

УДК 539.3

**ЧЕТЫРЕХФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА
НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
В СИСТЕМЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ОСТАТОЧНЫХ ЛИНЗОВИДНЫХ
ДЕФОРМАЦИОННЫХ ДВОЙНИКОВ В МАРТЕНСИТНОЙ ФАЗЕ Ni_2MnGa**

*канд. физ.-мат. наук О.М. ОСТРИКОВ, Е.В. ШМАТОК
(Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого)*

Разработан метод расчета напряженно-деформированного состояния, обусловленного остаточными параллельными линзовидными двойниками, находящимися вдали от поверхности. Метод пригоден для расчета смещений, деформаций и напряжений у двойников со сложной формой границ. Установлено, что максимальные напряжения локализуются у вершин двойников и на их границах.

Введение. Двойникование кристаллов представляет собой распространенное явление, связанное с поворотом кристаллической решетки [1 – 4]. Образование двойников происходит по разным причинам, например, в результате термического либо механического воздействия на кристалл [1]. Двойникование играет важную роль в процессах разрушения материалов [3], влияет на закономерности их деформирования и, как следствие, – на их физико-механические свойства [4]. Ввиду этого развитие теории двойникования является важной научной проблемой и шагом на пути разработки методов прогнозирования влияния двойникования на свойства используемых в технике материалов [4]. Магнитные материалы с памятью формы (сплавы Гейслера) в настоящее время находят все более широкое практическое применение в технических системах нового поколения, позволяя миниатюризировать изделия из этих материалов [5 – 7]. Физико-механические свойства магнитных сплавов Гейслера в настоящее время недостаточно изучены. Необходимость таких исследований обусловлена возрастающими требованиями к уровню технологии магнитных материалов с памятью формы. Применение магнитных сплавов с памятью формы в технических системах позволяет вывести их на новый, самый современный уровень. Несмотря на большой интерес в мире к данной проблематике, имеется ряд нерешенных задач, связанных с исследованием взаимодействия механического двойникования и бездиффузионных фазовых превращений [8; 9]. Слабо развита теория бездиффузионных фазовых превращений в ферромагнитных материалах с эффектом запоминания формы.

Цель работы – разработка метода расчета напряженно-деформированного состояния в часто встречающейся на практике системе параллельных линзовидных двойников неправильной формы.

Постановка задачи. Условия формирования деформационных остаточных двойников в монокристаллах Ni_2MnGa изучены в [8; 9]. На рисунке 1 показано схематическое изображение таких двойников для реализации четырехфункционального способа расчёта, использование которого целесообразно в случае более сложной формы двойниковых границ и при более существенных отклонениях двойника от линзовидной формы.

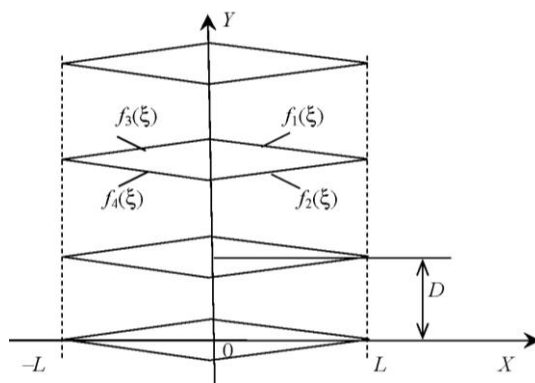


Рис. 1. Схематическое изображение системы параллельных линзовидных двойников в рамках четырехфункциональной модели

Название метода расчета связано с необходимостью использования четырех функций $f_1(\xi)$, $f_2(\xi)$, $f_3(\xi)$ и $f_4(\xi)$ для описания формы двойников. Меньшее количество функций целесообразно использовать в случае формы двойников, близкой к линзовидной форме [10].

Удобно приближение ромбовидных двойников. В этом случае форма их границ может быть описана линейными функциями [4]:

$$\begin{aligned} f_1(\xi) &= -\frac{H}{2}\left(\frac{\xi}{L}-1\right), \quad f_2(\xi) = \frac{H}{2}\left(\frac{\xi}{L}-1\right), \\ f_3(\xi) &= \frac{H}{2}\left(\frac{\xi}{L}+1\right), \quad f_4(\xi) = -\frac{H}{2}\left(\frac{\xi}{L}+1\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где L – половина длины двойника; H – наибольшая ширина двойника.

С применением приближения о непрерывном распределении двойникоующих дислокаций на двойниковых границах, использованного в [4], смещения u_i и напряжения σ_{ij} у такой системы двойников можно рассчитать по формулам:

$$u_i(x, y) = u_i^{(1)}(x, y) + u_i^{(2)}(x, y) + u_i^{(3)}(x, y) + u_i^{(4)}(x, y); \quad (2)$$

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(2)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(3)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(4)}(x, y), \quad (3)$$

где i, j принимают значения x, y или z ; $u_i^{(1)}(x, y)$, $u_i^{(2)}(x, y)$, $u_i^{(3)}(x, y)$, $u_i^{(4)}(x, y)$ и $\sigma_{ij}^{(1)}(x, y)$, $\sigma_{ij}^{(2)}(x, y)$, $\sigma_{ij}^{(3)}(x, y)$, $\sigma_{ij}^{(4)}(x, y)$ – смещения и напряжения, созданные участками границ двойника.

В соответствии с [4] данные смещения и напряжения можно определить по формулам:

$$u_i^{(k)}(x, y) = \sum_{n=0}^{M-1} \int_0^L \sqrt{1 + (f_k'(\xi))^2} \rho_k(\xi) u_i^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) d\xi; \quad (4)$$

$$\sigma_{ij}^{(k)}(x, y) = \sum_{n=0}^{M-1} \int_0^L \sqrt{1 + (f_k'(\xi))^2} \rho_k(\xi) \sigma_{ij}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) d\xi. \quad (5)$$

Здесь k принимает значения 1, 2, 3 или 4; n – индекс суммирования; M – число двойников в системе; ξ – параметр интегрирования; $\rho_k(\xi)$ – плотность двойникоующих дислокаций на k -м участке двойниковой границы; D – расстояние между двойниками (см. рис. 1).

В (4) и (5) принято, что

$$\begin{aligned} u_x^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) &= \frac{b_{sp}}{2\pi} \left[\arctg \frac{y - f_k(\xi) - nD}{x - \xi} + \frac{(x - \xi)(y - f_k(\xi) - nD)}{2(1 - \nu)((x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2)} \right], \\ u_y^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) &= -\frac{b_{sp}}{2\pi} \left[\frac{1 - 2\nu}{4(1 - \nu)} \ln((x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2) + \frac{(x - \xi)^2 - (y - f_k(\xi) - nD)^2}{4(1 - \nu)((x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2)} \right], \end{aligned} \quad (6)$$

$$u_z^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = \frac{b_e}{2\pi} \arctg \frac{y - f_k(\xi) - nD}{x - \xi};$$

$$\sigma_{xx}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = -\frac{\mu b_{sp}}{2\pi(1 - \nu)} \frac{(y - f_k(\xi) - nD)[3(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2]}{[(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2]^2},$$

$$\sigma_{yy}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = \frac{\mu b_{sp}}{2\pi(1 - \nu)} \frac{(y - f_k(\xi) - nD)[(x - \xi)^2 - (y - f_k(\xi) - nD)^2]}{[(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2]^2},$$

$$\sigma_{xy}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = \frac{\mu b_{sp}}{2\pi(1 - \nu)} \frac{(x - \xi)[(x - \xi)^2 - (y - f_k(\xi) - nD)^2]}{[(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2]^2}, \quad (7)$$

$$\sigma_{zz}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = -\frac{\mu b_{sp} \nu}{2\pi(1 - \nu)} \frac{y - f_k(\xi) - nD}{(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2},$$

$$\sigma_{zx}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = -\frac{\mu b_e}{2\pi} \frac{y - f_k(\xi) - nD}{(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2},$$

$$\sigma_{zy}^{(k,0)}(x, y - nD, \xi) = \frac{\mu b_e}{2\pi} \frac{x - \xi}{(x - \xi)^2 + (y - f_k(\xi) - nD)^2}.$$

Здесь b_{sp} и b_e – соответственно модули краевой и винтовой составляющей вектора Бюргера частичной двойникоующей дислокации; μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона.

Результаты расчета и их обсуждение. В расчетах для мартенситной фазы Ni_2MnGa принимались следующие данные: $L = 60$ мкм; $H = 20$ мкм; $D = 45$ мкм; $M = 5$; $\rho_1(\xi) = \rho_2(\xi) = const = \rho = 10^6$; $\nu = 0,3$; $\mu = 19,231$ ГПа; $b_{xp} = 2,91 \text{ \AA}$; $b_s = 2,74 \text{ \AA}$ [11] – [15]. Результаты расчётов отражены на рисунках 2 и 3.

Расчет смещений u_i представлен на рисунке 2. Общий вид линий равных величин смещений для u_x и u_z идентичен (рис. 2, а и в), а отличие заключается в величине численного значения смещений в заданных точках. Рассматриваемые смещения симметричны относительно начала декартовой системы координат (рис. 2, а, в). Результат расчёта полей смещений u_y (рис. 2, б) существенно отличается от результатов, полученных при расчете смещений u_x и u_z . Наибольшие смещения наблюдаются в области зарождения двойников.

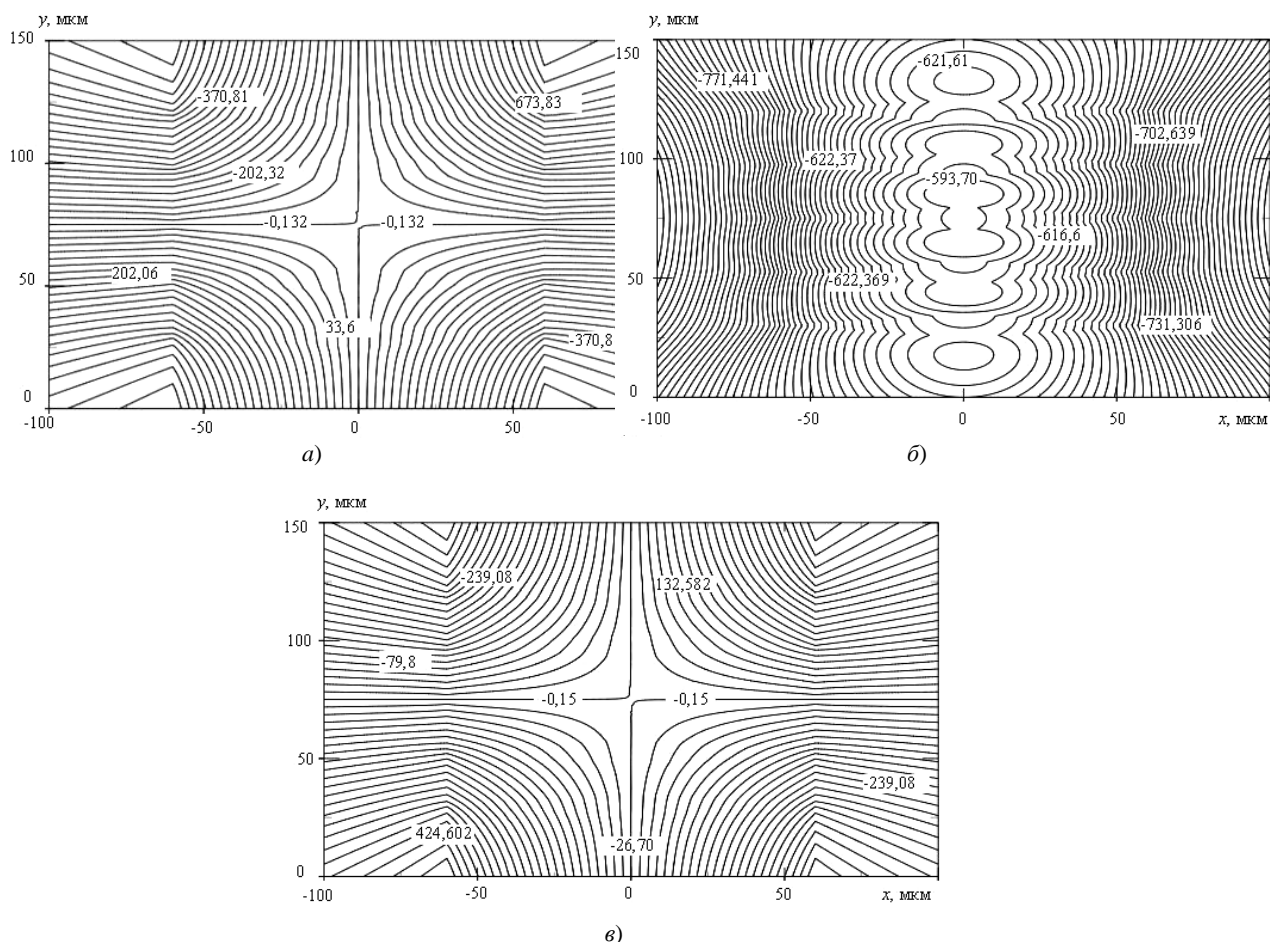


Рис. 2. Результаты расчетов на основании четырехфункциональной модели полей смещений u_i в Ni_2MnGa , обусловленных системой параллельных линзовидных двойников (нм): а – u_x ; б – u_y ; в – u_z

Расчет компонент тензора напряжений представлен на рисунке 3. Во всех случаях расчета компонент тензора напряжений чётко прослеживаются двойниковые границы, являющиеся концентраторами напряжений. Наибольшая концентрация напряжений наблюдается у вершин двойников.

На рисунке 3, а представлен результат расчета *нормальной компоненты тензора напряжений* σ_{xx} . В данном случае максимальные по модулю значения напряжений σ_{xx} наблюдаются у вершин двойников группы параллельных двойников. Напряжения в центре у верхней и нижней границ двойников значительно ниже, чем у вершин и в окрестностях двойников. Уровень напряжений в окружающем двойник материале возрастает по мере продвижения вдоль оси Ox к началу координат. Графический результат расчёта *сдвиговой компоненты тензора напряжений* σ_{xy} показан на рисунке 3, б. Здесь наблюдается несколько иная картина: общий окрестный фронт напряжений постепенно убывает по мере продвижения вдоль оси Ox в положительном направлении. *Распределение сдвиговой компоненты* σ_{xz} представлено на рисунке 3, в. Из полученного результата видно, что напряжения σ_{xz} у верхних и нижних границ двойников существенно различаются по модулю своих значений. Напряжения у верхних границ на порядок вы-

ше напряжений у нижних границ двойников. Более того, напряжения возрастают по мере продвижения вдоль оси OY от крайних двойников к двойникам, находящимся в центре системы параллельных двойников. Также заметно, что линии равных напряжений сходятся к вершинам двойников.

Картина напряжений, приведенная на рисунке 3, *з*, отображает результат расчета *нормальной компоненты тензора напряжений* σ_{yy} . В данном случае наблюдаются минимальные значения напряжений у центральной части системы параллельных двойников, максимальные модульные значения – у крайних двойников. Результат расчета *сдвиговой компоненты* σ_{yz} тензора напряжений представлен на рисунке 3, *д*. Данная компонента имеет симметричные модульные значения напряжений относительно оси OY , а по мере продвижения в положительном направлении вдоль оси OX значения компоненты возрастают. На рисунке 3, *е* показан результат расчета *нормальной компоненты* σ_{zz} тензора напряжений, созданных рассматриваемой системой двойников. Полученные данные имеют схожесть с данными, представленными на рисунке 3, *в*, для компоненты σ_{xz} . Отличие заключается лишь в численных значениях.

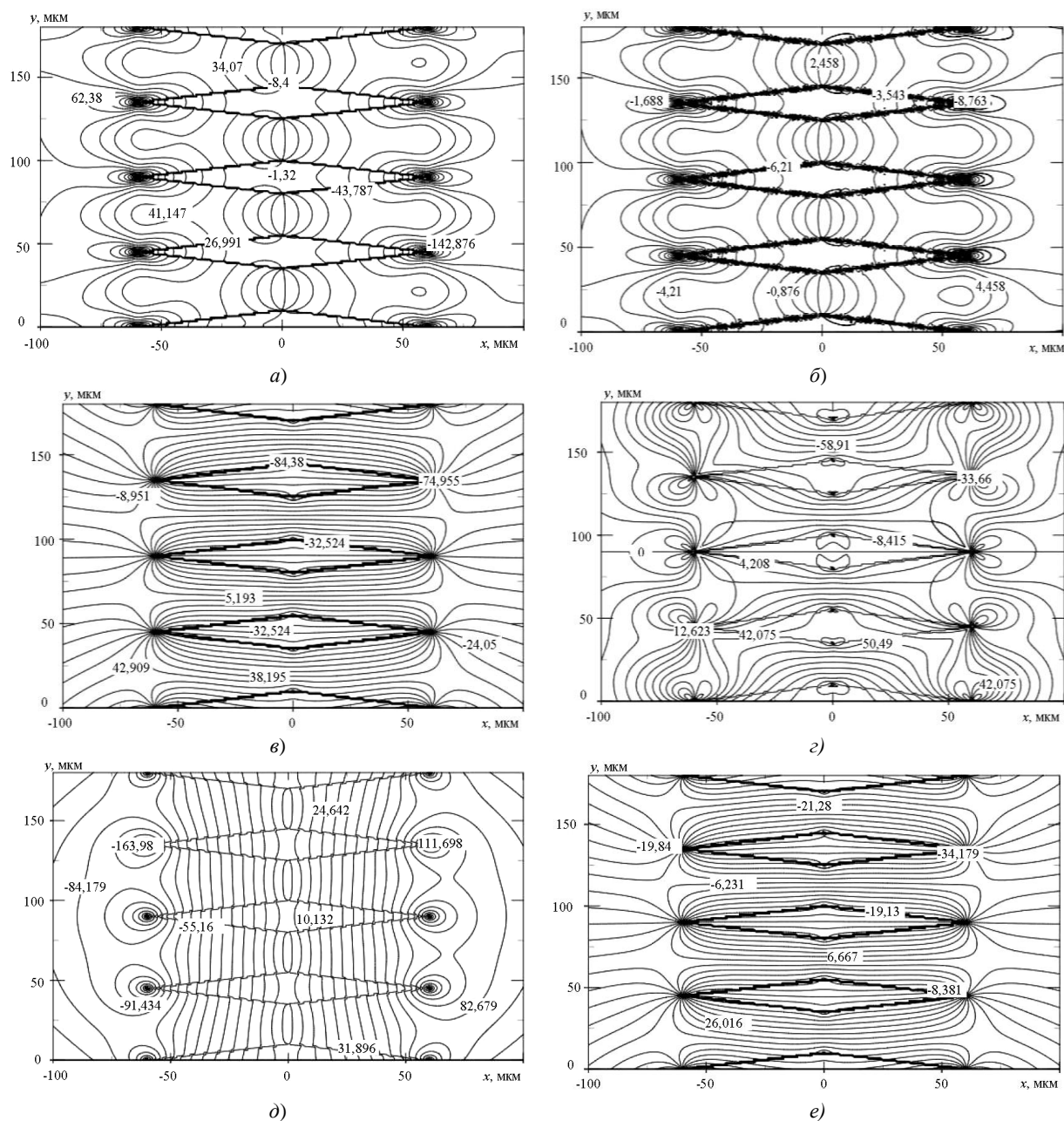


Рис. 3. Поля напряжений σ_{ij} в Ni_2MnGa , созданные параллельными четырёхфункциональными двойниками (МПа):

$$a - \sigma_{xx}; b - \sigma_{xy}; c - \sigma_{xz}; d - \sigma_{yy}; e - \sigma_{yz}; f - \sigma_{zz}$$

Исходя из соотношений Коши [16]

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (8)$$

или формул [16]

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E} [\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})], \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{1}{E} [\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})], \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{1}{E} [\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})], \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2\mu} \sigma_{xy}, \\ \varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2\mu} \sigma_{xz}, \\ \varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2\mu} \sigma_{yz}, \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где ε_{ij} – тензор деформаций; E – модуль Юнга.

С использованием формул (2) – (7) нетрудно рассчитать и компоненты тензора деформаций.

Заключение. На основании принципа суперпозиции разработан метод расчета напряженно-деформированного состояния в системе параллельных остаточных механических двойников, находящихся вдали от поверхности. Метод применен для расчета напряжений в мартенситной фазе Ni_2MnGa , в которой присутствует такая система двойников. Определены области локализации напряжений, изучена конфигурация полей смещений и напряжений в системе параллельных двойников, возникающих в монокристалле Ni_2MnGa при его деформировании.

ЛИТЕРАТУРА

1. Классен-Неклюдова, М.В. Механическое двойникование кристаллов / М.В. Классен-Неклюдова. – М.: АН СССР, 1960. – 262 с.
2. Косевич, А.М. Дислокации в теории упругости / А.М. Косевич. – Киев: Наук. думка, 1978. – 220 с.
3. Финкель, В.М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В.М. Финкель, В.А. Федоров, А.П. Королев. – Ростов н/Д. – 1990. – 172 с.
4. Остриков, О.М. Механика двойникования твердых тел: монография / О.М. Остриков. – Гомель: Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого», 2008. – 301 с.
5. Васильев, А.Н. Ферромагнетики с памятью формы / А.Н. Васильев, В.Д. Бучельников, Т. Такаги // Успехи физических наук – 2003 – Т. 173, № 6. – С. 577 – 608.
6. Бучельников, В.Д. Магнитные сплавы с памятью формы: фазовые переходы и функциональные свойства / В.Д. Бучельников, А.Н. Васильев, В.В. Коледов // Успехи физических наук. – 2006. – Т. 176, № 8. – С. 900 – 906.
7. Planes, A. Ferromagnetic shape memory alloys / A. Planes, L. Manosa // Materials Science Forum. – 2006. – Vol. 512. – P. 145 – 152.
8. Остриков, О.М. Особенности механического двойникования и локального разрушения монокристаллического сплава Ni_2MnGa при индентировании его поверхности / О.М. Остриков, Е.В. Шматок // Вестн. Тамбов. ун-та. Серия. Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 18, № 4 (ч. 2). – С. 1924 – 1925.

9. Остриков, О.М. Исследование пластической деформации поверхности монокристалла Ni_2MnGa методом индентирования / О.М. Остриков, А.Л. Созинов, А.В. Сорока // Инженерно-физический журнал. – 2012. – Т. 85, № 5. – С. 1132 – 1141.
10. Остриков, О.М. Метод расчета полей напряжений в системе параллельных остаточных линзовидных двойников в сплаве Гейслера Ni_2MnGa / О.М. Остриков, Е.В. Шматок // Вестн. Тамбов. ун-та. Серия: Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 18, № 4 (ч. 2). – С. 1920 – 1921.
11. Sozinov, A. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase / A. Sozinov [et al.]. – Helsinki, University of Technology, Laboratory of Physical Metallurgy and Materials Science; App.phys.letters. – 2002. – Vol. 80. – P. 1746 – 1748.
12. Heczko, O. Temperature dependence and temperature limits of magnetic shape memory effect / O. Heczko, L. Straka // Journal of Applied Physics. – 2003. – Vol. 94, № 11. – P. 7139 – 7143.
13. Heczko, O. Magnetic properties and domain structure of magnetic shape memory Ni-Mn-Ga alloy / O. Heczko, K. Jurek, K. Ullakko // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 2001. – Vol. 226 – 230. – P. 996 – 998.
14. Muellner, P. Large cyclic deformation of a Ni-Mn-Ga shape memory alloy induced by magnetic fields / P. Mullner [et al.]. – Journal of Applied Physics. – 2002. – Vol. 92, № 11. – P. 6708 – 6713.
15. Hirsinger, L. Modelling detwinning of martensite platelets under magnetic and stress actions on Ni-Mn-Ga alloys / L. Hirsinger, C. Lexcellent // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 2003. – V. 254 – 255. – P. 275 – 277.
16. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.

Поступила 04.09.2013

**FOUR-FUNCTIONAL METHOD OF CALCULATION
OF THE INTENSE-DEFORMED CONDITION
IN THE SYSTEM OF PARALLEL RESIDUAL KIND LENS DEFORMATION TWINS
IN MARTENSIT PHASE Ni_2MnGa**

O. OSTRIKOV, E. SHMATOK

The method of calculation of the intense-deformed condition caused by residual parallel kind lens twins, being far from a surface is developed. The method is suitable for calculation of displacement, deformations and pressure at twins with the difficult form of borders. It is established that the maximum pressure is localized at tops of twins and on their borders.