{E}_* + \Delta \mathbf{E}, \quad (1)$$

где $\mathbf{e} = (\mathbf{h} + \mathbf{h}^T)/2$ – тензор малых деформаций относительно промежуточной конфигурации. В результате предельного перехода при стремлении промежуточной конфигурации к текущей ($\kappa_* \rightarrow \kappa$) из соотношений (1) следует, что

$$\dot{\mathbf{C}} = 2 \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{F}, \quad \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{F},$$

где $\mathbf{D}$ – тензор деформации скорости, совпадающий в данном случае с тензором скорости деформаций $\mathbf{D} = \dot{\mathbf{e}}$. Отметим, что $\dot{\mathbf{C}} = 2 \dot{\mathbf{E}}$.

Определяющее уравнение для простого материала, удовлетворяющего принципу объективности [2], может быть представлено в нескольких эквивалентных формах. В данной работе удобнее всего использовать следующую форму: $\mathbf{T} = J^{-1} \mathbf{F} \cdot \tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{C}_E, \Theta) \cdot \mathbf{F}^T$. Поскольку $\tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{C}_E, \Theta)$ – функция отклика материала на упругую деформацию $\mathbf{C}_E = \mathbf{F}_E^T \cdot \mathbf{F}_E$ – совпадает со вторым (симметричным) тензором напряжений Пиола – Кирхгоффа ($\tilde{\mathbf{g}} \equiv \mathbf{P}_{II}$), который, в свою очередь, в теории упругости определяется через упругий потенциал $W(\mathbf{C}_E)$: $\mathbf{P}_{II} = 2(\partial W / \partial \mathbf{C}_E)$; $\mathbf{T}$ – тензор истинных напряжений; $J = I_3(\mathbf{F})$ – третий инвариант градиента места $\mathbf{F}$; Θ – абсолютная температура.

Относительно промежуточной конфигурации с точностью до линейных по ε слагаемых имеем

$$\mathbf{P}_{\Pi} = \tilde{\mathbf{P}}_{\Pi*} + \tilde{\mathbf{L}}_*^{\text{IV}} \cdot \Delta \mathbf{E}_E = \mathbf{P}_{\Pi*} + \mathbf{L}_*^{\text{IV}} \cdot \Delta \mathbf{e}_E, \quad (2)$$

где $\tilde{\mathbf{L}}_*^{\text{IV}}$ и $\mathbf{L}_*^{\text{IV}}$ – тензоры четвёртого ранга, определяющие отклик материала на приращение упругих деформаций, которые можно получить, задавая упругий потенциал $W(\mathbf{C}_E)$:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{L}}_*^{\text{IV}} &= 4 \frac{\partial^2 W(\mathbf{C}_E, \Theta_*)}{\partial \mathbf{C}_E^2} \bigg|_{\mathbf{C}_E = \mathbf{C}_{E*}} = 2 \frac{\partial \mathbf{P}_{\Pi}(\mathbf{C}_E, \Theta_*)}{\partial \mathbf{C}_E} \bigg|_{\mathbf{C}_E = \mathbf{C}_{E*}}, \\ \mathbf{L}_*^{\text{IV}} &= 4 \mathbf{F}_*^{\circ} \frac{\partial^2 W(\mathbf{C}_E, \Theta_*)}{\partial \mathbf{C}_E^2} \bigg|_{\mathbf{C}_E = \mathbf{C}_{E*}} \cdot \mathbf{F}_*^T = 2 \mathbf{F}_*^{\circ} \frac{\partial \mathbf{P}_{\Pi}(\mathbf{C}_E, \Theta_*)}{\partial \mathbf{C}_E^2} \bigg|_{\mathbf{C}_E = \mathbf{C}_{E*}} \cdot \mathbf{F}_*^T, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\circ$ – позиционное скалярное умножение тензора второго ранга слева на третий базисный вектор тензора четвёртого ранга [3].

В результате предельного перехода $\kappa_* \rightarrow \kappa$ в соотношении (2) получаем $\dot{\mathbf{P}}_{\Pi} = \tilde{\mathbf{L}}_*^{\text{IV}} \cdot \dot{\mathbf{E}}_E = \mathbf{L}_*^{\text{IV}} \cdot \dot{\mathbf{D}}_E$.

2. Кинематика фазового и релаксационного переходов

Для описания фазового перехода в СПФ и ФСПФ вводится скалярная внутренняя переменная φ_M – объёмная доля мартенситной фазы в материале, которая изменяется от 0 в полностью аустенитном (высокотемпературном) состоянии до 1 в полностью мартенситном (низкотемпературном) состоянии. Для релаксационного перехода в ППФ в качестве внутреннего параметра выступает φ_g – степень стеклования ($\varphi_g = 0$ – в высокоэластичном/высокотемпературном состоянии; $\varphi_g = 1$ – в застеклованном/низкотемпературном состоянии).

На рис. 1 представлены типовые диаграммы фазового (см. рис. 1, а) и релаксационного (см. рис. 1, б) переходов. Необходимо отметить, что прямой и обратный фазовые переходы осуществляются при различных температурах: интервал температур $M_s \rightarrow M_f$ соответствует переходу «аустенит – мартенсит»; интервал температур $A_s \rightarrow A_f$ соответствует переходу «мартенсит – аустенит». При этом в нагруженном материале происходит сдвиг критических температур. График зависимости степени стеклования от температуры при прямом и обратном релаксационных переходах имеет единый вид. Значение $\Theta_l \leq \Theta \leq \Theta_h$ определяет переходную область между застеклованным состоянием (при температуре ниже Θ_l) и высокоэластичным (при температуре выше Θ_h), а Θ_g – характеристическая температура стеклования.

а)

б)

Рис. 1. Зависимости от температуры: а – объёмной доли мартенситной фазы; б – степени стеклования

Зависимость φ_M от Θ может быть аппроксимирована различными соотношениями. Так, в работе А. А. Мовчана [4]

$$\varphi_M(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi \leq 0; \\ 0,5(1 - \cos(\pi \xi)), & 0 < \xi < 1; \\ 1, & \xi \geq 0. \end{cases} \quad \begin{aligned} \xi &= \frac{M_s^\sigma - \Theta}{M_s^\sigma - M_f^\sigma}, \quad M_f^\sigma \leq \Theta \leq M_s^\sigma \quad (d\varphi_M > 0); \\ \xi &= 1 + \frac{A_s^\sigma - \Theta}{A_f^\sigma - A_s^\sigma}, \quad A_s^\sigma \leq \Theta \leq A_f^\sigma \quad (d\varphi_M < 0). \end{aligned}$$

Здесь M_s, M_f, A_s, A_f – температуры начала и завершения прямого и обратного мартенситных превращений в свободном от напряжений материале; $M_s^\sigma, M_f^\sigma, A_s^\sigma, A_f^\sigma$ – эти же температуры в нагруженном материале и (или) в приложенном магнитном поле.

В некоторых случаях удобнее использовать соотношение, предложенное в работе Г. А. Малыгина [5]: $\varphi_M(\Theta) = \left(1 + \exp\left(B \frac{\Theta - \Theta_C}{\Theta_C} \right) \right)^{-1}$, где $\Theta_C = M_C = (M_s + M_f)/2$ – для прямого мартенситного превращения; $\Theta_C = A_C = (A_s + A_f)/2$ – для обратного; B – параметр, определяющий размытие перехода по температуре.

Если фазовый переход происходит в нагруженном материале и (или) в магнитном поле, характерные температуры фазового перехода сдвигаются согласно соотношению Клаузиуса – Клапейрона [13]: $\Theta_C = \Theta_{C0} + \frac{\Theta_{C0}}{[q]} (P_{II} \cdot [E_{ph}] + \mu_0 H \cdot [M])$.

Здесь H – вектор напряжённости магнитного поля; $[E_{ph}]$, $[M]$ и $[q]$ – изменение фазовых деформаций, намагниченности и выделившееся (поглощённое) тепло в процессе фазового перехода; μ_0 – магнитная постоянная.

Зависимость φ_g от Θ аппроксимируется следующим соотношением [14]:

$$\varphi_g(\Theta) = 1 - 1 / (1 + a(\Theta_h - \Theta)^4). \quad (4)$$

Возможен вариант аппроксимации, предложенный в работе [15]:

$$\varphi_g(\Theta) = \frac{\tanh((\Theta_h - \Theta_g)/b) - \tanh((\Theta - \Theta_g)/b)}{\tanh((\Theta_h - \Theta_g)/b) - \tanh((\Theta_l - \Theta_g)/b)}. \quad (5)$$

В соотношениях (4) и (5) a и b – параметры материала.

Поскольку в СПФ и ФСПФ имеет место фазовый переход «аустенит – мартенсит», определим кинематику процесса градиентами места F_A для аустенитной фазы и F_M для мартенситной, тогда $C_A = F_A^T \cdot F_A$, $C_M = F_M^T \cdot F_M$, $E_A = (C_A - g)/2$, $E_M = (C_M - g)/2$. Кинематическое соотношение может быть представлено в следующем виде [13]:

$$\dot{E} = (\varphi_A E_A)^\bullet + (\varphi_M E_M)^\bullet + \dot{E}_{ph} + \dot{E}_p + \dot{E}_\Theta, \quad (6)$$

где $\varphi_A = 1 - \varphi_M$ – объёмная доля аустенитной фазы в материале (отметим, что $\dot{\varphi}_A = -\dot{\varphi}_M$), а $\dot{E}_{ph}$, $\dot{E}_p$ и $\dot{E}_\Theta$ – скорости изменения фазовых, пластических и температурных деформаций.

Скорость изменения фазовых деформаций зададим, обобщая соотношения, предложенные в работе [4] для малых деформаций, на случай конечных.

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{E}}_{Ph} &= \tilde{\mathbf{E}}_{Ph} \dot{\phi}_M = (a\mathbf{g} + b\tilde{\mathbf{P}}_{II} + c\mathbf{E}_{Ph}) \dot{\phi}_M, \quad \dot{\phi}_M > 0; \\ \dot{\mathbf{E}}_{Ph} &= \tilde{\mathbf{E}}_{Ph} \dot{\phi}_M = \left(\frac{c\mathbf{E}_{Ph}^{(0)}}{\exp(c\phi_M^{(0)}) - 1} + c\mathbf{E}_{Ph} \right) \dot{\phi}_M, \quad \dot{\phi}_M < 0.\end{aligned}\quad (7)$$

Здесь a, b, c – параметры материала; $\tilde{\mathbf{P}}_{II}$ – девиатор тензора $\mathbf{P}_{II}$; $\phi_M^{(0)}$ и $\mathbf{E}_{ph}^{(0)}$ – значения параметра мартенситной фазы и фазовой деформации в начальной точке процесса обратного превращения.

Скорости изменения пластических и температурных деформаций зададим в следующем виде:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{E}}_p &= 3\dot{\sigma}_i / (2H\sigma_i) (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}), \quad \sigma_i \geq \sigma_T; \\ \dot{\mathbf{E}}_\Theta &= \alpha \dot{\Theta} \mathbf{C} = \alpha \dot{\Theta} (2\mathbf{E} + \mathbf{g}),\end{aligned}\quad (8)$$

где $\mathbf{S}$ – девиатор тензора истинных напряжений $\mathbf{T}$; σ_i – интенсивность напряжений; σ_T – предел текучести; H – модуль пластического упрочнения; α – коэффициент линейного теплового расширения.

Для ППФ кинематику процесса определим градиентами места $\mathbf{F}_r$ в высокоэластичном состоянии и $\mathbf{F}_g$ в застеклованном. В этом случае $\mathbf{C}_r = \mathbf{F}_r^T \cdot \mathbf{F}_r$, $\mathbf{C}_g = \mathbf{F}_g^T \cdot \mathbf{F}_g$, $\mathbf{E}_r = (\mathbf{C}_r - \mathbf{g}) / 2$, $\mathbf{E}_g = (\mathbf{C}_g - \mathbf{g}) / 2$ и кинематическое соотношение представляется в виде [6]

$$\dot{\mathbf{E}} = (\phi_r \mathbf{E}_r)^\bullet + (\phi_g \mathbf{E}_g)^\bullet + \dot{\mathbf{E}}_f + \phi_g \dot{\mathbf{E}}_v + \dot{\mathbf{E}}_\Theta, \quad (9)$$

где $\phi_r = 1 - \phi_g$ – объёмная доля высокотемпературной фазы в процессе стеклования (отметим, что $\dot{\phi}_r = -\dot{\phi}_g$); $\dot{\mathbf{E}}_f$ – скорость «замораживания» высокоэластичных деформаций в процессе стеклования и «размораживания» в процессе расстекловывания; $\dot{\mathbf{E}}_v$ – скорость изменения вязких деформаций (вязкое поведение учитывается только в застеклованном состоянии).

Следуя [5], определим $\dot{\mathbf{E}}_f$ следующим соотношением:

$$\dot{\mathbf{E}}_f = \tilde{\mathbf{E}}_f \dot{\phi}_g = \begin{cases} \dot{\phi}_g \mathbf{E}_r, & \dot{\Theta} < 0; \\ (\dot{\phi}_g / \phi_g) \mathbf{E}_f, & \dot{\Theta} > 0; \\ \mathbf{0}, & \dot{\Theta} = 0. \end{cases}$$

Скорость изменения вязких деформаций зададим в виде $\dot{\mathbf{E}}_v = \eta^{-1} (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{F})$, где η – коэффициент вязкости.

3. Термодинамические соотношения

Определим требования, которые накладывает термодинамика на рассматриваемые процессы. Представим свободную энергию Ψ для материалов с памятью формы в виде суммы свободных энергий аустенитной и мартенситной фаз (Ψ_A и Ψ_M) или высокоэластичного и застеклованного состояний (Ψ_r и Ψ_g) со своими весовыми коэффициентами, температурной Ψ_Θ и магнитной Ψ_{Mg} энергиями:

а) для СПФ – $\Psi = \phi_M(\Theta)\Psi_M(\mathbf{C}_M) + \phi_A(\Theta)\Psi_A(\mathbf{C}_A) + \Psi_\Theta(\Theta);$

б) для ФСПФ – $\Psi = \phi_M(\Theta)\Psi_M(\mathbf{C}_M) + \phi_A(\Theta)\Psi_A(\mathbf{C}_A) + \Psi_\Theta(\Theta) + \Psi_{Mg}(\mathbf{M}(\Theta));$

в) для ППФ – $\Psi = \varphi_r(\Theta)\Psi_r(C_r) + \varphi_g(\Theta)\Psi_g(C_g) + \Psi_\Theta(\Theta)$.

Неравенство Клаузиуса – Дюгема может быть записано в виде

$$\begin{aligned} P_{II} \cdot \dot{E} - \rho_0 (\dot{\Psi} + \dot{\Theta} s) - Jq \cdot \tilde{\nabla} \ln \Theta &\geq 0 \quad \text{– для СПФ и ППФ;} \\ P_{II} \cdot \dot{E} - \rho_0 (\dot{\Psi} + \dot{\Theta} s) - \mu_0 H \cdot \dot{M} - Jq \cdot \tilde{\nabla} \ln \Theta &\geq 0 \quad \text{– для ФСПФ.} \end{aligned}$$

Здесь s – энтропия; q – вектор теплового потока; ρ_0 – плотность массы в начальной конфигурации; $\tilde{\nabla}$ – оператор Гамильтона в текущей конфигурации.

Подставляя выражение для свободной энергии в неравенство Клаузиуса – Дюгема и принимая во внимание соотношения (6), (8) и (9), получим

а) для СПФ:

$$\begin{aligned} P_{II} \cdot & \left(\dot{\varphi}_M (E_M - E_A) + \varphi_M \dot{E}_M + (1 - \varphi_M) \dot{E}_A + \dot{E}_{Ph} + \dot{E}_P + \alpha \dot{\Theta} (2E + g) \right) - \\ & - \rho_0 \left(\dot{\varphi}_M (\Psi_M - \Psi_A) + 2\varphi_M (\partial \Psi_M / \partial C_M) \cdot \dot{E}_M + 2(1 - \varphi_M) (\partial \Psi_A / \partial C_A) \cdot \dot{E}_A + \dot{\Psi}_\Theta + \dot{\Theta} s \right) - \\ & - Jq \cdot \tilde{\nabla} \ln \Theta \geq 0, \end{aligned}$$

откуда, применяя процедуру линейного локального продолжения процесса по переменным E_A , E_M и Θ , следует, что

$$\begin{aligned} P_{II} &= 2\rho_0 (\partial \Psi_M / \partial C_M) = 2\rho_0 (\partial \Psi_A / \partial C_A), \\ \rho_0 s &= P_{II} \cdot \left[(E_M - E_A + \tilde{E}_{Ph}) \varphi'_M + \alpha (2E + g) \right] - \rho_0 (\Psi_M - \Psi_A) \varphi'_M - \rho_0 \Psi'_\Theta. \end{aligned}$$

Здесь $\varphi'_M = (\partial \varphi_M / \partial \Theta)$, $\Psi'_\Theta = (\partial \Psi_\Theta / \partial \Theta)$.

б) для ФСПФ:

$$\begin{aligned} P_{II} \cdot & \left(\dot{\varphi}_M (E_M - E_A) + \varphi_M \dot{E}_M + (1 - \varphi_M) \dot{E}_A + \dot{E}_{Ph} + \dot{E}_P + \alpha \dot{\Theta} (2E + g) \right) - \\ & - \rho_0 \left(\dot{\varphi}_M (\Psi_M - \Psi_A) + 2\varphi_M (\partial \Psi_M / \partial C_M) \cdot \dot{E}_M + 2(1 - \varphi_M) (\partial \Psi_A / \partial C_A) \cdot \dot{E}_A + \right. \\ & \left. + (\partial \Psi_{Mg} / \partial M) \cdot \dot{M} + (\partial \Psi_{Mg} / \partial M) \cdot (\partial M / \partial \Theta) \dot{\Theta} + \dot{\Psi}_\Theta + \dot{\Theta} s \right) - \mu_0 H \cdot \dot{M} - Jq \cdot \tilde{\nabla} \ln \Theta \geq 0, \end{aligned}$$

откуда, применяя процедуру линейного локального продолжения процесса по переменным E_A , E_M , и Θ , следует, что

$$\begin{aligned} P_{II} &= 2\rho_0 (\partial \Psi_M / \partial C_M) = 2\rho_0 (\partial \Psi_A / \partial C_A), \quad \mu_0 H = -\rho_0 (\partial \Psi_{Mg} / \partial M), \\ \rho_0 s &= P_{II} \cdot \left[(E_M - E_A + \tilde{E}_{Ph}) \varphi'_M + \alpha (2E + g) \right] - \rho_0 (\Psi_M - \Psi_A) \varphi'_M - \rho_0 \Psi'_\Theta + \mu_0 (\partial M / \partial \Theta) H. \end{aligned}$$

Из последнего соотношения видно, что энтропия зависит и от магнитного поля. Обозначим $s_M = \mu_0 / \rho_0 (\partial M / \partial \Theta) H$.

в) для ППФ:

$$\begin{aligned} P_{II} \cdot & \left(\dot{\varphi}_g (E_g - E_r) + \varphi_g \dot{E}_g + (1 - \varphi_g) \dot{E}_r + \dot{E}_f + \varphi_g \dot{E}_V + \alpha \dot{\Theta} (2E + g) \right) - \\ & - \rho_0 \left(\dot{\varphi}_g (\Psi_g - \Psi_r) + 2\varphi_g (\partial \Psi_g / \partial C_g) \cdot \dot{E}_g + 2(1 - \varphi_g) (\partial \Psi_r / \partial C_r) \cdot \dot{E}_r + \dot{\Psi}_\Theta + \dot{\Theta} s \right) - \\ & - Jq \cdot \tilde{\nabla} \ln \Theta \geq 0, \end{aligned}$$

откуда при применении процедуры линейного локального продолжения процесса по переменным E_r , E_g и Θ следует, что

$$P_{II} = 2\rho_0(\partial \Psi_g / \partial C_g) = 2\rho_0(\partial \Psi_r / \partial C_r),$$

$$\rho_0 s = P_{II} \cdot [(E_g - E_r + \tilde{E}_f) \phi'_M + \alpha(2E + g)] - \rho_0(\Psi_g - \Psi_r) \phi'_g - \rho_0 \Psi'_\Theta.$$

Таким образом, в результате термодинамического анализа получены соотношения для энтропии и следующие равенства: $P_{IIA} = P_{IIM} = P_{II}$ (для СПФ и ФСПФ); $P_{IIR} = P_{IIg} = P_{II}$ (для ППФ), в которых $P_{IIA} = 2\rho_0(\partial \Psi_A / \partial C_A)$, $P_{IIM} = 2\rho_0(\partial \Psi_M / \partial C_M)$, $P_{IIR} = 2\rho_0(\partial \Psi_r / \partial C_r)$, $P_{IIg} = 2\rho_0(\partial \Psi_g / \partial C_g)$.

4. Конкретизация определяющих соотношений

Для описания упругого поведения СПФ и ФСПФ (для аустенитной и мартенситной фаз) воспользуемся упрощённым законом Синьорины [7]:

$$P_{II\gamma} = J(C_\gamma) [(k_{1\gamma} + k_{2\gamma}) C_\gamma^{-1} - 2k_{2\gamma} C_\gamma^{-2}], \quad \gamma = A, M,$$

$$k_{1\gamma} = \frac{\Lambda_\gamma}{2} [3 - I_1(C_\gamma^{-1})] + \frac{\Lambda_\gamma + G_\gamma}{8} [3 - I_1(C_\gamma^{-1})]^2, \quad k_{2\gamma} = G_\gamma - \frac{\Lambda_\gamma + G_\gamma}{2} [3 - I_1(C_\gamma^{-1})],$$

где Λ_γ и G_γ – параметры материала, имеющие смысл параметра Ламе и модуля сдвига линейной теории упругости; I_1 – первый главный инвариант соответствующего тензора. Тогда, согласно соотношениям (3), получаем

$$\tilde{L}_\gamma^{IV} = J(C_\gamma) \left\{ (k_{1\gamma} + k_{2\gamma}) C_\gamma^{-1} C_\gamma^{-1} - k_{2\gamma} C_\gamma^{-1} C_\gamma^{-2} + (\Lambda_\gamma + G_\gamma - 2k_{2\gamma}) C_\gamma^{-2} C_\gamma^{-1} - \right.$$

$$\left. - 2(k_{1\gamma} + k_{2\gamma}) C_\gamma^{-1} \cdot C_\gamma^{-2} + 4k_{2\gamma} \left[\left(C_\gamma^{-1} \cdot C_\gamma^{-2} \right)^2 C_\gamma^{-1} + C_\gamma^{-1} \cdot \left(C_\gamma^{-1} \cdot C_\gamma^{-2} \right) \right] \right\},$$

где $\cdot$ – позиционное скалярное умножение тензора второго ранга справа на второй базисный вектор тензора четвёртого ранга [3]; C_{II} – второй изотропный тензор четвёртого ранга [3; 7].

В качестве упругого потенциала как для высокоэластичного, так и для застеклованного состояния в ППФ взят потенциал Пенга – Ландела:

$$W_\gamma = \frac{1}{2} G_\gamma (I_1(C_\gamma) J^{-2/3}(C_\gamma) - 3) + \frac{1}{2} B_\gamma (J(C_\gamma) - 1)^2, \quad \gamma = r, g,$$

где B_γ и G_γ – параметры материала, имеющие смысл объёмного модуля и модуля сдвига линейной теории упругости. В этом случае, с учётом (3), находим, что

$$\tilde{L}_\gamma^{IV} = -\frac{2}{3} J^{-2/3}(C_\gamma) C_\gamma \left[g C_\gamma^{-1} + C_\gamma^{-1} g - \frac{1}{3} I_1(C_\gamma) C_\gamma^{-1} C_\gamma^{-1} - I_1(C_\gamma) C_\gamma^{-1} \cdot C_\gamma^{-2} \right] +$$

$$+ 2J(C_\gamma) B_\gamma \left[\left(J(C_\gamma) - \frac{1}{2} \right) C_\gamma^{-1} C_\gamma^{-1} - (J(C_\gamma) - 1) C_\gamma^{-1} \cdot C_\gamma^{-2} \right].$$

5. Постановка краевых задач

Рассмотрим тело, ограниченное поверхностью S и занимающее в пространстве область $V^{(in)}$. Для квазистатических процессов уравнение равновесия запишется в виде

$$\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{K} = 0, \quad \forall x \in V^{(in)},$$

где ρ – плотность массы в текущей конфигурации; $\mathbf{K}$ – вектор массовых сил.

Вариационная постановка краевой задачи в форме Лагранжа в текущей конфигурации будет иметь следующий известный вид:

$$\int_S \mathbf{Q} \cdot \delta \mathbf{U} dS + \int_{V^{(in)}} \rho \mathbf{K} \cdot \delta \mathbf{U} dV = \int_{V^{(in)}} \mathbf{T} \cdot \tilde{\nabla} \delta \mathbf{U} dV, \quad (10)$$

где $\mathbf{Q}$ – вектор поверхностных сил; δ – символ вариации; $\mathbf{U}$ – вектор перемещений из начальной конфигурации в текущую.

Для ФСПФ необходимо решать связанную задачу деформирования намагничивающегося тела в магнитном поле: поле вызывает деформирование тела, которое, в свою очередь, искажает деформирующее это тело магнитное поле. В этом случае кроме вариационного уравнения (10) необходимо записать вариационное уравнение для магнитной подзадачи:

$$\int_{V^{(in)}} \chi \mathbf{H}_0 \cdot \tilde{\nabla} \delta \psi dV = \int_{V^{(in)}} (1 + \chi) \tilde{\nabla} \psi \cdot \tilde{\nabla} \delta \psi dV + \int_{V^{(ex)}} \tilde{\nabla} \psi \cdot \tilde{\nabla} \delta \psi dV. \quad (11)$$

Здесь χ – магнитная восприимчивость ($\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$); $\mathbf{H}_0$ – приложенное внешнее поле; ψ – скалярная функция, – такая, что $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \tilde{\nabla} \psi$; $V^{(ex)}$ – объём окружающей тело внешней среды (магнитная подзадача решается во всём пространстве).

В магнитном поле на тело действуют массовые силы $\mathbf{K} = (\mu_0 / \rho) \mathbf{M} \cdot \tilde{\nabla} \mathbf{H}$ и поверхностные силы $\mathbf{Q} = (1/2) \mu_0 M_N^2 \mathbf{N}$; $M_N = \mathbf{M} \cdot \mathbf{N}$, $\mathbf{N}$ – внешняя единичная нормаль к поверхности тела в текущей конфигурации.

Предполагая, что для магнитной восприимчивости справедливо соотношение $\chi = \phi_M \chi_M + (1 - \phi_M) \chi_A$ и определяя намагничённость для каждой фазы по формуле Фрёлиха – Кенелли $\mathbf{M} = M_{st} / (a_{st} + H) \mathbf{H}$, где M_{st} – намагничённость насыщения; a_{st} – постоянная материала;

$H = |\mathbf{H}|$, получаем $\mathbf{M} = \left[\phi_M \frac{M_{st}^{(M)}}{a_{st}^{(M)} + H} + (1 - \phi_M) \frac{M_{st}^{(A)}}{a_{st}^{(A)} + H} \right] \mathbf{H}$, где $M_{st}^{(M)}$ и $a_{st}^{(M)}$ задаются для мартенситной фазы, а $M_{st}^{(A)}$ и $a_{st}^{(A)}$ – для аустенитной.

Поскольку до решения задачи поверхность S и объём $V^{(in)}$ в текущем состоянии неизвестны, вариационные уравнения (10) и (11) приводятся к начальной конфигурации:

$$\int_{S_0} J \sqrt{\mathbf{n} \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{Q} \cdot \delta \mathbf{U} dS_0 + \int_{V_0^{(in)}} \rho_0 \mathbf{K} \cdot \delta \mathbf{U} dV_0 = \int_{V_0^{(in)}} \mathbf{P}_{II} \cdot \delta \mathbf{E} dV_0, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \int_{V_0^{(in)}} J \chi \mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{F}^{-T} \cdot \delta(\nabla \psi) dV_0 &= \int_{V_0^{(in)}} J (1 + \chi) (\mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \psi) \cdot (\mathbf{F}^{-T} \cdot \delta(\nabla \psi)) dV_0 + \\ &+ \int_{V_0^{(ex)}} J (\mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \psi) \cdot (\mathbf{F}^{-T} \cdot \delta(\nabla \psi)) dV_0, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\mathbf{n}$ – внешняя единичная нормаль к поверхности тела S_0 с объёмом $V_0^{(in)}$ в начальной конфигурации; ∇ – оператор Гамильтона в начальной конфигурации; $V_0^{(ex)}$ – объём окружающей тело внешней среды в начальной конфигурации.

При решении краевых задач для СПФ и ППФ используется уравнение (12); при решении краевых задач для ФСПФ – уравнения (12) и (13). Для численной реализации применяется метод пошагового нагружения, при этом все величины в соотношениях (12) и (13) представляются относительно промежуточной конфигурации κ_* , что приводит к линеаризации этих уравнений.

5. Верификация моделей

Изгиб пластин из СПФ. Рассмотрены следующие задачи о деформировании консольной пластины с одним жёстко закреплённым концом.

Задача 1. Две пластины одинаковой длины $L = 0,1$ м, толщиной $h_1 = 0,5 \cdot 10^{-3}$ м (из бериллиевой бронзы) и $h_2 = 10^{-3}$ м (из равноатомного никелида титана NiTi) скреплены по длине при температуре, соответствующей полностью аустенитному состоянию NiTi. Образец последовательно охлаждается и нагревается таким образом, что в никелиде титана происходят прямой и обратный мартенситные переходы.

Задача 2. Пластина из NiTi толщиной $h_2 = 10^{-3}$ м в аустенитном состоянии подвергается растяжению по длине усилием $p = 100$ МПа, охлаждается до мартенситного состояния, после чего приложенная нагрузка снимается. В мартенситном состоянии эта пластина скрепляется с пластиной из бериллиевой бронзы толщиной $h_1 = 0,5 \cdot 10^{-3}$ м. Полученная двухслойная пластина длиной $L = 0,05$ м нагревается, а затем охлаждается таким образом, что в никелиде титана происходят обратный и прямой мартенситные переходы.

Задача 3. Пластина из NiTi длиной $L = 0,05$ м и толщиной $h = 1,5 \cdot 10^{-3}$ м охлаждается из аустенитного состояния до мартенситного, при этом в процессе охлаждения происходит рост изгибающего касательного усилия от 0 МПа до 20 МПа. После этого происходит нагрев пластины до начальной температуры при уменьшении изгибающего касательного усилия от 20 МПа до 0 МПа.

В рассматриваемых задачах происходит изгиб пластин и последующее восстановление их формы. Задачи решались в двумерной постановке (условие плоской деформации). На рис. 2 показаны зависимости перемещения свободного конца пластин от температуры (U – модуль вектора перемещений; $h = h_1 + h_2$ – толщина пластины); для задачи 1 (см. рис. 2, а) и задачи 3 (см. рис. 2, в) представлены перемещения для прямого и обратного фазовых переходов; для задачи 2 (см. рис. 2, б) только для обратного. Аналогичные задачи об изгибе пластин были рассмотрены в работе [8].

Рис. 2. Изгиб пластин из СПФ: а – задача 1; б – задача 2; в – задача 3

Изгиб консольной балки из СПФ. Рассмотрена задача о прямом и обратном фазовых переходах в образце из никелида титана в форме стержня прямоугольного сечения $1 \text{ см} \times 1 \text{ см}$ и длиной 10 см , закреплённом с левого торца. Прямой фазовый переход происходит при охлаждении из аустенитного состояния при изгибающем усилии $p = 5$ МПа, заданном на правом торце, при этом в образце возникают фазовые деформации. В мартенситном состоянии стержень разгружается, после чего при нагревании фазовые деформации исчезают и происходит восстановление начальной формы.

На рис. 3, а показана начальная конфигурация образца и конфигурация после прямого фазового перехода. На рис. 3, б представлено распределение фазовых деформаций E_{ph}^{zz} вдоль оси об-

разца z . Отметим, что значение E_{ph}^{zz} отлично от нуля на нейтральной оси стержня, поскольку в модели учитываются объёмные деформации, вызванные фазовым переходом (см. соотношение (7)).

Изгиб консольной балки из ФСПФ. В работе [8] представлен эксперимент, в котором в образце из сплава Ni-Mn-Fe-Ga (сплав Гейслера) осуществляется управление температурой прямого и обратного фазового перехода «мартенсит – аустенит» магнитным полем.

Рис. 3. Задача о прямом и обратном фазовых переходах в образце из никелида титана:
 а – конфигурации образца; б – распределение фазовых деформаций

Рассмотрена краевая задача, соответствующая этому эксперименту. Образец в форме стержня прямоугольного сечения $1\text{ см} \times 0,5\text{ см}$ и длиной 7 см закреплён с левого торца. В начальный момент времени стержень находится в аустенитном состоянии при температуре Θ_0 (см. рис. 4, а). При охлаждении образца при заданном на правом торце и сдвиговом усилии $p = 5\text{ МПа}$ происходит прямой фазовый переход (путь $a \rightarrow b$ на рис. 4, а), после чего образец разгружается. Затем происходит включение постоянного внешнего магнитного поля $H_0 = 80 \cdot 10^5\text{ А/м} = 10\text{ Т}$, направленного вдоль оси стержня (путь $b \rightarrow c$), и образец нагревается до температуры Θ_0 (путь $c \rightarrow d$). Так как приложенное магнитное поле увеличивает характеристические температуры фазовых переходов, как показано на рис. 4, а, то в точке d образец остаётся в мартенситном состоянии. Обратный фазовый переход происходит при снятии приложенного магнитного поля (путь $d \rightarrow a$), при этом образец восстанавливает свою форму (выпрямляется).

На рис. 4, б показана зависимость перемещения точки, находящейся в центре правого торца стержня при снятии магнитного поля (U – модуль вектора перемещений; h – толщина стержня).

Рис. 4. Краевая задача: а – смещение температур фазового перехода в магнитном поле;
 б – восстановление формы при снятии магнитного поля

Рис. 5. Изменение магнитной части энтропии

Описание магнитокалорического эффекта в ФСПФ. В работе [16] представлена экспериментальная зависимость изменения энтропии при приложении магнитного поля, так называемый магнитокалорический эффект (изменение температуры магнитного вещества при изменении внешнего магнитного поля) для сплава Ni-Mn-Ga.

На рис. 5 приведено сравнение данных эксперимента (точки) с изменением энтропии согласно представленной модели (сплошная линия):

$$\Delta s_M = \frac{\mu_0}{\rho_0} \left. \frac{\partial M(\Theta, H)}{\partial \Theta} \right|_{H=H_0} \Delta H.$$

Одноосное растяжение образцов из ППФ.

В работе [9] получены экспериментальные зависимости напряжений и деформаций от температуры для образца (стержня) из ППФ. В начальный момент времени в высокоэластичном состоянии образец растягивался вдоль своей оси до осевой деформации $E = 0,091$, после чего деформация фиксировалась и образец охлаждался до температуры, соответствующей застеклованному состоянию. При этом наблюдался рост напряжений до $T = 3,97$ МПа. При последующем нагревании образец возвращался в начальное состояние. Если образец в застеклованном состоянии разгрузить до нулевых напряжений, то в материале останутся «замороженные» деформации $E = 0,086$, которые исчезают при нагревании. Рассмотрен также случай, когда после разгрузки образца в застеклованном состоянии его последующее нагревание происходит при фиксированной деформации, – в этом случае зависимость напряжения от температуры будет немонотонна.

На рис. 6, а и б, приведены данные эксперимента и результаты, полученные по представленной модели. Экспериментальные данные показаны точками, зависимости деформации и напряжения от температуры при нагрузке, охлаждении и последующем нагреве – сплошной линией, нагрев образца при фиксированной деформации – штриховой линией.

а)

б)

Рис. 6. Данные эксперимента и результаты:

а – зависимости деформации от температуры; б – зависимости напряжения от температуры

ЛИТЕРАТУРА

1. Ферромагнетики с памятью формы / А. Н. Васильев, В. Д. Бучельников, Т. Такоги, В. В. Ховайло // Успехи физических наук. – 2003. – Т. 173. – № 6. – С. 577-607.
2. Трусделл, К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред / К. Трусделл. – М.: Мир, 1975. – 585 с.

3. Роговой, А. А. Дифференцирование скалярных и тензорных функций тензорного аргумента / А. А. Роговой // Вестник Пермского государственного технического университета. Динамика и прочность машин. – 2001. – № 2. – С.83-90.
4. Мовчан, А. А. Определяющие уравнения для двухэтапных термоупругих фазовых превращений / А. А. Мовчан, П. В. Шелымагин, С. А. Казарина // Прикладная механика и техническая физика. – 2001. – Т. 42. – № 5. – С. 152-160.
5. Малыгин, Г. А. Размытые мартенситные переходы и пластичность кристаллов с эффектом памяти формы / Г. А. Малыгин // Успехи физических наук. – 2001. – Т. 171. – № 2. – С. 187-212.
6. Роговой, А. А. Моделирование термомеханических процессов в полимерах с памятью формы при конечных деформациях / А. А. Роговой, О. С. Столбова // Прикладная механика и техническая физика. – 2015. – Т. 56. – № 6. – С. 143-157.
7. Лурье, А. И. Нелинейная теория упругости / А. И. Лурье. – М.: Наука, 1980. – 512 с.
8. Роговой, А. А. Моделирование упруго-неупругих процессов при конечных деформациях в сплавах с памятью формы / А. А. Роговой, О. С. Столбова // Прикладная механика и техническая физика. – 2013. – Т. 54. – № 2. – С. 148-162.
9. Магнитные сплавы с памятью формы: фазовые переходы и функциональные свойства / В. Д. Бучельников, А. Н. Васильев, В. В. Коледов, С. В. Таскаев, В. В. Ховайло, В. Г. Шавров // Успехи физических наук. – 2006. – Т. 176. – № 8. – С. 900-906.
10. Otsuka, K. Shape Memory Materials / K. Otsuka, C. M. Wayman. – Cambridge: Cambridge University Press, 1998. – P. 27-28.
11. Behl, M. Shape-memory polymers. Review / M. Behl, A. Lendlein // Materials Today. – 2007. – Vol. 10. – № 4. – P. 20-28.
12. Rogovoy, A. A. Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations / A. A. Rogovoy // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2012. – Vol. 24. – № 2. – P. 81-114.
13. Rogovoy, A. Modeling the magnetic field control of phase transition in ferromagnetic shape memory alloys / A. Rogovoy, O. Stolbova // International Journal of Plasticity. – 2016. – Vol. 85. – P.130-155.
14. Baghani, M. A large deformation framework for shape memory polymers: Constitutive modeling and finite element implementation / M. Baghani, R. Naghdabadi, J. Arghavani // Journal of Intelligent Material Systems and Structures. – 2013. – Vol. 24(1). – P.21-32.
15. Volk, B. L. Analysis of the finite deformation response of shape memory polymers: II. 1D calibration and numerical implementation of a finite deformation, thermoelastic model / B. L. Volk, D. C. Lagoudas, Chen Yi-Chao. // Smart Materials and Structures. – 2010. – Vol. 19. – № 7. – P. 75006-75016.
16. Cherechukin, A. A. E. et al. Shape memory effect due to magnetic field induced thermoelastic martensitic transformation in polycrystalline Ni-Mn-Fe-Ga alloy / A. A. Cherechukin, I. E. Dikstein, I. Ermakov // Phys. Lett. A. – 2001. – Vol. 291. – №№ 2-3. – P. 175-183.
17. Liu, Y. Thermomechanics of shape memory polymers: uniaxial experiments and constitutive modeling / Y. Liu, K. Gall, M. L. Dunn, A. R. Greenberg, J. Diani // International Journal of Plasticity. – 2006. – Vol. 22. – P. 279-313.