УДК 539.3: 517.958

ПРИМЕНЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ МОДУЛЕЙ И СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ ВОЗМОЖНОСТИ МАРТЕНСИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Б. Д. Аннин*,**, Н. И. Остросаблин*, Р. И. Угрюмов *,**

* Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия
** Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия
E-mails: annin@hydro.nsc.ru, o.n.i@ngs.ru, riugryumov@mail.ru

С использованием понятия собственных модулей и собственных состояний из линейной теории упругости проведена оценка возможности фазовых переходов (мартенситных превращений) в сплавах с памятью формы. Для сплавов с кубической и гексагональной решетками приведены матрицы модулей упругости и коэффициентов податливости, записаны выражения для их собственных модулей и собственные состояния. Для кубической и гексагональной фаз удельная энергия деформации представлена в виде суммы шести независимых слагаемых, соответствующих шести ортогональным собственным состояниям. Показано, что в зависимости от соотношения собственных модулей существует шесть типов материалов (сплавов) с кубической и гексагональной симметрией. Сравниваются удельные энергии деформации в кубической и гексагональной фазах. Если в гексагональной фазе энергия деформации больше, чем в кубической, то сплав может стремиться вернуться в исходное состояние с меньшей энергией. Для сравнения энергий деформации в разных фазах можно также использовать формулы для тензоров, ближайших по евклидовой энергетической норме к кубическому и гексагональному тензорам. Проведено сравнение энергий при некоторых значениях констант упругости.

Ключевые слова: собственные модули и состояния, сплавы с памятью формы, модули упругости, коэффициенты податливости, кубическая и гексагональная решетки, удельная энергия деформации.

DOI: 10.15372/PMTF20210501

Памятью формы называется наблюдаемое для некоторых материалов полное или частичное восстановление первоначальных размера и формы образца при его нагреве до определенной температуры. Материалы, в которых проявляется память формы, называются материалами с памятью формы. Материалы с памятью формы известны начиная с середины XX в. и широко применяются в различных областях техники и медицины [1–3].

Фазовые превращения свойственны материалам с кристаллической решеткой, имеющей два состояния, одно из которых устойчиво при низких температурах, а другое — при высоких. Высокотемпературная фаза материала, обладающего таким свойством, называ-

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований СО РАН (код проекта III.23.3.1) и при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 19-01-00511 А).

ется аустенитом, низкотемпературная — мартенситом, а переход между ними — мартенситным превращением. В процессе мартенситного превращения образуется новая кристаллическая структура, энергия которой отлична от энергии первоначальной структуры. Эта энергия зависит от температуры, и если энергия конечной структуры превышает энергию начальной, то происходит обратное превращение. Таким образом, в большинстве случаев мартенситное превращение является обратимым.

В данной работе предлагается применить собственные модули и состояния линейной теории упругости для сравнения удельных энергий деформации материала в разных фазах. В работе [4] утверждается, что, например, мартенситное превращение кобальта состоит в переходе гранецентрированной кубической решетки в гексагональную плотноупакованную. Это превращение полностью обратимо, но разные фазы должны иметь разную энергию. При этом плотность кобальта в разных фазах практически одинаковая. Кубическая решетка титана и сплавов титан — никель переходит в гексагональную, или ромбоэдрическую, или орторомбическую.

В последнее время собственные модули и состояния находят применение в теориях упругости, пластичности, наследственной упругости [5–7].

В линейной теории упругости свойства упругости материалов определяются взаимно обратными матрицами модулей упругости A и коэффициентов податливости $a = A^{-1}$. В общем случае матрицы A и $a = A^{-1}$ упругих по Грину материалов содержат 21 независимый элемент $A_{ij} = A_{ji}$, $a_{ij} = a_{ji}$, $i, j = \overline{1,6}$. Постоянные A_{ij}, a_{ij} можно считать безразмерными, если в обобщенном законе Гука

$$\sigma_i = A_{ij}\varepsilon_j, \quad \varepsilon_i = a_{ij}\sigma_j, \quad i, j = \overline{1,6}, \tag{1}$$

связывающем напряжения σ_i и деформации ε_j, напряжения σ_i и A_{ij} отнесены к некоторому характерному (эталонному) напряжению. В (1) и далее по повторяющимся индексам проводится суммирование. В декартовой прямоугольной системе координат x_i, $i = 1, 2, 3$ напряжениям σ_i и деформациям ε_j соответствуют симметричные тензоры второго ранга $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ и $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} = (\partial_i u_j + \partial_j u_i)/2$. Здесь u_1, u_2, u_3 — компоненты вектора смещения; ∂_i — производные по координате x_i. Матрицам A_{ij}, a_{ij} соответствуют тензоры четвертого ранга модулей упругости $A_{ijkl} = A_{jikl} = A_{klij}$ и коэффициентов податливости $a_{ijkl} = a_{jikl} = a_{klij}$. Переход от тензорных величин к векторным осуществляется по формулам

$$\begin{gathered} \sigma_{11} = \sigma_1, \quad \sigma_{22} = \sigma_2, \quad \sigma_{33} = \sigma_3, \\ \sqrt{2}\,\sigma_{23} = \sqrt{2}\,\sigma_{32} = \sigma_4, \quad \sqrt{2}\,\sigma_{13} = \sqrt{2}\,\sigma_{31} = \sigma_5, \quad \sqrt{2}\,\sigma_{12} = \sqrt{2}\,\sigma_{21} = \sigma_6. \end{gathered} \tag{2}$$

Симметричные невырожденные матрицы $A = A'$, $a = a'$ в (1) представляются в виде [5]

$$A = T\Lambda T', \qquad a = A^{-1} = T\Lambda^{-1}T', \tag{3}$$

где $T = [t_{ip}]$ — ортогональная матрица, т. е. $T'T = E$; E — единичная матрица; штрих означает транспонирование матрицы; $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6)$ ($\lambda_i > 0$) — диагональная матрица. Собственные модули λ_i, $i = \overline{1,6}$ и собственные состояния t_{ip}, $i, p = \overline{1,6}$ являются собственными числами и собственными векторами матрицы A в (1) [5]. Столбцы t_{ip}, $p = \overline{1,6}$ ортогональной матрицы $T = [t_{ip}]$ образуют ортонормированный базис в шестимерном пространстве напряжений σ_i (2) и деформаций ε_j, при этом

$$\sigma_i = t_{ip}\tilde{\sigma}_p, \quad \tilde{\sigma}_p = t_{ip}\sigma_i, \quad \varepsilon_j = t_{jq}\tilde{\varepsilon}_q, \quad \tilde{\varepsilon}_q = t_{jq}\varepsilon_j. \tag{4}$$

Если $t_{ip} = \delta_{ip}$ (δ_{ip} — единичная матрица), то из (4) следует, что напряжения $\sigma_i = \delta_{ip}\tilde{\sigma}_p = \tilde{\sigma}_i$, $\tilde{\sigma}_p = \delta_{ip}\sigma_i = \sigma_p$, $i, p = \overline{1,6}$ являются инвариантами, проекциями σ_i на базис

$\delta_{i1}, \delta_{i2}, \ldots, \delta_{i6}$ [8]. Базис t_{ip}, $p = \overline{1,6}$ характеризует конкретный упругий материал, а базис δ_{ip}, $p = \overline{1,6}$ не связан с конкретным материалом и определяется внешней координатной системой x_i, $i = 1, 2, 3$.

Закон Гука (1) с учетом (3), (4) записывается в матричном виде $T'\sigma = \Lambda T'\varepsilon$ или в виде шести независимых инвариантных равенств

$$\begin{aligned} &t_{i1}\sigma_i = \lambda_1 t_{j1}\varepsilon_j, \quad t_{i2}\sigma_i = \lambda_2 t_{j2}\varepsilon_j, \quad t_{i3}\sigma_i = \lambda_3 t_{j3}\varepsilon_j, \\ &t_{i4}\sigma_i = \lambda_4 t_{j4}\varepsilon_j, \quad t_{i5}\sigma_i = \lambda_5 t_{j5}\varepsilon_j, \quad t_{i6}\sigma_i = \lambda_6 t_{j6}\varepsilon_j. \end{aligned} \tag{5}$$

В силу (5) удельная энергия деформации представляется в виде суммы шести независимых слагаемых

$$\begin{aligned} 2\Phi = \tilde{\sigma}_p \tilde{\varepsilon}_p = (t_{ip}\sigma_i)(t_{jp}\varepsilon_j) = \lambda_1(t_{j1}\varepsilon_j)^2 + \lambda_2(t_{j2}\varepsilon_j)^2 + \\ + \lambda_3(t_{j3}\varepsilon_j)^2 + \lambda_4(t_{j4}\varepsilon_j)^2 + \lambda_5(t_{j5}\varepsilon_j)^2 + \lambda_6(t_{j6}\varepsilon_j)^2. \end{aligned} \tag{6}$$

Собственные модули λ_i, $i = \overline{1,6}$ являются экстремальными значениями удельной энергии деформации (6) [9].

Допустим, что сплав с памятью формы имеет кубическую решетку, для которой матрица A_{ij} в главных осях симметрии записывается в виде

$$A_{ij} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{21} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{11} & A_{21} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{21} & A_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{44} \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Собственные модули λ_i для матрицы (7) равны

$$\lambda_1 = A_{11} + 2A_{21}, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = A_{11} - A_{21}, \quad \lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = A_{44}, \tag{8}$$

а собственные состояния t_{ip} можно представить в виде [10]

$$t_{ip} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{3} & 2/\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Из формул (8) можно выразить постоянные A_{ij} через собственные модули λ_i:

$$A_{11} = (\lambda_1 + 2\lambda_2)/3, \quad A_{21} = (\lambda_1 - \lambda_2)/3, \quad A_{44} = \lambda_4. \tag{10}$$

В силу второй формулы (3) из (10) получаем элементы a_{ij} обратной матрицы:

$$a_{11} = \frac{1}{3}\Big(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{2}{\lambda_2}\Big) = \frac{2\lambda_1 + \lambda_2}{3\lambda_1\lambda_2}, \quad a_{21} = \frac{1}{3}\Big(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\Big) = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{3\lambda_1\lambda_2}, \quad a_{44} = \frac{1}{\lambda_4}. \tag{11}$$

Для конкретных значений A_{ij}, нумеруя собственные модули (8) в порядке убывания, получаем, что существует шесть типов материалов с кубической симметрией [11]. Величина $A = A_{11} - A_{21} - A_{44} = \lambda_2 - \lambda_4$ характеризует отличие кубического кристалла от изотропной среды, для которой $A = 0, \lambda_2 = \lambda_4$. Значение $A = \lambda_2 - \lambda_4$ может быть больше нуля: $A > 0$, т. е. $\lambda_2 > \lambda_4$, и меньше нуля: $A < 0$, т. е. $\lambda_2 < \lambda_4$.

Существуют следующие типы материалов кубической симметрии (собственные значения λ_i пронумерованы в порядке убывания, в соответствии с этой нумерацией переставляются столбцы в матрице (9), числа в фигурных скобках означают кратность λ_i) [10, 11]:

I. $\{1,2,3\}$: $\lambda_1 > \lambda_2 = \lambda_3 > \lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 \implies$

$$A_{11} + 2A_{21} > A_{11} - A_{21} > A_{44}, \qquad A > 0,$$

$$A_{ij} = (\lambda_1 - \lambda_4)t_{i1}t_{j1} + (\lambda_2 - \lambda_4)(t_{i2}t_{j2} + t_{i3}t_{j3}) + \lambda_4\delta_{ij}.$$

II. $\{1,3,2\}$: $\lambda_1 > \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 > \lambda_5 = \lambda_6 \implies$

$$A_{11} + 2A_{21} > A_{44} > A_{11} - A_{21}, \qquad A < 0,$$

$$A_{ij} = (\lambda_1 - \lambda_2)t_{i1}t_{j1} + \lambda_2\delta_{ij} - (\lambda_2 - \lambda_5)(t_{i5}t_{j5} + t_{i6}t_{j6}).$$

III. $\{2,1,3\}$: $\lambda_1 = \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 \implies$

$$A_{11} - A_{21} > A_{11} + 2A_{21} > A_{44}, \qquad A > 0,$$

$$A_{ij} = (\lambda_1 - \lambda_4)(t_{i1}t_{j1} + t_{i2}t_{j2}) + (\lambda_3 - \lambda_4)t_{i3}t_{j3} + \lambda_4\delta_{ij}. \qquad (12)$$

IV. $\{2,3,1\}$: $\lambda_1 = \lambda_2 > \lambda_3 = \lambda_4 = \lambda_5 > \lambda_6 \implies$

$$A_{11} - A_{21} > A_{44} > A_{11} + 2A_{21}, \qquad A > 0,$$

$$A_{ij} = (\lambda_1 - \lambda_3)(t_{i1}t_{j1} + t_{i2}t_{j2}) + \lambda_3\delta_{ij} - (\lambda_3 - \lambda_6)t_{i6}t_{j6}.$$

V. $\{3,1,2\}$: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 > \lambda_4 > \lambda_5 = \lambda_6 \implies$

$$A_{44} > A_{11} + 2A_{21} > A_{11} - A_{21}, \qquad A < 0,$$

$$A_{ij} = \lambda_1\delta_{ij} - (\lambda_1 - \lambda_4)t_{i4}t_{j4} - (\lambda_1 - \lambda_5)(t_{i5}t_{j5} + t_{i6}t_{j6}).$$

VI. $\{3,2,1\}$: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 > \lambda_4 = \lambda_5 > \lambda_6 \implies$

$$A_{44} > A_{11} - A_{21} > A_{11} + 2A_{21}, \qquad A < 0,$$

$$A_{ij} = \lambda_1\delta_{ij} - (\lambda_1 - \lambda_4)(t_{i4}t_{j4} + t_{i5}t_{j5}) - (\lambda_1 - \lambda_6)t_{i6}t_{j6}.$$

Из формул (12) следует, что возможны три типа кубических кристаллов, когда $A > 0$: $\{1,2,3\}$, $\{2,1,3\}$, $\{2,3,1\}$, и три типа, когда $A < 0$: $\{1,3,2\}$, $\{3,1,2\}$, $\{3,2,1\}$. Так как имеют место формулы [9]

$$a_{11} = 1/E_1, \quad a_{21} = \nu_{21}/E_1, \quad a_{44} = 1/(2G_{23}),$$

где E_1 — модуль Юнга; ν_{21} — коэффициент Пуассона (знак "$-$" перед коэффициентом опущен); G_{23} — модуль сдвига, то с учетом соотношений (11), (12) можно получить пределы изменения E_1 и ν_{21} для всех шести типов кубических кристаллов (см. (12)). Эти пределы исследовались, например, в работах [12–14], но без разделения кубических материалов на типы (12). Допустимые области значений $\mu_i = 1/\lambda_i$ для типов I–VI (12) в зависимости от коэффициента Пуассона $\nu = -a_{21}/a_{11}$ $(-1 < \nu < 1/2)$ приведены в работе [15].

В случае кубической решетки с матрицей модулей упругости (7) удельная энергия деформации (6) с учетом формул (8), (9) записывается в виде

$$2\Phi = \tilde{\sigma}_p\tilde{\varepsilon}_p = (t_{ip}\sigma_i)(t_{jp}\varepsilon_j) =$$
$$= \lambda_1(t_{j1}\varepsilon_j)^2 + \lambda_2[(t_{j2}\varepsilon_j)^2 + (t_{j3}\varepsilon_j)^2] + \lambda_4[(t_{j4}\varepsilon_j)^2 + (t_{j5}\varepsilon_j)^2 + (t_{j6}\varepsilon_j)^2] =$$
$$= \lambda_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)^2/3 + \lambda_2[(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - 2\varepsilon_3)^2/6 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2/2] + \lambda_4(\varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2). \qquad (13)$$

Матрица A_{ij} для гексагональной решетки с осью симметрии x_3 имеет вид

$$A_{ij} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{31} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{11} & A_{31} & 0 & 0 & 0 \\ A_{31} & A_{31} & A_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{11} - A_{21} \end{bmatrix}, \tag{14}$$

при этом собственные модули и состояния записываются следующим образом [10]:

$$\begin{gathered} \lambda_{1,2} = \big[A_{11} + A_{21} + A_{33} \pm \sqrt{(A_{11} + A_{21} - A_{33})^2 + 8A_{31}^2}\,\big]/2, \\ \lambda_3 = \lambda_6 = A_{11} - A_{21}, \qquad \lambda_4 = \lambda_5 = A_{44}; \end{gathered} \tag{15}$$

$$\begin{gathered} t_{ip} = \begin{bmatrix} (1/\sqrt{2})\cos\alpha & -(1/\sqrt{2})\sin\alpha & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ (1/\sqrt{2})\cos\alpha & -(1/\sqrt{2})\sin\alpha & -1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \operatorname{tg} 2\alpha = \frac{2\sqrt{2}A_{31}}{A_{11} + A_{21} - A_{33}}. \end{gathered} \tag{16}$$

Полагая в (15), (16) модули λ_1, λ_2, λ_3, λ_4 и угол α независимыми параметрами, с использованием формул (3) получаем выражения для постоянных A_{ij}:

$$\begin{gathered} A_{11} = (\lambda_1 \cos^2\alpha + \lambda_2 \sin^2\alpha + \lambda_3)/2, \quad A_{21} = (\lambda_1 \cos^2\alpha + \lambda_2 \sin^2\alpha - \lambda_3)/2, \\ A_{31} = (1/\sqrt{2}\,)(\lambda_1 - \lambda_2)\sin\alpha\cos\alpha, \quad A_{33} = \lambda_1 \sin^2\alpha + \lambda_2 \cos^2\alpha, \quad A_{44} = \lambda_4 \end{gathered} \tag{17}$$

и для постоянных a_{ij} обратной матрицы:

$$\begin{gathered} a_{11} = \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{\lambda_1}\cos^2\alpha + \frac{1}{\lambda_2}\sin^2\alpha + \frac{1}{\lambda_3}\Big), \quad a_{21} = \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{\lambda_1}\cos^2\alpha + \frac{1}{\lambda_2}\sin^2\alpha - \frac{1}{\lambda_3}\Big), \\ a_{31} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\Big)\sin\alpha\cos\alpha, \quad a_{33} = \frac{1}{\lambda_1}\sin^2\alpha + \frac{1}{\lambda_2}\cos^2\alpha, \quad a_{44} = \frac{1}{\lambda_4}. \end{gathered} \tag{18}$$

В зависимости от соотношений между собственными модулями (15) в случае нумерации их в порядке убывания и при соответствующей перестановке столбцов в матрице (16) существуют материалы с гексагональной симметрией следующих типов: $\{1,1,2,2\}$, $\{1,2,1,2\}$, $\{1,2,2,1\}$, $\{2,1,1,2\}$, $\{2,1,2,1\}$, $\{2,2,1,1\}$ [10, 11].

Полагая, что собственные модули $\lambda_i > 0$, $i = 1,2,3,4$ и угол α принимают произвольные значения, с использованием формул (17), (18) получаем допустимые пределы изменения постоянных A_{ij} и a_{ij}, а также коэффициентов Пуассона $\nu_{21} = a_{21}/a_{11}$, $\nu_{31} = a_{31}/a_{11}$ [9].

Запишем выражение для удельной энергии деформации (6) для собственных модулей (15) и состояний (16):

$$\begin{gathered} 2\Phi = \tilde{\sigma}_p \tilde{\varepsilon}_p = (t_{ip}\sigma_i)(t_{jp}\varepsilon_j) = \lambda_1 (t_{j1}\varepsilon_j)^2 + \lambda_2 (t_{j2}\varepsilon_j)^2 + \lambda_3[(t_{j3}\varepsilon_j)^2 + (t_{j6}\varepsilon_j)^2] + \\ + \lambda_4[(t_{j4}\varepsilon_j)^2 + (t_{j5}\varepsilon_j)^2] = \lambda_1[(1/\sqrt{2}\,)\cos\alpha\,(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + \sin\alpha\,\varepsilon_3]^2 + \\ + \lambda_2[-(1/\sqrt{2}\,)\sin\alpha\,(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + \cos\alpha\,\varepsilon_3]^2 + \lambda_3[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2/2 + \varepsilon_6^2] + \lambda_4(\varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2). \end{gathered} \tag{19}$$

Возникают следующие вопросы. Каким образом можно сравнить энергии (13), (19) и определить, какая из них больше? Как связаны элементы матриц (7), (14), если это матрицы модулей упругости одного материала в разных фазах? Возможно, нужно выбрать в качестве матрицы (14) матрицу гексагонального (трансверсально-изотропного) тензора, ближайшего по энергетической (евклидовой) норме к кубическому тензору (7) [16], или выбрать в качестве матрицы (7) матрицу кубического тензора, ближайшего к гексагональному тензору (14) [16]. Сравнение энергий (13), (19) по величине проводится при постоянных деформациях в предположении, что плотности материала в разных фазах различаются незначительно.

Запишем матрицу C_{ij} [16] гексагонального (трансверсально-изотропного) тензора, наиболее близкого к кубическому тензору (7):

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} (3A_{11}+A_{21}+A_{44})/4 & C_{21} & A_{21} & 0 & 0 & 0 \\ (A_{11}+3A_{21}-A_{44})/4 & C_{11} & A_{21} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{21} & A_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (A_{11}-A_{21}+A_{44})/2 \end{bmatrix}. \qquad (20)$$

Вычисляя для матрицы (20) по формулам (15) собственные модули, получаем

$$\begin{gathered} \lambda_1 = A_{11}+2A_{21}, \qquad \lambda_2 = A_{11}-A_{21}, \\ \lambda_3 = \lambda_6 = (A_{11}-A_{21}+A_{44})/2 = (\lambda_2+\lambda_4)/2, \qquad \lambda_4 = \lambda_5 = A_{44}. \end{gathered} \qquad (21)$$

Формулы (21) и (8) для модулей кубического тензора (7) различаются только выражениями для модулей $\lambda_3 = \lambda_6$. Далее для матрицы (20) из (16) находим $\operatorname{tg} 2\alpha = 2\sqrt{2}$, $\sin\alpha = 1/\sqrt{3}$, $\cos\alpha = 2/\sqrt{6}$, при этих значениях собственные состояния (16) для матрицы (20) совпадают с собственными состояниями (9) для матрицы (7).

Матрица C_{ij} кубического тензора, наиболее близкого к гексагональному тензору (матрице) (14), имеет вид [16]

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} (2A_{11}+A_{33})/3 & C_{21} & C_{21} & 0 & 0 & 0 \\ (A_{21}+2A_{31})/3 & C_{11} & C_{21} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{21} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (A_{11}-A_{21}+2A_{44})/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}. \qquad (22)$$

Для матрицы (22) вычисляем собственные модули (8):

$$\begin{gathered} \lambda_1 = [2(A_{11}+A_{21}+2A_{31})+A_{33}]/3, \\ \lambda_2 = \lambda_3 = [2(A_{11}-A_{31})-A_{21}+A_{33}]/3, \quad \lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = (A_{11}-A_{21}+2A_{44})/3. \end{gathered} \qquad (23)$$

Собственные состояния для (22), очевидно, имеют вид (9).

Запишем выражение для удельной энергии (19) с учетом (21) и (9):

$$\begin{multline} 2\Phi = \lambda_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3)^2/3 + \lambda_2(\varepsilon_1+\varepsilon_2-2\varepsilon_3)^2/6 + \\ + (\lambda_2+\lambda_4)[(\varepsilon_1-\varepsilon_2)^2/2+\varepsilon_6^2]/2 + \lambda_4(\varepsilon_4^2+\varepsilon_5^2). \end{multline} \qquad (24)$$

В (13), (24) модули λ_1, λ_2, λ_4 одинаковые и выражаются по формулам (8), (21). Вычитая из (24) выражение (13), получаем

$$2(\Phi^{(h)} - \Phi^{(c)}) = (\lambda_2 - \lambda_4)[-(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2/2 + \varepsilon_6^2]/2 = \\ = A[-(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2/2 + \varepsilon_6^2]/2 = A[-((\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})/2)^2 + \varepsilon_{21}^2]. \qquad (25)$$

Здесь и далее верхние индексы “(h)”, “(c)” соответствуют гексагональной и кубической симметриям. Знак разности $2(\Phi^{(h)} - \Phi^{(c)})$ (25) зависит от знака величины $A = \lambda_2 - \lambda_4 = A_{11} - A_{21} - A_{44}$ и соотношений между сдвиговыми деформациями $(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})/2$ и ε_{21} в плоскости изотропии. Если выражение (25) больше нуля, то гексагональная фаза с матрицей (20) модулей упругости имеет бóльшую удельную энергию (24), чем кубическая фаза с матрицей (7) и удельной энергией (13). Тогда при изменении температуры гексагональная фаза сплава с памятью формы может стремиться вернуться в кубическую фазу с меньшей удельной энергией деформации.

Рассмотрим значения констант для некоторых конкретных сплавов и кристаллов. Например, для кубических монокристаллов TiNi постоянные A_{ij} имеют следующие значения (в 10^{11} Па) [13]: $A_{11} = 1{,}645$, $A_{21} = 1{,}335$, $A_{44} = 0{,}66$, при этом собственные модули (8) равны $\lambda_1 = 4{,}315$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0{,}31$, $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 0{,}66$. Нумеруя их в порядке убывания, получаем, что монокристаллы TiNi соответствуют материалам типа $\{1, 3, 2\}$ (см. (12)). Значение $A = \lambda_2 - \lambda_4 = -0{,}35 < 0$ и разность (25) больше нуля, если $\varepsilon_{21}^2 - ((\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})/2)^2 < 0$. Последнее неравенство может иметь место в отсутствие сдвиговых деформаций ε_{21}.

Для кобальта Co, имеющего гексагональную кристаллическую решетку, постоянные A_{ij} имеют следующие значения (в 10^{11} Па) [17]: $A_{11} = 3{,}071$, $A_{21} = 1{,}650$, $A_{31} = 1{,}027$, $A_{33} = 3{,}581$, $A_{44} = 1{,}510$. Для этих значений находим собственные модули (15): $\lambda_1 = 5{,}603$, $\lambda_2 = 2{,}699$, $\lambda_3 = \lambda_6 = 1{,}421$, $\lambda_4 = \lambda_5 = 1{,}510$. В соответствии с классификацией [10, 11] этот материал является материалом типа $\{1, 1, 2, 2\}$. Собственные состояния определяются по формулам (16), при этом $\operatorname{tg} 2\alpha = 2{,}548$, $\sin\alpha = 0{,}563$, $\cos\alpha = 0{,}826$.

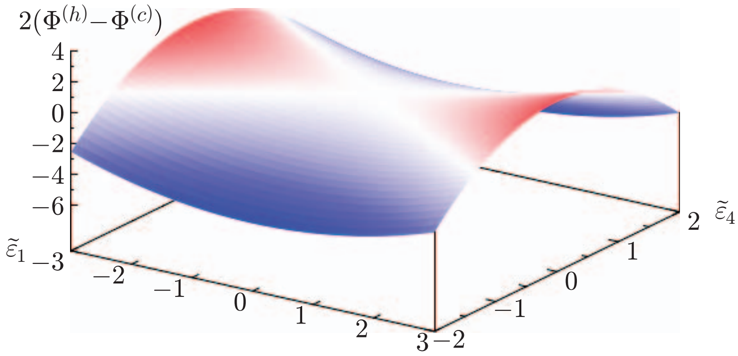
В работе [18] приведены три варианта значений A_{ij} для кубической фазы Co. Выберем среднее значение из этих трех вариантов (в 10^{11} Па): $A_{11} = 2{,}287$, $A_{21} = 1{,}68$, $A_{44} = 2{,}2$, при этом собственные модули (8) равны $\lambda_1 = 5{,}647$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0{,}607$, $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 2{,}2$, а выражения для собственных состояний имеют вид (9). Очевидно, что данный материал с кубической фазой является материалом типа $\{1, 3, 2\}$.

Запишем выражения для удельных энергий деформации для гексагональной и кубической фаз Co:

$$\begin{gathered} 2\Phi^{(h)} = 5{,}603\tilde{\varepsilon}_1^2 + 2{,}699\tilde{\varepsilon}_2^2 + 1{,}421(\tilde{\varepsilon}_3^2 + \tilde{\varepsilon}_6^2) + 1{,}510(\tilde{\varepsilon}_4^2 + \tilde{\varepsilon}_5^2), \\ 2\Phi^{(c)} = 5{,}647\tilde{\varepsilon}_1^2 + 0{,}607(\tilde{\varepsilon}_2^2 + \tilde{\varepsilon}_3^2) + 2{,}2(\tilde{\varepsilon}_4^2 + \tilde{\varepsilon}_5^2 + \tilde{\varepsilon}_6^2), \end{gathered} \qquad (26)$$

где деформации $\tilde{\varepsilon}_p = t_{jp}\varepsilon_j$, $p = \overline{1, 6}$ для каждой фазы определяются с учетом собственных состояний (9) и (16). Соотношения между энергиями $\Phi^{(h)}$ и $\Phi^{(c)}$ в (26) зависят от соотношений между деформациями $\tilde{\varepsilon}_p^{(h)}$ и $\tilde{\varepsilon}_p^{(c)}$, причем каждое слагаемое в выражениях (26) не зависит от других слагаемых. Однако в силу (9), (16) деформации $\tilde{\varepsilon}_p^{(h)}$ и $\tilde{\varepsilon}_p^{(c)}$ при $p = 3, 4, 5, 6$ совпадают.

Вычислим также значения C_{ij} (22) и λ_i (23) кубического тензора, ближайшего к гексагональному тензору кристаллов Co: $C_{11} = 3{,}241$, $C_{21} = 1{,}235$, $C_{44} = 1{,}480$; $\lambda_1 = 5{,}710$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 2{,}006$, $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 1{,}480$. Кубический тензор является тензором для материала типа $\{1, 2, 3\}$. Эти значения C_{ij}, λ_i отличаются от приведенных выше экспериментальных значений, которые также имеют разброс [18].



Зависимость $2(\Phi^{(h)} - \Phi^{(c)})$ (см. (27)) от $\tilde\varepsilon_1$ и $\tilde\varepsilon_4$ при $\tilde\varepsilon_2 = \tilde\varepsilon_3 = \tilde\varepsilon_5 = \tilde\varepsilon_6 = 0$ для сплава CoNi

В работе [19] приведены значения A_{ij} для кубической и гексагональной фаз сплава кобальт — никель. Постоянные кубической фазы равны (в 10^{11} Па) $A_{11} = 2{,}387$, $A_{21} = 1{,}553$, $A_{44} = 2{,}630$, постоянные гексагональной фазы — $A_{11} = 3{,}260$, $A_{21} = 1{,}606$, $A_{31} = 0{,}954$, $A_{33} = 3{,}584$, $A_{44} = 1{,}480$. Для этих значений находим собственные модули (8): $\lambda_1 = 5{,}493$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0{,}834$, $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 2{,}630$ и собственные состояния (9). Кубический тензор является тензором для материала типа $\{1, 3, 2\}$. Далее находим для гексагональной фазы собственные модули (15): $\lambda_1 = 5{,}719$, $\lambda_2 = 2{,}731$, $\lambda_3 = \lambda_6 = 1{,}654$, $\lambda_4 = \lambda_5 = 1{,}480$. Согласно классификации [10, 11] этот материал является материалом типа $\{1, 1, 2, 2\}$. Собственные состояния определяются по формулам (16), при этом $\operatorname{tg} 2\alpha = 2{,}105$, $\sin\alpha = 0{,}534$, $\cos\alpha = 0{,}845$.

Запишем выражения для удельных энергий деформации для гексагональной и кубической фаз CoNi:

$$\begin{gathered}2\Phi^{(h)} = 5{,}719\tilde\varepsilon_1^2 + 2{,}731\tilde\varepsilon_2^2 + 1{,}654(\tilde\varepsilon_3^2 + \tilde\varepsilon_6^2) + 1{,}480(\tilde\varepsilon_4^2 + \tilde\varepsilon_5^2),\\ 2\Phi^{(c)} = 5{,}493\tilde\varepsilon_1^2 + 0{,}834(\tilde\varepsilon_2^2 + \tilde\varepsilon_3^2) + 2{,}630(\tilde\varepsilon_4^2 + \tilde\varepsilon_5^2 + \tilde\varepsilon_6^2),\end{gathered} \tag{27}$$

где деформации $\tilde\varepsilon_p = t_{jp}\varepsilon_j$, $p = \overline{1,6}$ определяются с учетом собственных состояний (9) и (16). Соотношения между $\Phi^{(h)}$ и $\Phi^{(c)}$ в (27), так же как и в (26), зависят от соотношений между деформациями $\tilde\varepsilon_p^{(h)}$ и $\tilde\varepsilon_p^{(c)}$. Поскольку каждое слагаемое в (26), (27) не зависит от других слагаемых, можно сравнивать не суммарные энергии, а отдельные слагаемые. Например, в (27) имеем $5{,}719\tilde\varepsilon_1^2 > 5{,}493\tilde\varepsilon_1^2$ или $2{,}731\tilde\varepsilon_2^2 > 0{,}834\tilde\varepsilon_2^2$, если $(\tilde\varepsilon_1^{(h)})^2 = (\tilde\varepsilon_1^{(c)})^2 = \tilde\varepsilon_1^2$ или $(\tilde\varepsilon_2^{(h)})^2 = (\tilde\varepsilon_2^{(c)})^2 = \tilde\varepsilon_2^2$ и отсутствуют остальные деформации $\tilde\varepsilon_p$. В этом случае гексагональная фаза имеет большую удельную энергию и может стремиться вернуться в кубическую фазу с меньшей энергией. На рисунке приведена зависимость $2(\Phi^{(h)} - \Phi^{(c)})$ (см. (27)) от $\tilde\varepsilon_1$ и $\tilde\varepsilon_4$ при $\tilde\varepsilon_2 = \tilde\varepsilon_3 = \tilde\varepsilon_5 = \tilde\varepsilon_6 = 0$ для сплава CoNi.

Приведем значения постоянных A_{ij} для кубической фазы сплава Ni_3Al (в 10^{11} Па) [20]: $A_{11} = 2{,}3$, $A_{21} = 1{,}5$, $A_{44} = 2{,}62$. Вычислим для этих значений собственные модули (8): $\lambda_1 = 5{,}3$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0{,}8$, $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 2{,}62$. Таким образом, кристаллы Ni_3Al соответствуют материалу типа $\{1, 3, 2\}$ (см. (12)).

Величина $A = \lambda_2 - \lambda_4 = -1{,}82 < 0$ и разность (25) больше нуля, если $\varepsilon_{21}^2 - ((\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})/2)^2 < 0$ и в качестве гексагональной матрицы C_{ij} выбрана матрица (20) с собственными модулями (21). Если разность (25) больше нуля, то гексагональная фаза сплава Ni_3Al может стремиться вернуться в кубическую фазу с меньшей удельной энергией деформации.

Таким образом, в данной работе понятие собственных модулей и состояний использовано для проведения качественной оценки возможности мартенситных превращений в сплавах с памятью формы. Рассмотрены случаи сплавов с кубической и гексагональной решетками, матрицы упругости которых соответствуют материалам шести типов. Приведены собственные модули, собственные состояния и удельные энергии деформации для этих случаев.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Лихачев В. А.** Эффект памяти формы / В. А. Лихачев, С. Л. Кузьмин, З. П. Каменцева. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1987.
2. **Ооцука К.** Сплавы с эффектом памяти формы / К. Ооцука, К. Симидзу, Ю. Судзуки и др. М.: Металлургия, 1990.
3. **Муслов С. А.** Сплавы с памятью формы: свойства, получение и применение в технике и медицине / С. А. Муслов, А. В. Шеляков, В. А. Андреев. М.: Мозартика, 2018.
4. **Лихачев В. А.** Эффект памяти формы // Соросовский образоват. журн. 1997. № 3. С. 107–114.
5. **Аннин Б. Д., Остросаблин Н. И.** Анизотропия упругих свойств материалов // ПМТФ. 2008. Т. 49, № 6. С. 131–151.
6. **Аннин Б. Д.** Модели упругопластического деформирования трансверсально-изотропных материалов // Сиб. журн. индустр. математики. 1999. Т. 2, № 2. С. 3–7.
7. **Аннин Б. Д.** Об одном классе определяющих соотношений линейной анизотропной наследственной теории упругости // Наследственная механика деформирования и разрушения твердых тел — научное наследие Ю. Н. Работнова: Тр. конф., Москва, 24–26 февр. 2014 г. М.: Изд-во Ин-та машиноведения РАН, 2014. С. 18–22.
8. **Остросаблин Н. И.** О функциональной связи двух симметричных тензоров второго ранга // ПМТФ. 2007. Т. 48, № 5. С. 134–137.
9. **Остросаблин Н. И.** Условия экстремальности постоянных упругости и главные оси анизотропии // ПМТФ. 2016. Т. 57, № 4. С. 192–210.
10. **Остросаблин Н. И.** Собственные модули упругости и состояния для материалов кристаллографических сингоний // Динамика сплошной среды: Сб. науч. тр. / АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. 1986. Вып. 75. С. 113–125.
11. **Остросаблин Н. И.** О классификации анизотропных материалов // Динамика сплошной среды: Сб. науч тр. / АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. 1985. Вып. 71. С. 82–96.
12. **Norris A. N.** Poisson's ratio in cubic materials // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 2006. V. 462, N 2075. P. 3385–3405.
13. **Муслов С. А., Лотков А. И., Арутюнов С. Д.** Экстремумы упругих свойств кубических кристаллов // Изв. вузов. Физика. 2019. Т. 62, № 8. С. 102–111.
14. **Городцов В. А., Лисовенко Д. С.** Ауксетики среди материалов с кубической анизотропией // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2020. № 4. С. 7–24.
15. **Остросаблин Н. И.** Критерии предельности и модель неупругого деформирования анизотропных сред // ПМТФ. 2011. Т. 52, № 6. С. 165–176.
16. **Остросаблин Н. И.** Трансверсально-изотропный тензор, ближайший по евклидовой норме к заданному анизотропному тензору модулей упругости // ПМТФ. 2019. Т. 60, № 1. С. 124–141.

17. **Chadwick P., Seet L. T. C.** Wave propagation in a transversely isotropic heat-conducting elastic material // Mathematika. 1970. V. 17, N 2. P. 255–274.
18. **Gump J., Hua Xia, Chirita M., et al.** Elastic constants of face-centered-cubic cobalt // J. Appl. Phys. 1999. V. 86, N 11. P. 6005–6009.
19. **Weston W. F., Granato A. V.** Cubic and hexagonal single-crystal elastic constants of a cobalt-nickel alloy // Phys. Rev. B. 1975. V. 12, N 12. P. 5355–5362.
20. **Jamal M., Asadabadi S. J., Ahmad J., Aliabad H. A. R.** Elastic constants of cubic crystals // Comput. Materials Sci. 2014. V. 95. P. 592–599.

Поступила в редакцию 15/XII 2020 г.,
после доработки — 22/I 2021 г.
Принята к публикации 25/I 2021 г.