Materials Physics and Mechanics 22 (2015) 176-182 Received: February 24, 2015

ТЕОРИЯ ПЛОСКОГО НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ В ТОНКОМ СЛОЕ ОБРАЗЦА С УЧЁТОМ АУСТЕНИТНО-МАРТЕНСИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ

Э.Л. Аэро*, А.Л. Корженевский, А.Н. Булыгин

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,

Большой пр. 61, В.О., Санкт-Петербург, 199178, Россия

*e-mail: 16aero@mail.ru

Аннотация. Развита аналитическая теория плоского напряженного состояния, возникающего в бесконечно тонком слое. Учитываются не только большие упругие деформации, но и аустенитно-мартенситные превращения, порождающие специфические микродеформации, нарушающие сплошность и бездефектность кристалла. Используется разработанная ранее модель сложной кристаллической решетки, состоящей из двух взаимно проникающих подрешеток, так что двойной континуум позволяет описать возможность нарушения не только дальнего, но и ближнего порядка. Для этого рассматривается закон баланса полярного (не аксиального) момента количества движения, учитывающего микросмещения между соседними атомами. При этом возможна кардинальная перестройка решётки, в частности, изменение числа ближайших соседей, что не рассматривается в классической теории фазовых переходов Ландау. Аналитическая форма теории впервые открывает возможности для дальнейшего развития и инженерных методов изучения материалов.

1. Введение

Одним из постулатов континуальной механики является условие неизменности в процессе деформирования локальной топологии - ближайшая окрестность материальной частицы всегда состоит из одних и тех же частиц. Иными словами, структура и силовые связи не перестраиваются. Отказ от этого ограничения требует соединения в модели среды континуальных и дискретных аспектов. Ограничимся здесь предельно простой полумикроскопической моделью. Положим, что дискретные степени свободы могут быть введены в континуум посредством дополнительного слагаемого в упругом потенциале в виде периодической функции межатомных микросмещений u, отличных от макросмещений U, связывающих исходное и конечное состояние материальной точки. Внутриячеечные или микросмещения обычно вводятся в теории оптических колебаний решеток ионных кристаллов, однако, лишь в инфинитезимальном приближении [1, 2]. Тогда макрополе U отвечает акустической ветви колебаний. Истинно оптические колебания возбуждаются за счет электрического поля, которое расщепляет совместное движение подрешеток. В случае же неполярной решетки это становится, возможно, в результате потери устойчивости дискретной структуры при больших сдвигах при достижении точки бифуркации. В этом случае корректно говорить о псевдооптических модах или микродеформациях.

Кристаллы, испытывающие мартенситные превращения (МП) как раз и характеризуются большими сдвиговыми деформациями начальной аустенитной матрицы. Кроме того, эти превращения не описываются теорией фазовых переходов Ландау, поскольку для них не выполняется соотношение группа-подгруппа между группами симметрии аустенитной и мартенситной фаз. В то же время, как это было отмечено в наших предыдущих работах [3, 4], наличие критических значений смещений подрешеток вдоль определенных направлений, приводит к возникновению новых элементов симметрии. Поскольку это происходит при любом значении смещения u, кратном критическому, то полная симметрия кристаллической решетки периодически восстанавливается. Ясно, что и энергия системы должна быть периодической функцией критических смещений. Отсюда следует, что радикальное отличие теории МП от фазовых переходов типа Ландау состоит в том, что в последней энергия системы (термодинамический потенциал) имеет только два минимума, а для описания МП необходимо рассматривать периодические потенциалы, имеющие бесконечное число минимумов.

Поскольку критические смещения имеют значения, составляющие значительные доли межатомных расстояний, то «жесткое» смещение подрешеток для реализации МП потребовало бы огромных сдвиговых напряжений атомного порядка. Физическая ситуация похожа на ту, которая была при анализе проблемы теоретической прочности кристаллов, когда совпадение вычисленного значения предела упругости с наблюдаемым потребовало рассмотрения промежуточных неоднородных деформаций кристалла. Как известно, дислокационные решения, которые описывают такие деформации, были получены в рамках модели Френкеля-Конторовой, также имеющей периодический потенциал и учитывающей сжимаемость решетки. В силу указанной аналогии наша модель МП имеет похожую математическую структуру выражения для плотности потенциала, дополненную, однако, членом, который учитывает взаимодействие поля деформаций с градиентом поля микросмещений. Надо оговориться, что простая билинейная форма этого члена в эффективном потенциале появляется в результате редукции инварианта более высокого порядка по полю критических смещений, которая возможна из-за независимости значения критического смещения от внешних условий в так называемой предельной фазе [5]. Хотя эта редукция упрощает математическую структуру системы уравнений равновесия, получающиеся уравнения для макро- и микродеформаций остаются связанными. Основной целью настоящей работы является выработка процедуры расцепления этих уравнений, которая позволяет свести общую задачу определения поля макродеформации тонкой пластины к решению бигармонического уравнения. Для оставшегося поля двухкомпонентных микросмещений удается найти точные решения в тонких пластинах различной формы.

2. Основные соотношения. Учет взаимодействия мод микро и макродеформаций

Рассматривается модель с двумя подрешетками, которые совмещаются (сливаются в одну или переходят из начального варианта в симметрийно эквивалентный, например, сводящийся к общему повороту решетки) сдвигом на постоянный структурный вектор $\vec{a}$, являющийся параметром сложной решетки. Тогда в линейной теории кристаллической решетки [1, 2] получаются два уравнения - для акустических и оптических мод соответственно, для полей макроскопических и микроскопических смещений $U_i(x, y, t)$, $u_i(x, y, t)$. Первое описывает смещения центров кристаллических ячеек - элементов массы, как и в классической теории сплошной среды. Второе описывает взаимные смещения атомов внутри ячейки - отвечает за изменение ближнего порядка в сложной решетке.

Мы получим нелинейные уравнения равновесия, варьируя функционал энергии для заданной области (B,H), который определен следующим образом

$$E=(1/8pBH)\int_0^B\int_0^H edxdy\,, \tag{2.1}$$

$$e=(1/2)\lambda_{ikjm}U_{i,k}U_{j,m}+(1/2)k_{ikmn}u_{i,k}u_{m,n}+C_{ikjm}U_{i,k}u_{j,m}+p(1-\cos u)=$$

$$=(1/2)\lambda^{-1}_{ikjm}\sigma_{ik}\sigma_{jm}+(1/2)\hat{k}_{ikmn}u_{i,k}u_{m,n}+p(1-\cos u)\,. \tag{2.2}$$

Здесь $u=\sqrt{(u_n a_{nm}u_m)}$, где - a_{nm} тензор обратных длин ячейки. Далее, $U_{i,k}$, $u_{i,k}$ - пространственные производные, обозначенные запятой в тензорных индексах. Круглые скобки в тензорах материальных констант означают симметрию по заключенным в них индексам, то есть

$$\lambda_{(ik)(jm)}=\lambda_{(ki)(mj)},\quad C_{(ik)(jm)}=C_{(ki)(mj)},\quad k_{(ik)(jm)}=k_{(ki)(mj)},\quad \hat{k}_{(ik)(jm)}=\hat{k}_{(ki)(mj)}\,,$$

Избегая загромождения формул, будем далее подразумевать эти обозначения с применением скобок в индексах.

Первое слагаемое в (2.2) представляет собой упругую энергию деформирования, а последнее, содержащее периодическую функцию микросмещений со сравнительно небольшими периодами (подробнее см. [3, 4]). Это слагаемое представляет энергию взаимодействия подрешеток инвариантную к их жесткому смещению на соответствующий период.

Перекрестное слагаемое с коэффициентом C_{ikjm} отвечает за принципиально важное взаимодействие поля деформаций с микроскопическим полем внутренней степени свободы (отвечающей внутриячеечной перестройке атомной конфигурации). Выбор его формы в (2.2) определяется тем, что мы ищем, вообще говоря, решения уравнений

$$\rho\ddot{U}_x=\sigma_{xk,k}\,,\quad \rho\ddot{U}_y=\sigma_{yk,k}\,. \tag{2.3}$$

Здесь $U_i\to U_x,U_y,0;\quad u_i\to u_x,u_y,0$ - компоненты макро- и микросмещений.

$$\mu\ddot{u}_x+P_1\sin u_x=\bar{k}_1u_{x,xx}+\bar{k}_3u_{x,yy}+\bar{k}_{23}u_{y,yx}+(S_1\sigma_{xx}+S_2\sigma_{yy})_{,x}\,,$$

$$\mu\ddot{u}_y+P_2\sin u_y=\hat{k}_1u_{y,yy}+\bar{k}_3u_{y,xx}+\hat{k}_{23}u_{x,xy}+(S_2\sigma_{xx}+S_4\sigma_{yy})_{,y}\,, \tag{2.4}$$

$$U_x=U_x(x,y);U_y=U_x(x,y);U_z=0;\ u_x=u_x(x,y);u_y=u_y(x,y);u_z=0\,. \tag{2.5}$$

3. Статические уравнения на двухкомпонентные поля микро и макросмещений в анизотропных телах

Рассмотрим наиболее простые кристаллы кубической, гексагональной и ромбической сингоний. Для них «акустические» уравнения (2.3) имеют вид

$$0=\lambda_1U_{x,xx}+\lambda_{12}U_{y,xy}+\lambda_2U_{x,yy}+c_1u_{x,xx}+c_{12}u_{y,xy}+c_2u_{x,yy}\,, \tag{3.1}$$

$$0=\lambda_1U_{y,yy}+\lambda_{12}U_{x,xy}+\lambda_2U_{y,xx}+c_1u_{y,yy}+c_{12}u_{x,xy}+c_2u_{y,xx}\,, \tag{3.2}$$

Напряжения представимы формулами

$$\sigma_{xx}=\lambda_1U_{x,x}+(\lambda_{12}-\lambda_2)U_{y,y}+c_1u_{x,x}+(c_{12}-c_2)u_{y,y}\,, \tag{3.3}$$

$$\sigma_{yy} = (\lambda_{12} - \lambda_2)U_{x,x} + \lambda_1 U_{y,y} + (c_{12} - c_2)u_{x,x} + c_1 u_{y,y}\,, \tag{3.4}$$

$$\sigma_{xy} = \lambda_2 (U_{x,y} + U_{y,x}) + c_2 (u_{x,y} + u_{y,x})\,. \tag{3.5}$$

Уравнения будем анализировать в форме Эри

$$\chi_{,xx} = \sigma_{yy}\,, \qquad \chi_{,yy} = \sigma_{xx}\,, \qquad \chi_{,xy} = -\sigma_{xy}\,, \tag{3.6}$$

Уравнение равновесия (2.3) в результате представлений (3.6) удовлетворяются тождественно.
Для функции Эри имеем соотношения для напряжений

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} = \lambda_1 U_{x,x} + \lambda_2 U_{y,y} + c_1 u_{x,x} + c_2 u_{y,y}\,, \tag{3.7}$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = \lambda_1 U_{y,y} + \lambda_2 U_{x,x} + c_2 u_{x,x} + c_1 u_{y,y}\,, \tag{3.8}$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial y} = \lambda_3 (U_{y,x} + U_{x,y}) + c_3 (u_{y,x} + u_{x,y})\,. \tag{3.9}$$

Суммируя (3,7) и (3.8) пишем

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \nabla^2 \chi = (\lambda_1 + \lambda_2) div U + (c_1 + c_2) div\, u\,. \tag{3.10}$$

В результате уравнения равновесия удовлетворяются тождественно, то есть

$$\sigma_{xx,x} + \sigma_{xy,y} = 0 \qquad \text{и} \qquad \sigma_{yy,y} + \sigma_{xy,x} = 0\,. \tag{3.11}$$

В настоящей модели согласно (3.7)-(3.9) получим

$$0 = \lambda_1 U_{x,xx} + (\lambda_2 + \lambda_3) U_{y,yx} + c_1 u_{x,xx} + (c_2 + c_3) u_{y,yx}\,, \tag{3.12}$$

$$0 = \lambda_1 U_{y,yy} + (\lambda_3 + \lambda_2) U_{y,xx} + c_1 u_{y,yy} + (c_3 + c_2) u_{y,xx}\,. \tag{3.13}$$

4. Микромоментные эффекты

Подставим эти выражения для вторых производных основных характеристик смещений U_x, U_y и микросмещений u_x, u_y в «оптические» уравнения (1.4). Получим

$$P_1 \sin u_x = k_1 u_{x,xx} + (k_2 + k_3) u_{y,xy} + k_3 u_{x,yy} + \breve{c}_1 U_{x,xx} + (\breve{c}_2 + \breve{c}_3) U_{y,xy}\,, \tag{4.1}$$

$$P_2 \sin u_y = k_1 u_{y,yy} + (k_2 + k_3) u_{x,yx} + k_3 u_{y,xx} + \breve{c}_1 U_{y,yy} + (\breve{c}_2 + \breve{c}_3) U_{x,yx}\,. \tag{4.2}$$

Здесь $\breve{c} \neq c$ поскольку $c_{iklm} \neq c_{lmik}$.
Перепишем эти уравнения в других обозначениях, используя (2.4),

$$P_1 \sin u_x = \bar{k}_1 u_{x,xx} + \bar{k}_3 u_{x,yy} + (\bar{k}_{23} u_{y,y} + S_1 \sigma_{xx} + S_2 \sigma_{yy})_{,x}\,, \tag{4.3}$$

$$P_2 \sin u_y = \hat{k}_1 u_{y,yy} + \bar{k}_3 u_{y,xx} + (\hat{k}_{23} u_{x,x} + S_2 \sigma_{xx} + S_4 \sigma_{yy})_{,y}\,. \tag{4.4}$$

Заметим, что, несмотря на значительное упрощение общего подхода, приведенные уравнения (4.3), (4.4) всё же в общем виде представляют весьма сложную проблему, поскольку микродеформации не разделены относительно полей u_x, u_y из-за членов с перекрестными производными. В общем виде это сделать невозможно.

Ограничимся здесь случаем, когда неоднородные слагаемые (в круглых скобках, в том числе и производные напряжений) в уравнениях (4.3), (4.4) учитываются в независимой граничной задаче. Заметим, что они обращаются в нуль не только в случае постоянных напряжений, но и в более общем случае, когда

$$S_1\sigma_{xx} + S_2\sigma_{yy} = -\bar{k}_{23}u_{y,y} + f_1(y); \qquad S_2\sigma_{xx} + S_4\sigma_{yy} = -\widehat{k}_{23}u_{x,x} + f_2(x). \tag{4.5}$$

Здесь f обозначает произвольную функцию.
Тогда полная система уравнений (4.3), (4.4) принимает вид:

$$P_1 \sin u_x = \bar{k}_1 u_{x,xx} + \bar{k}_3 u_{x,yy}, \qquad P_2 \sin u_y = \hat{k}_1 u_{y,xx} + \hat{k}_3 u_{y,yy}, \tag{4.6}$$

$$-\bar{k}_{23}u_{y,y} = S_1\sigma_{xx} + S_2\sigma_{yy} - f_1(y); \quad -\widehat{k}_{23}u_{x,x} = S_2\sigma_{xx} + S_4\sigma_{yy} - f_2(x). \tag{4.7}$$

Здесь выражения, содержащие напряжения, можно выразить через смещения U_x, U_y и микросмещения u_x, u_y в соответствии с формулами (3.3) и (3.5). Тогда в последних формулах следует принять

$$S_1\sigma_{xx} + S_2\sigma_{yy} = s_1U_{x,x} + s_2U_{y,y} + \alpha_1u_{x,x} + \alpha_2u_{y,y},$$

$$S_2\sigma_{xx} + S_4\sigma_{yy} = s_3U_{x,x} + s_4U_{y,y} + \alpha_3u_{x,x} + \alpha_4u_{y,y}. \tag{4.8}$$

Производя с их помощью замену в (4.7), перепишем их вначале так

$$-(\widehat{k}_{23} + \alpha_3)u_{x,x} = s_3U_{x,x} + s_4U_{y,y} + \alpha_4u_{y,y} - f_2(x), \ -(\bar{k}_{23} + \alpha_2)u_{y,y} = s_1U_{x,x} + s_2U_{y,y} + \alpha_1u_{x,x} - f_1(y). \tag{4.9}$$

Разрешим эти выражения относительно $u_{x,x}$, $u_{y,y}$. Получим

$$u_{x,x} = s_5U_{x,x} + s_6U_{y,y} - f_3(x); \qquad u_{y,y} = s_7U_{x,x} + s_8U_{y,y} - f_4(y). \tag{4.10}$$

Громоздкие, но элементарные выражения для материальных коэффициентов в этих формулах не раскрываем. Используя эти формулы, запишем объединенное выражение, удобное в дальнейшем:

$$u_{x,x} + u_{y,y} = s_9U_{x,x} + s_{10}U_{y,y} + f_2(x)f_1(y) \cong s(U_{x,x} + U_{y,y}) + f_2(x)f_1(y). \tag{4.11}$$

Приближение допустимо для тонких слоев, предусмотренных моделью плоского напряженного состояния.

5. Окончательные результаты

Теперь обратимся к решению исходной задачи **(**2.2**)**. Для объединённой функции смещений и микросмещений (3.6), записанной выше через единую гармоническую функцию χ, имеем соотношение

$$\nabla^2\chi = \lambda_4 \cdot divU + c_4 \cdot divu. \tag{5.1}$$

Полное же единое описание всех компонент независимо от состава требует введения уже бигармонической функции. Функция χ оказывается бигармонической, если, вообще говоря, она удовлетворяет обобщённому уравнению вида

$$\Delta\Delta\chi = \nabla^4\chi = 0. \tag{5.2}$$

Решение этого уравнения обеспечивает частное, но точное решение двумерной задачи для напряжений. Для завершения всей проблемы необходимо решение двух укороченных уравнений синус-Гордона (4.6). Анализ подобных уравнений имеется в нашей работе [3].

6. Выводы

В заключение мы хотим отметить, что имеющиеся в литературе попытки построить теорию МФП не привели к созданию математической модели, анализ которой позволил бы описать количественно совокупность эффектов, характерных для таких переходов. Наш подход основан на таких фундаментальных свойствах, как существование трансляционной симметрии при относительном смещении подрешеток и наличии взаимодействия, эффективно билинейного по полю деформаций и градиентам смещения подрешеток. В наших предыдущих работах был рассмотрен случай так называемого реечного мартенсита – образцы неограниченной длины, но ограниченной ширины. В настоящей статье рассмотрена пластина - бесконечно тонкий образец, неограниченный в двух других направлениях. В нём развивается так называемая плоская деформация. Это вынуждает решать систему двух уравнений синус-Гордона, что, по мнению авторов, не имеет прецедента в литературе. Практическое применение полученных общих результатов связано с нетривиальной проблемой закалки тонких пластин без коробления их плоской формы.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 13-01-00224-а и № 13-02-91332-ННИО_а.

Литература

[1] М. Борн, Хуан Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток* (И.Л., Москва, 1958).
[2] А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки* (Вища школа, Харьков, 1988).
[3] E.L. Aero, A.L. Korzhenevskii // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 58.
[4] E.L. Aero, A.L. Korzhenevskii, A.N. Bulygin // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 230.
[5] P. Toledano, V. Dmitriev, *Reconstructive phase transitions* (World Scientific, Singapore, 1996).

THE THEORY OF PLANE DEFORMATION UNDER THE CONDITIONS OF AUSTENITE-MARTENSITE TRANSFORMATION

E.L. Aero*, A.L. Korzhenevskii, A.N. Bulygin

Institute for Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,

Bol'shoi prosp. 61, Vasilievskii Ostrov, St. Petersburg, 199178, Russia

*e-mail: 16aero@mail.ru

Abstract. The analytical approach of a plane deformation of a plate experiencing austenite-martensite transformation is developed. The thin plate is considered which energy takes into account the appearance of the martensitic transformation besides large elastic strains. The former generates specific microstrains that destroy compactness and translational order of the

original perfect crystal. Making use of the previously analyzed model of a complex lattice consisting from two mutually penetrating sublattices enable us to describe both the long and the short possible destruction of the crystal order. The conservation of the polar momentum that is coupled with a mutual shift of the sublattices is taken into account. A possible cardinal reconstruction of the whole lattice and in particular the change of the number of the nearest atomic neighbors is allowed in contrast to the classical Landau theory of phase transitions. It is relaxing of the latter restriction in our theory that enables us to apply it to crystals experiencing martensitic transformations.

Acknowledgements
This work was supported by grants from RFBR № 13-01-00224-a and № 13-02-91332-NNIO_a.

References
[1] M. Born, K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices* (Clarendon Press, Oxford, 1954).
[2] A.M. Kosevich, *The Crystal Lattice: Phonons, Solitons, Dislocations, Superlattices* (Wiley-VCH, 2006).
[3] E.L. Aero, A.L. Korzhenevskii // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 58.
[4] E.L. Aero, A.L. Korzhenevskii, A.N. Bulygin // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 230.
[5] P. Toledano, V. Dmitriev, *Reconstructive phase transitions* (World Scientific, Singapore, 1996).