

Матрица деформации Бейна для мартенситного перехода $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ в сплаве CuAlNi и кристаллографический ресурс превращения

© 2020

Чернышева Татьяна Юрьевна*¹, магистрант

Евард Маргарита Евгеньевна², кандидат физико-математических наук, доцент

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург (Россия)

*E-mail: chernysheva-taty@list.ru

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0480-9726>

²ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0550-688X>

Аннотация: В последнее время вырос интерес к сплавам на основе меди (в частности, сплавам CuAlNi, содержащим 10–14 % Al и 4–5 % Ni), обладающим узким температурным гистерезисом и демонстрирующим полный возврат деформации. Однако на данный момент работ, посвященных моделированию поведения сплавов с памятью формы на основе меди, практически нет, что обуславливает актуальность данного исследования. В работе рассмотрена микроструктурная модель механического поведения сплава типа CuAlNi с учетом протекающего в этом материале обратимого мартенситного превращения $\beta_1(D0_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$. В основе модели лежит важный параметр – матрица деформации. Необходимые расчеты были произведены в предположении малости деформаций. На основе имеющихся в литературе кристаллографических данных рассчитана матрица тензора деформации для одного из вариантов, образовавшегося в ходе данного превращения мартенсита. Полученная матрица используется в дальнейшем при моделировании функциональных свойств сплавов на основе CuAlNi. Выполнены расчеты, позволяющие определить кристаллографический ресурс превращения, т. е. максимальную деформацию кристаллической решетки для данного превращения. Произведено моделирование псевдоупругого поведения монокристалла CuAlNi, в ходе которого найдена ориентация монокристалла, при которой достигается деформация, примерно равная расчетному значению кристаллографического ресурса. Таким образом, построенная матрица деформации дает возможность адекватного моделирования поведения рассматриваемого сплава с памятью формы. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с имеющимися в литературе экспериментальными данными, что говорит о том, что построенная матрица деформации может быть применена для дальнейших расчетов.

Ключевые слова: эффект памяти формы; CuAlNi; монокристалл; матрица деформации; кристаллографический ресурс.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 19-01-00685.

Авторы выражают благодарность профессору А.Е. Волкову за участие в обсуждении результатов работы и ценные замечания.

Статья подготовлена по материалам докладов участников IX Международной школы «Физическое материаловедение» (ШФМ-2019) с элементами научной школы для молодежи, Тольятти, 9–13 сентября 2019 года.

Для цитирования: Чернышева Т.Ю., Евард М.Е. Матрица деформации Бейна для мартенситного перехода $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ в сплаве CuAlNi и кристаллографический ресурс превращения // Вектор науки Тольяттинского государственного университета. 2020. № 2. С. 82–89. DOI: 10.18323/2073-5073-2020-2-82-89.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время разработку и создание интеллектуальных материалов, которые благодаря своим функциональным свойствам способны определенным образом реагировать на внешние воздействия, можно назвать одной из основных задач материаловедения. Ярким примером таких материалов являются сплавы, обладающие эффектом памяти формы (ЭПФ) [1–3]. Наиболее известным и распространенным сплавом с памятью формы (СПФ) является никелид титана (TiNi), который нашел широкое применение в самых разных областях – от медицины до космического оборудования. Выбор данного материала обусловлен еще и тем фактом, что никелид титана, помимо памяти формы, имеет ряд других преимуществ: он обладает высокой коррозионной стойкостью, биологической совместимостью с тканями человеческого организма и значительной прочностью. Но этот сплав имеет и ряд недостатков, таких как высокая стоимость, сложность в обработке

деталей и отсутствие совершенной памяти формы при высоких температурах [4; 5]. В связи с этим рассматриваются другие сплавы с памятью формы, в том числе сплавы на основе меди [6]. Одними из самых известных являются сплавы CuAlNi (с содержанием алюминия 10–14 % и никеля 4–5 %). Отличительными свойствами данного сплава являются узкий гистерезис мартенситного превращения и совершенная память формы при высоких температурах [7]. Немаловажным преимуществом является более низкая по сравнению с никелидом титана стоимость данных сплавов.

Для эффективного использования сплавов с памятью формы, например при изготовлении приводов [8] и виброзащитных устройств [9], необходимы модели, позволяющие адекватно рассчитывать деформацию этих материалов. На данный момент существует довольно много моделей, описывающих поведение сплавов на основе TiNi [10], и совсем немного для CuAlNi.

Цель работы – расчет матрицы деформации превращения $\beta_1(D0_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ в монокристалле на основе

CuAlNi для дальнейшего моделирования функционально-механических свойств этого материала.

МИКРОСТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ

В настоящей работе используется микроструктурный подход, подробно описанный для сплавов типа TiNi в работах [11–13]. Представительный объем представляет собой поликристалл, состоящий из зерен, характеризующихся ориентациями кристаллографических осей. Расчеты производили в предположении малости деформаций. Использовалась гипотеза Райса, в рамках которой деформация каждого зерна может быть записана как сумма упругой, тепловой и фазовой деформаций:

$$\epsilon^{gr} = \epsilon^e + \epsilon^T + \epsilon^{Ph}$$

где ϵ^e – упругая деформация;
 ϵ^T – тепловое расширение;
 ϵ^{Ph} – фазовая деформация, связанная с протеканием мартенситного превращения.

В каждом из зерен возможно сосуществование N кристаллографически эквивалентных вариантов мартенсита и исходной аустенитной фазы. Поэтому деформация зерна ϵ^{gr} вычисляется посредством усреднения:

$$\epsilon^{gr} = (1 - \Phi^{gr}) \epsilon^A + \frac{1}{N} \sum_n \Phi_n \epsilon^{(n)}$$

где $\frac{1}{N} \Phi_n$ – объемная доля n -го варианта мартенсита;
 ϵ^A – тензор деформации аустенита;
 $\epsilon^{(n)}$ – тензор деформации n -го варианта мартенсита.
 Объемная доля мартенсита в зерне рассчитывается путем усреднения по всем вариантам мартенсита:

$$\Phi^{gr} = \frac{1}{N} \sum_n \Phi_n$$

При вычислении фазовой деформации в зерне усреднение также производится по всем мартенситным вариантам:

$$\epsilon^{Ph} = \frac{1}{N} \sum_n \Phi_n D_n \quad (1)$$

где D_n – тензор деформации n -го варианта мартенсита.
 Для одного из вариантов матрица тензора деформации D будет рассчитана ниже. Для остальных вариантов матрицы деформации вычисляются путем поворота этого тензора операторами, принадлежащими точечной группе симметрии аустенита. Из-за кубической симметрии аустенитной фазы β_1 оказывается, что существует двенадцать кристаллографически эквивалентных вариантов мартенсита ($N=12$) [14].

ПОСТРОЕНИЕ МАТРИЦЫ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ПРЕВРАЩЕНИИ $\beta_1(D0_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ В МОНОКРИСТАЛЛЕ CuAlNi

Построение матрицы деформации D является одним из важнейших этапов в разработке микроструктурной модели превращения, рассмотренной выше. Рассчитанная матрица будет использоваться при вычислении фазовой деформации по формуле (1).

В данной работе рассматривается превращение $D0_3 \leftrightarrow 18R$ в монокристалле CuAlNi [15]. Благодаря упорядоченности рассматриваемой кристаллической структуры в некотором, состоящем из зерен, представительном объеме, имеется возможность рассмотрения отдельных кристаллографических направлений, которые задаются векторами, выходящими из начала координат и оканчивающимися в узлах решетки.

Мартенситное превращение $D0_3 \leftrightarrow 18R$ можно рассматривать в 2 этапа [16; 17]:

- 1) деформация плоскости (110) исходной фазы (растяжение и сжатие) (рис. 1);
- 2) сдвиг в плоскости (010), характеризующийся вектором $\vec{s} = \frac{1}{18} [\bar{1}10]$ (рис. 2).

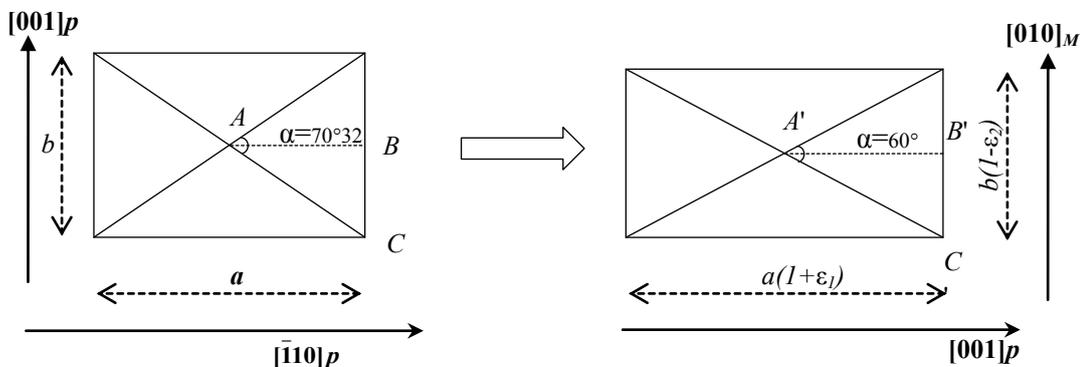


Рис. 1. Схема деформации плоскости (110) аустенитной фазы при превращении $D0_3 \leftrightarrow 18R$ в монокристалле CuAlNi
Fig. 1. The scheme of plane deformation (110) of austenitic phase during $D0_3 \leftrightarrow 18R$ transformation in a CuAlNi single crystal

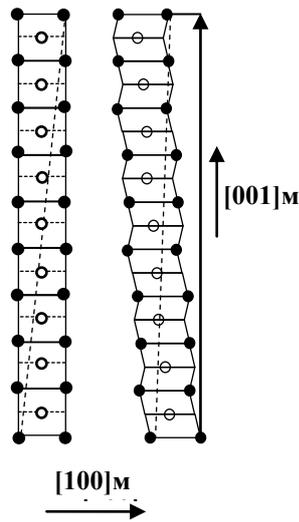


Рис. 2. Сдвиг и перемещение при превращении из аустенитной фазы $D0_3$ в мартенситную 18R [2]
 Fig. 2. Shift and displacement during transformation from $D0_3$ austenitic phase to 18R martensitic phase [2]

Рассмотрим подробнее этап 1. В результате сжатия вдоль направления $[001]$ и удлинения вдоль направления $[\bar{1}10]$ плоскость аустенитной фазы (110) переходит в плоскость мартенситной фазы (001) . При этом в течение превращения угол α , изображенный на рис. 1, меняет свое значение с $70^\circ 32'$ на 60° (что характерно для плотноупакованной структуры).

Найдем градиент деформации $(F^{(1)})_e$ в исходном базисе $e = \{[100], [010], [001]\}$ аустенитной фазы для 1-го этапа. Для этого за ε_1 обозначим относительное удлинение вдоль $[\bar{1}10]$, а за ε_2 – относительное сжатие вдоль $[001]$. Будем считать, что эти величины неотрицательны.

Введем нормированный базис $f = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}[110], \frac{1}{\sqrt{2}}[\bar{1}10], [001] \right\}$, с помощью которого можем записать градиент деформации в следующем виде:

$$(F^{(1)})_f = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \varepsilon_2 \end{pmatrix}.$$

Запишем матрицу перехода от базиса e к базису f . Обозначим эту матрицу $(A)_e^f$:

$$(A)_e^f = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Следующим шагом вычислим градиент деформации в базисе e :

$$(F^{(1)})_e = (A)_e^f (F^{(1)})_f ((A)_e^f)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \varepsilon_2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \times \\ \times \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 + \varepsilon_1 & -\varepsilon_1 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 2 + \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1 - \varepsilon_2) \end{pmatrix}.$$

Теперь введем базис g , в котором происходит сдвиг. Вычислим матрицу градиента деформации:

$$(F^{(2)})_g = I + \bar{s} \otimes \bar{n},$$

где $\bar{s}_g = \frac{1}{18}[\bar{1}10]$ – вектор смещения; $n = [110]$.

Получим

$$(F^{(2)})_g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{18} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \\ + \frac{1}{18} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{17}{18} & \frac{1}{18} & 0 \\ -\frac{1}{18} & \frac{19}{18} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Наконец, рассмотрев композицию матриц, можем рассчитать матрицу градиента деформации в базисе e :

$$(F)_g = (F^{(1)})_f (F^{(2)})_g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2+\varepsilon_1 & -\varepsilon_1 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 2+\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1-\varepsilon_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{17}{18} & \frac{1}{18} & 0 \\ -\frac{1}{18} & \frac{19}{18} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 2+\varepsilon_1 & -\varepsilon_1 & 0 \\ -\varepsilon_1 & 2+\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1-\varepsilon_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 17 & 1 & 0 \\ -1 & 19 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{18} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 34+18\varepsilon_1 & 2-18\varepsilon_1 & 0 \\ -2-18\varepsilon_1 & 38+18\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 36-36\varepsilon_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{18} \begin{pmatrix} 17+9\varepsilon_1 & 1-9\varepsilon_1 & 0 \\ -1-9\varepsilon_1 & 19+9\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 18-18\varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

Вычислим значения ε_1 и ε_2 . Для этого учтем угла α , а также воспользуемся предположением о малости относительного изменения объема $\theta = \det(F) - 1$ при превращении, где $\det(F)$ – определитель матрицы F .

Вычислим $\det(F)$:

$$\det(F) = \det \left(\frac{1}{18} \begin{pmatrix} 17+9\varepsilon_1 & 1-9\varepsilon_1 & 0 \\ -1-9\varepsilon_1 & 19+9\varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & 18-18\varepsilon_2 \end{pmatrix} \right) =$$

$$= \frac{1}{18^3} \left[18(1-\varepsilon_2) \left((17+9\varepsilon_1)(19+9\varepsilon_1) + (1-9\varepsilon_1)(1+9\varepsilon_1) \right) \right] =$$

$$= \frac{1}{18^2} \left[(1-\varepsilon_2) \left(17 \cdot 19 + 9\varepsilon_1 \cdot 36 + 81\varepsilon_1^2 + 1 - 81\varepsilon_1^2 \right) \right] = (1-\varepsilon_2)(1+\varepsilon_1)$$

Далее, основываясь на геометрических соображениях, найдем соотношение между ε_1 и ε_2 .

На рис. 1 показано, как происходит преобразование одного из слоев исходной высокотемпературной фазы (аустенита) в один из 6 типов возможных слоев плотноупакованной решетки в низкотемпературной фазе (мартенсите). Рассмотрим прямоугольные треугольники ABC и $A'B'C'$:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{70^\circ 32'}{2} \right) = \frac{b}{a} \approx 0,707, \quad \operatorname{tg} \left(\frac{60^\circ}{2} \right) = \frac{b(1-\varepsilon_2)}{a(1+\varepsilon_1)} \approx 0,577.$$

Следовательно, $\frac{(1-\varepsilon_2)}{(1+\varepsilon_1)} = 0,816$.

Решив систему $\begin{cases} \frac{(1-\varepsilon_2)}{(1+\varepsilon_1)} = 0,816 \\ (1-\varepsilon_2)(1+\varepsilon_1) - 1 = 0 \end{cases}$, получаем

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = 0,107 \\ \varepsilon_2 = 0,098 \end{cases}$$

Используя найденные значения ε_1 и ε_2 , матрицу градиента деформации можем записать следующим образом:

$$(F) = \begin{pmatrix} 0,998 & 0,002 & 0 \\ -0,109 & 1,109 & 0 \\ 0 & 0 & 0,902 \end{pmatrix}.$$

Тогда тензор деформации Грина – Лагранжа имеет следующий вид:

$$D = \frac{1}{2} (F^T F - I) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,998 & -0,109 & 0 \\ 0,002 & 1,109 & 0 \\ 0 & 0 & 0,902 \end{pmatrix} \times \\ \begin{pmatrix} 0,998 & 0,002 & 0 \\ -0,109 & 1,109 & 0 \\ 0 & 0 & 0,902 \end{pmatrix} - \\ - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0,0039 & -0,0594 & 0 \\ -0,0594 & 0,1149 & 0 \\ 0 & 0 & -0,0932 \end{pmatrix}$$

РАСЧЕТ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО РЕСУРСА ДЛЯ ПРЕВРАЩЕНИЯ $\beta_1(D0_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ В МОНОКРИСТАЛЛЕ CuAlNi

Кристаллографический ресурс обратимой фазовой деформации сплавов с памятью формы – это максимальная деформация кристаллической решетки при мартенситном превращении, его можно рассчитывать разными способами:

1) как максимальную деформацию решетки при мартенситном превращении в «приближении монокристалла» – превращение «монокристалл аустенита \leftrightarrow монокристалл мартенсита» в соответствии с определением, данным авторами работ [17; 18];

2) как максимальную макродеформацию в приближении изотропного поликристалла, когда зерна аустенита ориентированы хаотически, а деформация решетки либо усредняется по всем ориентировкам в пределах стандартного стереографического треугольника, либо считается, что в каждом зерне реализуется только наиболее благоприятный ориентационный вариант мартенсита [19];

3) как деформацию решетки в заданном направлении относительно осей образца с учетом текстуры исходного аустенита [20];

4) как деформацию формы превращенной области при превращении аустенита в мартенсит с определенным

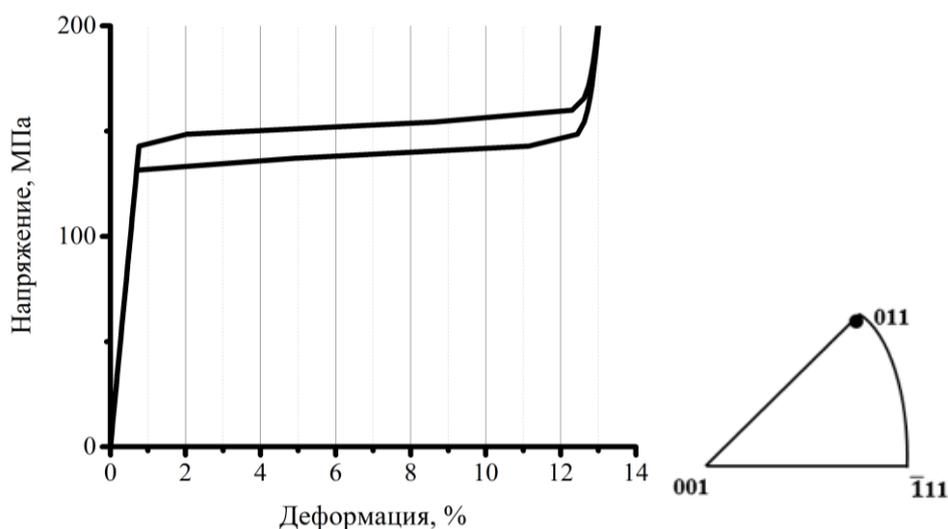


Рис. 3. Диаграмма деформирования, соответствующая ориентации монокристалла, указанной на стереографическом треугольнике
 Fig. 3. Deformation curve corresponding to the single crystal orientation specified on the stereographic triangle

вариантом ориентационного соотношения, с учетом двойникования мартенситных вариантов в кристалле мартенсита [21].

В настоящей работе кристаллографический ресурс рассчитывался по первому способу, т. е. в «приближении монокристалла». Для этого определены главные значения удлинений, которые через главные деформации тензора Грина – Лагранжа вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} E_1^{2l} &= \sqrt{1 + 2\lambda_1} - 1, \\ E_2^{2l} &= \sqrt{1 + 2\lambda_2} - 1, \\ E_3^{2l} &= \sqrt{1 + 2\lambda_3} - 1, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ – главные деформации тензора деформации Грина – Лагранжа [12].

Главные деформации находили путем решения соответствующего характеристического уравнения:

$$\begin{aligned} \text{Det}(D) &= \begin{vmatrix} 0,0039 - \lambda & -0,0594 & 0 \\ -0,0594 & 0,1149 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -0,0932 - \lambda \end{vmatrix} = \\ &= -\lambda^3 + 0,0256\lambda^2 + 0,0141\lambda + 0,00026 \end{aligned}$$

Решив кубическое уравнение, получаем, что $\lambda_1 = 0,0944$, $\lambda_2 = 0,1398$, $\lambda_3 = 0,0197$.

Тогда из (2) получаем $E_1^{2l} = -0,0996 (\approx -10\%)$, $E_2^{2l} = 0,13 (\approx 13\%)$, $E_3^{2l} = -0,0198 (\approx -2\%)$.

Таким образом, кристаллографический ресурс при мартенситном превращении $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ на растяжение равен 13 %, на сжатие – 10 %. Однако при сжатии в моно-

кристаллах CuAlNi реализуется иное мартенситное превращение: $\beta_1 \leftrightarrow \gamma$ [22; 23].

В процессе моделирования было выявлено, что, например, для ориентации монокристалла, близкой к $\langle 011 \rangle$, деформация достигает 13 % (рис. 3), что соответствует значению кристаллографического ресурса.

В ходе моделирования было проведено сравнение псевдоупругого поведения рассматриваемого монокристалла с экспериментальными данными из работы [24]. Наблюдалось хорошее соответствие ширины гистерезиса и углов наклона упругих участков в зависимости от ориентации монокристалла.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Полученная в работе матрица деформации позволяет определить кристаллографический ресурс рассматриваемого $\beta_1(D0_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ превращения, который на растяжение достигает 13 %.

2. Рассчитанная матрица деформации позволяет моделировать поведение сплавов на основе меди, обладающих эффектом памяти формы.

3. Для определенной ориентации монокристалла CuAlNi наблюдается возврат деформации, равный примерно 13 %, что согласуется с теоретическим значением, вычисленным в ходе работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зборщик А.М. Конспект лекций по дисциплине «Новые материалы в металлургии». Донецк: ДонНТУ, 2008. 253 с.
2. Funakubo H. Shape memory alloys. New York: Gordon and Breach Science Publishers, 1987. 275 p.
3. Otsuka K., Wayman C.M. Shape memory materials. Cambridge: Cambridge University press, 1998. 282 p.
4. Pushin V., Kuranova N., Marchenkova E., Pushin A. Design and development of Ti-Ni, Ni-Mn-Ga and Cu-Al-Ni-based alloys with high and low temperature shape

- memory effects // *Materials*. 2019. Vol. 12. № 16. Article number 2616.
5. Neiman A.A., Semin V.O., Meisner L.L., Ostapenko M.G. Structural decomposition and phase changes in TiNi surface layer modified by low-energy high-current pulsed electron beam // *Journal of Alloys and Compounds*. 2019. Vol. 80. P. 721–729.
 6. Лихачев В.А., Кузьмин С.Л., Каменцева З.П. Эффект памяти формы. Л.: Ленинградский университет, 1987. 216 с.
 7. Тихонов А.С., Герасимов А.П., Прохорова И.И. Применение эффекта памяти формы в современном машиностроении. М.: Машиностроение, 1981. 80 с.
 8. Jayachandran S., Akash K., Mani Prabu S.S., Manikandan M., Muralidharan M., Brolin A., Palani I.A. Investigations on performance viability of NiTi, NiTiCu, CuAlNi and CuAlNiMn shape memory alloy/Kapton composite thin film for actuator application // *Composites Part B: Engineering*. 2019. Vol. 176. Article number 107182.
 9. Пульнев С.А., Прядко А.И., Ястребов С.Г., Николаев В.И. Эффект памяти формы в монокристаллах Cu-Al-Ni, линейные и вращательные двигатели на их основе // *Журнал технической физики*. 2018. Т. 88. № 6. С. 843–849.
 10. Artini C. *Alloys and Intermetallic Compounds. From Modeling to Engineering*. Boca Raton: CRC Press, 2017. 367 p.
 11. Danilov A., Razov A. Thermo-mechanical and functional properties of NiTi shape memory alloy at high strain rate loading // *Shape memory alloys: properties, technologies, opportunities*. Switzerland: Trans Tech Publ., 2015. P. 457–479.
 12. Курдюмов Г.В. Бездиффузионные мартенситные превращения в сплавах // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1948. Т. 18. № 8. С. 999–1025.
 13. Волков А.Е. Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях // *Известия Российской академии наук. Серия: Физическая*. 2002. Т. 66. № 9. С. 1290–1297.
 14. Zhang X.Y., Sun Q.P., Yu. S.W., A non-invariant plane model for the interface in CuAlNi single crystal shape memory alloys // *Journal of the mechanics and physics of solids*. 2000. Vol. 48. № 10. P. 2163–2182.
 15. Tũma K., Stupkiewicz S. Phase-field study of size-dependent morphology of austenite–twinned martensite interface in CuAlNi // *International Journal of Solids and Structures*. 2016. Vol. 97–98. P. 89–100.
 16. Sakamoto H., Shimizu K. Effect of heat treatments on thermally formed martensite phases in monocrystalline Cu-Al-Ni shape memory alloy // *ISIJ International*. 1989. Vol. 29. № 5. С. 395–404.
 17. Thamburaja P., Anand L. Polycrystalline shape-memory materials: effect of crystallographic texture // *Journal of the mechanics and physics of solids*. 2001. Vol. 49. № 4. P. 709–737.
 18. Zhao L., Willemse P.F., Mulder J.H., Beyer J., Wei W. Texture development and transformation strain of a cold-rolled Ti50-Ni45-Cu5 alloy // *Scripta materialia*. 1998. Vol. 39. № 9. P. 1317–1323.
 19. Прокошкин С.Д., Коротичкий А.В., Браиловский В., Инаекян К.Э., Дубинский С.М. Кристаллографическая решетка мартенсита и ресурс обратимой деформации термически и термомеханически обработанных сплавов Ti-Ni с памятью формы // *Физика металлов и металловедение*. 2011. Т. 112. № 2. С. 180–198.
 20. Buchheit T.E., Wert J.A. Modeling the effects of stress state and crystal orientation on the stress-induced transformation of TiNi single-crystals // *Metallurgical and materials transactions A*. 1994. Vol. 25. № 11. С. 2383–2389.
 21. Miyazaki Sh., Otsuka K., Wayman C.M. The sharp memory mechanism associated with the martensitic transformation in Ti-Ni alloys-I. Self-accommodation // *Acta Metallurgica*. 1989. Vol. 37. № 7. P. 1873–1884.
 22. Sittner P., Novak V. Anisotropy of martensitic transformations in modeling of shape memory alloy polycrystals // *International journal of plasticity*. 1999. Vol. 16. № 10. P. 1243–1268.
 23. Niedbalski S., Durán A., Walczak M., Ramos-Grez J.A. Laser-assisted synthesis of Cu-Al-Ni shape memory alloys: Effect of inert gas pressure and Ni content // *Materials*. 2019. Vol. 12. № 5. Article number 794.
 24. Horikawa H., Ichinose S., Morri K., Miyazaki S., Otsuka K. Orientation $\beta 1 \rightarrow \beta 1'$ dependence of stress-induced martensitic transformation in Cu-Al-Ni alloy // *Metallurgical transactions A*. 1988. Vol. 19. № 4. P. 915–923.

REFERENCES

1. Zborshchik A.M. *Konspekt lektsiy po distsipline "Novye materialy v metallurgii"* [New Materials in Metallurgy]. Donetsk, DonNTU Publ., 2008. 253 p.
2. Funakubo H. *Shape memory alloys*. New York, Gordon and Breach Science Publ., 1987. 275 p.
3. Otsuka K., Wayman C.M. *Shape memory materials*. Cambridge, Cambridge University press Publ., 1998. 282 p.
4. Pushin V., Kuranova N., Marchenkova E., Pushin A. Design and development of Ti-Ni, Ni-Mn-Ga and Cu-Al-Ni-based alloys with high and low temperature shape memory effects. *Materials*, 2019, vol. 12, no. 16, article number 2616.
5. Neiman A.A., Semin V.O., Meisner L.L., Ostapenko M.G. Structural decomposition and phase changes in TiNi surface layer modified by low-energy high-current pulsed electron beam. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, vol. 80, pp. 721–729.
6. Likhachev V.A., Kuzmin S.L., Kamentseva Z.P. *Effekt pamyati formy* [Shape memory effect]. Leningrad, Leningradskiy universitet Publ., 1987. 216 p.
7. Tikhonov A.S., Gerasimov A.P., Prokhorova I.I. *Primenenie effekta pamyati formy v sovremennom mashinostroenii* [Applications of Shape Memory Effect in Modern Mechanical Engineering]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1981. 80 p.
8. Jayachandran S., Akash K., Mani Prabu S.S., Manikandan M., Muralidharan M., Brolin A., Palani I.A. Investigations on performance viability of NiTi, NiTiCu, CuAlNi and CuAlNiMn shape memory alloy/Kapton composite thin film for actuator application. *Composites Part B: Engineering*, 2019, vol. 176, article number 107182.

9. Pul'nev S.A., Pryadko A.I., Yastrebov S.G., Nikolaev V.I. Shape Memory Effects in Cu–Al–Ni Single Crystals and Linear and Rotary Engines on Their Basis. Technical Physics. *The Russian Journal of Applied Physics*, 2018, vol. 63, no. 6, pp. 817–823.
10. Artini C. *Alloys and Intermetallic Compounds. From Modeling to Engineering*. Boca Raton, CRC Press Publ., 2017. 367 p.
11. Danilov A., Razov A. Thermo-mechanical and functional properties of NiTi shape memory alloy at high strain rate loading. *Shape memory alloys: properties, technologies, opportunities*. Switzerland, Trans Tech Publ., 2015, pp. 457–479.
12. Kurdyumov G.V. Diffusionless martensitic transformations in alloys. *Zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki*, 1948, vol. 18, no. 8, pp. 999–1025.
13. Volkov A.E. Microstructural modeling of the alloy deformation under repeated martensitic transformations. *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Seriya: Fizicheskaya*, 2002, vol. 66, no. 9, pp. 1290–1297.
14. Zhang X.Y., Sun Q.P., Yu S.W., A non-invariant plane model for the interface in CuAlNi single crystal shape memory alloys. *Journal of the mechanics and physics of solids*, 2000, vol. 48, no. 10, pp. 2163–2182.
15. Tüma K., Stupkiewicz S. Phase-field study of size-dependent morphology of austenite–twinned martensite interface in CuAlNi. *International Journal of Solids and Structures*, 2016, vol. 97–98, pp. 89–100.
16. Sakamoto H., Shimizu K. Effect of heat treatments on thermally formed martensite phases in monocrystalline Cu–Al–Ni shape memory alloy. *ISIJ International*, 1989, vol. 29, no. 5, pp. 395–404.
17. Thamburaja P., Anand L. Polycrystalline shape-memory materials: effect of crystallographic texture. *Journal of the mechanics and physics of solids*, 2001, vol. 49, no. 4, pp. 709–737.
18. Zhao L., Willemse P.F., Mulder J.H., Beyer J., Wei W. Texture development and transformation strain of a cold-rolled Ti50–Ni45–Cu5 alloy. *Scripta materialia*, 1998, vol. 39, no. 9, pp. 1317–1323.
19. Prokoshkin S.D., Korotitskiy A.V., Dubinskiy S.M., Brailovski V., Inaekyan K.E. Crystal lattice of martensite and the reserve of recoverable strain of thermally and thermomechanically treated Ti–Ni shape-Memory alloys. *The Physics of Metals and Metallography*, 2011, vol. 112, no. 2, pp. 170–187.
20. Buchheit T.E., Wert J.A. Modeling the effects of stress state and crystal orientation on the stress-induced transformation of TiNi single-crystals. *Metallurgical and materials transactions A*, 1994, vol. 25, no. 11, pp. 2383–2389.
21. Miyazaki Sh., Otsuka K., Wayman C.M. The sharp memory mechanism associated with the martensitic transformation in Ti–Ni alloys-I. Self-accommodation. *Acta Metallurgica*, 1989, vol. 37, no. 7, pp. 1873–1884.
22. Sittner P., Novak V. Anisotropy of martensitic transformations in modeling of shape memory alloy polycrystals. *International journal of plasticity*, 1999, vol. 16, no. 10, pp. 1243–1268.
23. Niedbalski S., Durán A., Walczak M., Ramos-Grez J.A. Laser-assisted synthesis of Cu–Al–Ni shape memory alloys: Effect of inert gas pressure and Ni content. *Materials*, 2019, vol. 12, no. 5, article number 794.
24. Horikawa H., Ichinose S., Morri K., Miyazaki S., Otsuka K. Orientation $\beta_1 \rightarrow \beta_1'$ dependence of stress-induced martensitic transformation in Cu–Al–Ni alloy. *Metallurgical transactions A*, 1988, vol. 19, no. 4, pp. 915–923.

Bain's deformation matrix for martensitic transition $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ in CuAlNi alloy and the crystallographic resource of transformation

© 2020

Tatiana Yu. Chernysheva*¹, graduate studentMargarita E. Evard², PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg (Russia)

*E-mail: chernysheva-taty@list.ru

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0480-9726>²ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0550-688X>

Abstract: Recently, the interest in copper-based alloys (in particular, CuAlNi alloys containing 10–14 % Al and 4–5 % Ni) having the narrow temperature hysteresis and showing a full return of deformation increased. However, at the moment, there are practically no works dealing with the modeling of the behavior of Cu-based alloys with shape memory, which determines the relevance of this study. The paper considers a microstructural model of the mechanical behavior of the CuAlNi-type alloy, taking into account the reversible martensitic transformation $\beta_1(D0_3) \leftrightarrow \beta_1'(18R)$ occurring in this material. An important parameter – deformation matrix – is the basis of this model. The authors carried out necessary calculations in the deformation smallness assumption. The strain tensor matrix for this transformation is calculated based on the available crystallographic data in the literature. The authors used the obtained matrix for further modeling of functional properties of the CuAlNi-based alloys and performed calculations to determine the crystallographic transformation resource, i.e. the maximum deformation of the crystal lattice for given transformation. The simulation of the quasi-elastic behavior of a single CuAlNi crystal was carried out, which identified a certain orientation of a single crystal causing deformation approximately equal to the calculated value of the crystallographic resource. Thereby, the deformation matrix makes it possible to adequately simulate the behavior of the shape memory alloy under the study. The results obtained are in good agreement with the experimental data available in the literature, which suggests that the constructed deformation matrix can be used for further calculations.

Keywords: shape memory effect; CuAlNi; single crystal; deformation matrix; crystallographic resource.

Acknowledgements: The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, grant No. 19-01-00685. The authors express gratitude to Professor A.E. Volkov for the discussion of the research results and valuable comments.

The paper was written on the reports of the participants of the IX International School of Physical Materials Science (SPM-2019) with elements of a scientific school for young adults, Togliatti, September 9–13, 2019.

For citation: Chernysheva T.Yu., Evard M.E. Bain's deformation matrix for martensitic transition $\beta_1 \leftrightarrow \beta_1'$ in CuAlNi alloy and the crystallographic resource of transformation. *Vektor nauki Tolyattinskogo gosudarstvennogo universiteta*, 2020, no. 2, pp. 82–89. DOI: 10.18323/2073-5073-2020-2-82-89.