

单向拉伸镍钛合金带从奥氏体到 马氏体的相变分析*

谢宇新, 张义同, 徐家福

(天津大学 力学系, 天津 300072)

(李继彬推荐)

摘要: 单向拉伸镍钛合金带中从奥氏体到马氏体的相变已在实验中观测到, 并被看作为局部变形进行了数值模拟。该文采用相变理论对其进行分析, 考虑了两相界面处变形梯度的跳跃以及 Maxwell 关系, 导出了相变的控制方程。相变分析归结为寻求载荷的最小值, 使在该值下控制方程具有唯一的、物理上可以接受的实数解。控制方程被数值求解, 证明了该唯一解确实存在。相变的 Maxwell 应力, 马氏体相与奥氏体相内的应力与应变, 以及相边界的倾角都可求出, 并与实验所观测到的结果相吻合。

关键词: 应力导致的相变; Maxwell 关系; 镍钛合金; 奥氏体; 马氏体

中图分类号: O343.5 **文献标识码:** A

引 言

实验表明形状记忆合金, 例如镍钛合金, 能够发生奥氏体和马氏体两个固态相之间的应力导致的相变, 见 Shaw 和 Kiriakides^[1-2]。

Shaw 和 Kyriakides^[3]详细报告了镍钛合金带的单向拉伸实验。合金带在室温下进行拉伸。在室温下无应力的合金材料处于马氏体相。拉伸开始时, 合金带均匀变形, 在名义应力 403 MPa (峰应力) 时马氏体成核, 紧接着, 应力骤降 10 MPa, 分隔两相的有一倾角的界面(马氏体相边界)开始扩展。从奥氏体向马氏体的相变是放热的, 在试件中扩展的相边界的邻域将出现升温, 从而导致相变应力增大。参见文献[2]中的图 7 或文献[3]中的图 2(a)。如果温度不升高, 相边界将会在 393 MPa 的恒定名义应力下发生扩展, 细节参见文献[3]。此外, 实验还可观测到相界面与加载方向的夹角介于 51°到 60°之间。

在文献[3]中, 为了模拟上述所观测到的实验现象, 镍钛合金被视为能够发生应变软化的弹塑性体, 合金带用三维 20 节点的块体(二次)单元离散, 在合金带的一侧人为引入了一几何缺陷(一小的 V 型凹痕), 由此而引起的镍钛合金带内的局部变形被数值模拟, 并被用来预测

* 收稿日期: 2006-03-23; 修订日期: 2007-09-12

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10272079); 国家自然科学基金委员会与英国皇家学会联合资助项目

作者简介: 谢宇新(1974—), 讲师(E-mail: xyx@tju.edu.cn);

张义同, 教授(联系人, Tel: + 86-22-87891425; E-mail: ytzhang@tju.edu.cn)。

从奥氏体到马氏体的相变的发生及扩展。然而,众所周知,应变在跨越二次块体单元之间的界面处是连续的,这样应变在跨越两相界面处的跳跃便不可能用二次块体单元来模拟。此外,在相变过程中必须满足的 Maxwell 关系,在文献[3]中也没有考虑。

本文采用相变理论,对单向拉伸下镍钛合金带中的从奥氏体到马氏体的相变进行了分析。文献[3]中图 8(b)所描述的镍钛合金的有应变软化的应力-应变关系在本文中被采用。文中考虑了变形梯度在跨越两相界面处的跳跃,跨越两相界面处作用力的连续性以及 Maxwell 关系在本文中被强制满足。

本文其余部分组织如下:在下节中列出相变的控制方程,在第 2 节给出对应于文献[3]中图 8(b)所示应力-应变关系的弹塑性本构方程。在第 3 节,镍钛合金带中的从奥氏体到马氏体的相变被详细分析,并给出其数值解。在最后一节,对本文的主要结果给予总结并对进一步的研究提出建议。

1 相变控制方程

关于应力导致相变的基本理论可参阅文献[4-5]。最近关于两相分片均匀变形研究进展的评论性文献,见 Fu 和 Freidin 的文献[6]。

在本文中,对参考构形和变形构形采用同一个笛卡儿直角坐标系。变形体中在参考构形下坐标为 (X_1, X_2, X_3) 的质点,在变形构形下记其坐标为 (x_1, x_2, x_3) 。变形梯度定义为

$$F = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}, F_{iA} = x_{i,A} \quad (1)$$

考虑一个界面,它将变形体分为两相:“+”相和“-”相。函数 f 跨越该界面的跳跃定义为 $[f] = f^+ - f^-$, 其中上标“-”与“+”分别表示在“-”相和“+”相内的取值。为避免使用重复上标,在同时有其他上标出现的时候,“-”或“+”将标为下标。例如, F_+^T 表示 F^+ 的转置。当界面处的场变量无下标的时候,意味着该变量可以在界面的任意一侧取值。在本文分析中,我们用“-”相和“+”相分别表示奥氏体相和马氏体相。

多相平衡要求在分界面以外的区域满足如下方程(无体积力情况下)

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\pi}^T = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\pi}_{iA,A} = 0, \quad (2)$$

这里 div 为参考构形中的散度算子, $\boldsymbol{\pi}$ 为第一 Piola-Kirchhoff 应力张量。

跨越相变界面的跳跃条件为

$$[\boldsymbol{\pi}] \mathbf{N} = \mathbf{0}, \quad [\boldsymbol{\pi}_{iA}] N_A = 0, \quad (3)$$

$$[W] - \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\pi} \mathbf{N} = 0, \quad [W] - f_i [\boldsymbol{\pi}_{iB}] N_B = 0, \quad (4)$$

这里, $\mathbf{N} = [N_1, N_2, N_3]^T$ 为参考构形中垂直于相变界面的单位向量,其方向为从“+”相指向“-”相, W 为应力功函数(或弹性材料的应变能函数),满足

$$\frac{\partial W(\mathbf{E})}{\partial E_{AB}} = T_{AB}, \quad (5)$$

其中 T_{AB} 与 E_{AB} 分别为第二 Piola-Kirchhoff 应力张量 \mathbf{T} 与 Green 应变张量 \mathbf{E} 的分量, f 的定义为

$$f = [F] \mathbf{N} \quad (6)$$

相变界面处位移的连续意味着跳跃函数 $[F]$ 可写为

$$[F] = \mathbf{f} \cdot \mathbf{N} \quad (7)$$

对于分片均匀变形, 平衡方程(2)自然满足。相变只有在跳跃条件(3)与(4)满足时才会发生。

方程(4)被称为 Maxwell 关系, 它表示 Eshelby 力在跨越两相界面处的连续性。

2 大变形弹塑性方程

文献[3]中图 8(b)描述的大变形各向同性线性弹性应力-应变关系, 对三维情形可写为

$$\mathbf{T} = \mathbf{L}\mathbf{E}, \quad T_{AB} = L_{ABCD}E_{CD}, \quad (8)$$

这里 \mathbf{L} 为四阶弹性刚度张量且有如下形式:

$$\mathbf{L} = 2G\mathbf{I} + K\delta\delta, \quad L_{ABCD} = 2G I_{ABCD} + K\delta_{AB}\delta_{CD}, \quad (9)$$

其中 G 为弹性剪切模量, K 为体积模量, δ_j 为 Kronecker δ 符号, \mathbf{I} 为四阶特殊等同张量, 其分量形式为

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (10)$$

式(8)的逆形式为

$$\mathbf{E} = \mathbf{M}\mathbf{T}, \quad E_{AB} = M_{ABCD}T_{CD}, \quad (11)$$

其中

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2G}\mathbf{I} + \frac{1}{9K}\delta\delta, \quad M_{ABCD} = \frac{1}{2G}I_{ABCD} + \frac{1}{9K}\delta_{AB}\delta_{CD}. \quad (12)$$

文献[3]中图 8(b)描述的大变形各向同性塑性应力-应变本构关系, 对三维情形可写成由 Rice 和 Hill 所建议的模型的形式, 参见文献[7-11]。

在此模型中, Green 变形率 \mathbf{E} 分解为两部分: 弹性 Green 变形率张量 $(\mathbf{E})^e$ 与塑性 Green 变形率张量 $(\mathbf{E})^p$, 即

$$\mathbf{E} = (\mathbf{E})^e + (\mathbf{E})^p. \quad (13)$$

对于各向同性硬化材料, 累积塑性变形率 \mathbf{E}^p 与累积塑性变形 \mathbf{E}^p 分别定义为

$$\mathbf{E}_{eq}^p = \left[\frac{2}{3}\text{tr}[(\mathbf{E})^p(\mathbf{E})^p] \right]^{1/2}, \quad (14)$$

和

$$\mathbf{E}_{eq}^p = \int \mathbf{E}_{eq}^p dt, \quad (15)$$

其中 t 为时间类变量。

在参考构形下的屈服条件为

$$T_{eq} = Y(E^p), \quad (16)$$

这里 T_{eq} 为有效应力, 其定义为

$$T_{eq} = \left[\frac{2}{3}\text{tr}(\mathbf{T}'\mathbf{T}') \right]^{1/2}, \quad (17)$$

其中 T'_{AB} 为第二 Piola-Kirchhoff 偏应力张量 \mathbf{T}' 的分量, $\mathbf{T}' = \mathbf{T} - (\text{tr}\mathbf{T})\delta/3$, $Y(E^p)$ 描述材料的应变硬化, 可以通过单轴拉伸实验进行测定。

由 Rice 和 Hill 提出的模型给出了 \mathbf{E} 与 \mathcal{T} (第二 Piola-Kirchhoff 应力率张量) 间的如下关系:

$$\mathbf{E} = \mathbf{M}^{ep}\mathcal{T}, \quad (18)$$

其中 \mathbf{M}^{ep} 为四阶弹塑性柔度张量, 对加载情形其分量形式如下:

$$M_{ABCD}^{cp} = M_{ABCD} - \frac{9}{4E_p(E_{eq}^p)[Y(E_{eq}^p)]^2} T'_{AB} T'_{CD}, \quad (19)$$

其中 M_{ABCD} 已由式(12) 给出, E_p 为塑性模量, 其定义为

$$E_p(E_{eq}^p) = \frac{dY(E_{eq}^p)}{dE_{eq}^p}, \quad (20)$$

它和 E 以及切线模量 E_t 有以下关系:

$$\frac{1}{E_p(E_{eq}^p)} = \frac{1}{E_t(E_{eq}^p)} - \frac{1}{E}. \quad (21)$$

文献[3] 中图 8(b) 的上屈服名义应力 403 MPa, 下屈服名义应力为 387 MPa, 它们可分别写为 $T_y^U = 400.4$ MPa 和 $T_y^L = 384.5$ MPa. 相对应于 T_y^U 与 T_y^L 的应变分别为 $E_y^U = 0.006521125$ 及 $E_y^L = 0.049152$. 弹性模量 E , 塑性切线模量 E_t 以及 Poisson 比分别取值为 61.8 GPa, 42.494 GPa 和 0.3.

3 从奥氏体到马氏体的相变分析

单向拉伸下, 可以在实验中观察到镍钛合金中的马氏体相变带, 见文献[3] 图 8(b) 中的照片. 马氏体相变带的边界与加载方向间的夹角 α 如图 1 所示.

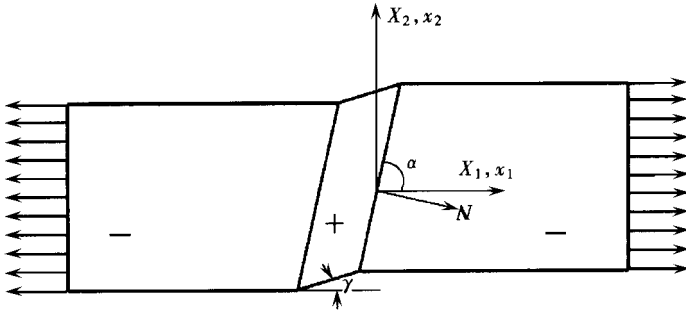


图 1 从奥氏体到马氏体的相变

3.1 奥氏体相

奥氏体相内的应力场记为 T^- , 它有以下简单形式

$$T^- = \begin{bmatrix} T_{11}^- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (22)$$

借助于式(11), 我们有

$$E^- = MT^- = \begin{bmatrix} \frac{T_{11}^-}{E} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\nu T_{11}^-}{E} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\nu T_{11}^-}{E} \end{bmatrix}. \quad (23)$$

变形梯度为

$$\mathbf{F}^- = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}, \tag{24}$$

其中

$$\lambda_1 = \sqrt{1 + 2E_{11}^-}, \quad \lambda_2 = \sqrt{1 + 2E_{22}^-}. \tag{25}$$

第一 Piola-Kirchhoff 应力张量为

$$\boldsymbol{\pi} = \begin{bmatrix} \lambda_1 T_{11}^- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{26}$$

应变能为

$$W^- = (T_{11}^-)^2 / (2E)^-. \tag{27}$$

3.2 下屈服应力状态与上屈服应力状态

分别记下屈服应力状态和上屈服应力状态为 T^{yL} 和 T^{yU} ，它们有如下形式：

$$\mathbf{T}^{yL} = \begin{bmatrix} T_y^L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{T}^{yU} = \begin{bmatrix} T_y^U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{28}$$

应变 E^{yU} 与 E^{yL} 由下面式子给出：

$$\mathbf{E}^{yU} = \mathbf{M}\mathbf{T}^{yU} = \begin{bmatrix} \frac{T_y^U}{E} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\mathcal{V}_y^U}{E} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mathcal{V}_y^U}{E} \end{bmatrix}, \tag{29a}$$

$$\mathbf{E}^{yL} = \frac{E_y^L}{E_y^U} \mathbf{E}^{yU}. \tag{29b}$$

3.3 马氏体相

对单向拉伸下的合金带，可以设

$$\mathbf{N} = [N_1, N_2, 0]^T, \quad \mathbf{f} = [f_1, f_2, 0]^T. \tag{30}$$

借助于式(7)， $[\mathbf{F}]$ 可写为

$$[\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} f_1 N_1 & f_1 N_2 & 0 \\ f_2 N_1 & f_2 N_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{31}$$

我们遂有

$$\mathbf{F}^+ = \mathbf{F}^- + [\mathbf{F}] \tag{32}$$

和

$$\mathbf{E}^{\mathcal{B}} = \mathbf{E}^+ - \mathbf{E}^{yL}, \tag{33}$$

其中 $\mathbf{E}^+ = (\mathbf{F}_+^T \mathbf{F}_+ - \mathbf{I})/2$

将式(33)代入式(8)的逆形式得到 \mathcal{B} ，然后可得

$$\mathbf{T}^+ = \mathbf{T}^{yL} + \mathcal{B} \tag{34}$$

以及

$$[\pi] = \mathbf{F}^+ \mathbf{T}^- - \pi \cdot \quad (35)$$

对弹性变形借助于式(22)和式(23),对塑性变形借助于式(28)~(30)、(33)和(34),马氏体相的应力功函数由下式给出:

$$W^+ = \frac{1}{2} T_{AB}^U E_{AB}^U + \frac{1}{2} (T_{AB}^{yU} + T_{AB}^{yL}) (E_{AB}^{yL} - E_{AB}^{yU}) + T_{AB}^{yL} E_{AB}^L + \frac{1}{2} T_{AB}^L E_{AB}^L \cdot \quad (36)$$

将式(30)的第1式和式(35)代入跳跃条件(3)中,将式(26)、(27)、(30)以及式(36)代入Maxwell关系式(4)中,可得如下方程:

$$q_1(T_{11}^-, f_1, f_2, N_1, N_2) = 0, \quad (37)$$

$$q_2(T_{11}^-, f_1, f_2, N_1, N_2) = 0, \quad (38)$$

$$q_3(T_{11}^-, f_1, f_2, N_1, N_2) = 0 \cdot \quad (39)$$

至此,相变分析就归结为寻求 T_{11}^- 的最小值,在该最小值下,由方程(37)~(39)以及 $N_1^2 + N_2^2 = 1$ 所组成的方程组有一个 $[N_1, N_2, f_1, f_2]^T$ 的实数解。而且该实数解必须是物理上可以接受的。由于 $T_{11}^- > 0$, 对应于 $N_1 > 0$ 和 $N_2 < 0$, 则必须有 $f_1 > 0$ 和 $f_2 > 0$, 以保证 $[E_{11}] > 0$ 且 $[E_{22}] < 0$, 换言之,处于马氏体相变带内的材料应该进一步被拉伸。

方程(37)~(39)是强非线性的,它们的表达式冗长,其中 T_{11}^- 已被 T_{m11} 所替换。只能求得方程(37)~(39)的数值解。

3.4 数值结果

对方程(37)~(39)以及 $N_1^2 + N_2^2 = 1$ 的数值求解表明,如果 $[N_1, N_2, f_1, f_2]^T$ 是一个实数解,则 $[N_1, -N_2, f_1, f_2]^T$, $[-N_1, N_2, f_1, f_2]^T$ 和 $[-N_1, -N_2, f_1, f_2]^T$ 也是其实数解。即方程组实数解的组数总是4的数倍。由于后面3组解可以通过刚体转动由第一组解得到,不失一般性,在后面的分析中我们只考虑 $N_1 \geq 0, N_2 \leq 0, f_1 \geq 0$ 和 $f_2 \geq 0$ 的一组解。

数值求解也表明,当 $T_{11}^- < 392$ 时,无关于 $[N_1, N_2, f_1, f_2]^T$ 的实数解。当

$$(T_{11}^-)_{\min} = 392.773 \text{ MPa} \cdot \quad (40)$$

最终得到的一组物理上可以接受的实数解是

$$\begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ N_1 \\ N_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3.22656390875090E-04 \\ 2.22130310249591E-04 \\ 8.24310080359931E-01 \\ -5.66138579693174E-01 \end{Bmatrix} \cdot \quad (41)$$

于是,我们得到Maxwell应力为

$$\mathbf{T}^- = \begin{bmatrix} 392.773 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (42)$$

奥氏体相内的应变为

$$\mathbf{E}^- = \begin{bmatrix} 6.39696 \times 10^{-3} & 0 & 0 \\ 0 & 1.91909 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0 & 1.91909 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \cdot \quad (43)$$

马氏体相内的应力与应变分别为

$$\mathbf{T}^+ = \begin{bmatrix} 392.664 & -0.0365578 & 0 \\ -0.0365578 & 0.0515457 & 0 \\ 0 & 0 & 5.96887 \end{bmatrix}, \quad (44)$$

和

$$E^+ = \begin{bmatrix} 6.66468 \times 10^{-3} & -7.74025 \times 10^{-7} & 0 \\ 7.7425 \times 10^{-7} & 2.04476 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0 & 1.91909 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \cdot \quad (45)$$

马氏体相带边界与加载方向间的夹角由 $\alpha = \pi/2 + \arctan(N_2/N_1)$ 给出。遂求得

$$\alpha = 55.47^\circ \quad (46)$$

此结果与实验中观察到的处于 51° 与 60° 之间的夹角吻合得很好。

本文得到的 T_{11} 值为 392.773 MPa, 与之对应的名义应力为 395.278 MPa, 与实验中所观测到的 393 MPa 只有 0.58% 的误差。

根据相变理论, 忽略发热和耗散, 马氏体相变带将会在名义应力为 395.278 MPa 的常值下扩展, 这和实验所观测到的一样。

4 结论及进一步工作

单向拉伸下镍钛合金带中从奥氏体到马氏体的相变是一种典型的应力导致的相变。借助于应力导致的相变理论, 这一相变被成功地预测, Maxwell 应力、奥氏体相与马氏体相内的应力和应变以及相边界的倾角都被确定。分析的结果与实验的观察结果相吻合。

如果考虑相变过程中的放热, 将可以预测出在相边界扩散过程中的相变应力的增长。

致谢 谨对英国 Keel 大学数学系 Y. B. Fu 教授表示衷心的感谢, 感谢他的建议和有益的讨论。

[参 考 文 献]

- [1] Shaw J A, Kyriakides S. Thermomechanical aspects of NiTi[J]. *J Mech Phys Solids*, 1995, **43**(8): 1243-1281.
- [2] Shaw J A, Kyriakides S. On the nucleation and propagation of phase transformation fronts in a NiTi alloy[J]. *Acta Materialia*, 1997, **45**(2): 683-700.
- [3] Shaw J A, Kyriakides S. Initiation and propagation of localized deformation in elasto-plastic strips under uniaxial tension[J]. *Internat J Plasticity*, 1998, **13**(10): 837-871.
- [4] Gurtin M E. *Configurational Forces as Basic Concepts of Continuum Physics* [M]. New York: Springer, 2000.
- [5] Fu Y B, Ogden R W. *Nonlinear Elasticity: Theory and Applications* [M]. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2001.
- [6] Fu Y B, Freidin A B. Characterization and stability of two-phase piecewise-homogeneous deformations[J]. *Proc Roy Soc Lond A*, 2004, **460**(10): 3065-3094.
- [7] 黄克智, 黄永刚. 固体本构关系[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
- [8] Rice J R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity[J]. *J Mech Phys Solids*, 1971, **19**(6): 433-455.
- [9] Rice J R. Continuum mechanics and thermodynamics of plasticity in relation to microscale deformation mechanics[A]. In: Argon A S, Ed. *Constitutive Equations in Plasticity* [C]. New York: MIT Press, 1975, 23-79.
- [10] Hill R, Rice J R. Constitutive analysis of elastoplastic crystals at arbitrary strain[J]. *J Mech Phys Solids*, 1972, **20**(6): 401-413.

- [11] Hill R, Rice J R. Elastic potential and the structure of inelastic constitutive laws[J]. SIAM J Appl Math, 1973, 25(3): 448-461.

Analysis of Phase Transformation From Austenite to Martensite in NiTi Alloy Strips Under Uniaxial Tension

XIE Yǔ-xin, ZHANG Yì-tong, XU Jiā-fu

(Department of Mechanics, Tianjin University, Tianjin 300072, P. R. China)

Abstract: Phase transformation from austenite to martensite in NiTi alloy strips under uniaxial tension has been observed in experiments and has been numerically simulated as a localized deformation. This work presented an analysis of that using the theory of phase transformation. The jump of deformation gradient across interface between the two phases and the Maxwell relation were considered. Governing equations for the phase transformation were derived. The analysis was reduced to finding the minimum value of the loading at which the governing equations have a unique, real, physically acceptable solution. The equations were solved numerically and it is verified that the unique solution exists definitely. The Maxwell stress, the stresses and strains inside both austenite and martensite phases, and the transformation front orientation angle were determined that are in reasonably good agreement with experimental observations.

Key words: stress-induced phase transformations; Maxwell relation; NiTi alloy; austenite; martensite