MECHANIKA
CZASOPISMO TECHNICZNE
TECHNICAL TRANSACTIONS
MECHANICS
WYDAWNICTWO POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ
4-M/2010
ZESZYT 20
ROK 107
ISSUE 20
YEAR 107

HENRYK PETRYK, STANISŁAW STUPKIEWICZ*

ENERGIA POWIERZCHNIOWA, DYSSYPACJA I EFEKTY SKALI W MODELOWANIU MIKROSTRUKTUR MARTENZYTYCZNYCH

INTERFACIAL ENERGY, DISSIPATION AND SIZE EFFECTS IN MODELLING OF MARTENSITIC MICROSTRUCTURES

Streszczenie

W niniejszym artykule przedstawiono energetyczne podejście do wieloskalowego modelowania ewolucji mikrostruktur martenzytycznych w stopach z pamięcią kształtu. Energia swobodna Helmholtza i energia dyssypowana w układzie reprezentowane są przez sumy członów odpowiadających energii objętościowej oraz energii powierzchniowej na granicach mikro-strukturalnych pomiędzy poszczególnymi wariantami martenzytu, fazami lub ziarnami. Ewolucja mikrostruktury jest wyznaczana drogą przyrostowej minimalizacji całkowitej energii dostarczanej do rozpatrywanego układu w procesie makroskopowo quasi-statycznym i izotermicznym. Ogólną procedurę zastosowano do numerycznych symulacji powstawania i ewolucji warstwowych struktur martenzytycznych indukowanych naprężeniowo w stopach z pamięcią kształtu. W energii powierzchniowej uwzględniono energię mikroodkształceń sprężystych w otoczeniu granic mikrostrukturalnych, wyznaczoną przy użyciu metody elementów skończonych. Policzone przykłady opisują ewolucję mikrostruktury martenzytycznej w formie laminatu trzeciego rzędu w stopie CuAlNi dla przemiany $\beta_1 \rightarrow \gamma_1'$ oraz jej zależność od sposobu uwzględnienia dyssypacji energii powierzchniowej.

Słowa kluczowe: interfacial energy, energy minimization, martensitic transformation

Abstract

The energy approach to multiscale modelling of evolution of martensitic microstructures in shape memory alloys (SMA) is presented. Both the Helmholtz free energy and the energy dissipated in the system comprise the usual bulk energy contributions as well as the interfacial energy terms corresponding to different scales, namely martensite-martensite, austenite-martensite and grain boundaries. Microstructure evolution is determined by incremental minimization of the energy supplied to the system in a macroscopically quasi-static and isothermal process. As an application of the general approach, the formation and evolution of stress-induced laminated microstructures in SMA has been studied. The interfacial energy of elastic micro-strains at microstructured interfaces has been estimated using the finite element method. Evolution of a rank-three laminated microstructure in a CuAlNi alloy undergoing the $\beta_1 \rightarrow \gamma_1'$ transformation has been determined, showing the effect of size-dependent dissipation related to the release of interfacial energy.

Keywords: energia powierzchniowa, minimalizacja energii, przemiana martenzytyczna

* Prof. dr hab. inż. Henryk Petryk, dr hab. inż. Stanisław Stupkiewicz, Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN.

BPK BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ

1. Wstęp

Mikrostruktury powstające w materiałach wskutek przemian martenztycznych mogą mieć skomplikowany i wieloskalowy charakter. Niniejsza praca dotyczy modelowania wielostopniowych struktur martenzytycznych typu warstwowego (laminatów), często obserwowanych w stopach z pamięcią kształtu [3].

Ze względu na mnogość możliwych mikrostruktur, do modelowania ich ewolucji niezbędne jest przyjęcie pewnych ogólnych reguł. Klasyczne podejście polegające na minimalizacji objętościowej energii swobodnej (sprężystej), por. [2, 3], wyjaśnia powstawanie mikrostruktur warstwowych i dostarcza podstawowych oszacowań ich parametrów geometrycznych. Dotyczy to jednak tylko parametrów bezwymiarowych, a ponadto zaniedbywana jest dyssypacja przy przejściach pomiędzy kolejnymi stanami równowagi. W ostatnio opublikowanej pracy [11] przedstawiono ogólniejsze podejście wariacyjne do modelowania ewolucji mikrostruktur martenzytycznych przy uwzględnieniu zarówno dyssypacji (niezależnej od skali czasu), jak i energii powierzchniowej na różnych poziomach mikrostruktury. Podstawowa koncepcja, motywowana wymogami stabilności, polega na *przyrostowej minimalizacji całkowitej energii* dostarczanej do rozpatrywanego układu w procesie modelowanym jako makroskopowo quasi-statyczny i izotermiczny, por. [10]. W procesach sterowanych kinematycznie sprowadza się to do minimalizacji sumy przyrostów energii swobodnej Helmholtza i energii dyssypowanej w materiale. Takie podejście zastosowano niedawno do symulacji ewolucji struktur martenzytycznych indukowanych naprężeniowo w stopach z pamięcią kształtu, bez uwzględnienia energii powierzchniowej [1, 4, 8] oraz z jej uwzględnieniem [12]. Celem niniejszej pracy jest analiza wpływu dyssypacji energii powierzchniowej na ewolucję mikrostruktury martenzytycznej, mającej formę laminatu trzeciego rzędu w stopie CuAlNi z pamięcią kształtu, w nawiązaniu do pracy [12].

Efekty skali przestrzennej, a więc charakterystycznych wymiarów struktury, wynikają tu z energii powierzchniowej na granicach pomiędzy poszczególnymi wariantami martenzytu, fazami lub ziarnami. Jest to zgodne z wcześniejszymi analizami dotyczącymi laminatów prostych [6, 15, 18]. Efekty skali często modeluje się przez wprowadzenie do wyrażenia na energię członów nielokalnych lub zależnych od wyższych gradientów, por. [7, 14]. W prezentowanych tu badaniach nie wprowadzamy takich członów, natomiast uwzględniamy energię mikroodkształceń sprężystych w otoczeniu zygzakowatej granicy pomiędzy austenitem i zbliźniaczonym martenzytem, jak również przy granicy laminatów typu austenit-martenzyt. Ta część energii jest najpierw wyznaczana dla komórki jednostkowej laminatu na drodze obliczeń numerycznych metodą elementów skończonych, przy czym nieznany kształt granicy rozdziału faz jest określany z warunku minimum energii względem swobodnych parametrów kształtu [16]. Pozostała część energii powierzchniowej wynikająca z oddziaływań w skali atomowej jest określana na podstawie oszacowań dostępnych w literaturze. W przypadku anihilacji granic mikrostrukturalnych, energia powierzchniowa może być dyssypowana albo przekształcana w energię swobodną typu objętościowego. Analiza wynikających stąd różnic w przewidywanej ewolucji parametrów mikrostrukturalnych jest przedmiotem niniejszej pracy.

BPK BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ

2. Podejście energetyczne do zagadnień wieloskalowych

2.1. Przyrostowa minimalizacja energii

Zastosowane tu podejście polega na przyrostowej minimalizacji energii dostarczanej do układu w celu wyznaczenia ewolucji mikrostruktury; syntetyczny opis tej metody został podany w pracy [10]. Przyjęto, że makroskopowa deformacja i przemiana martenzytyczna zachodzą w warunkach quasi-statycznych i izotermicznych w skali czasu stowarzyszonej z wolno zmieniającym się obciążeniem zewnętrznym. Chociaż przemiana martenzytyczna ma charakter dynamiczny i nieizotermiczny w krótkich przedziałach czasu rzeczywistego, to zastosowanie odpowiedniego uśredniania, po przejściu do wolniejszej skali czasu, prowadzi do zagadnienia quasi-statycznego z dyssypacją niezależną od tej skali [11].

Dla zadanego przyrostu parametru obciążenia zewnętrznego, rozwiązywane jest następujące podstawowe zagadnienie minimalizacji:

$$\Delta E \rightarrow \min \quad \text{przy ograniczeniach kinematycznych,} \tag{1}$$

gdzie ΔE oznacza ilość energii dostarczonej do złożonego układu termodynamicznego {ciało materialne + urządzenie obciążające + rezerwuar ciepła} w trakcie realizacji wirtualnych przyrostów, oznaczanych poniżej przez symbol Δ, w quasi-statycznym i izotermicznym procesie deformacji i przemiany fazowej.

W niniejszej pracy, gdzie wymuszenie zewnętrzne jest typu kinematycznego przy zerowej energii urządzenia obciążającego, przyrost energii ΔE wyraża się wzorem:

$$\Delta E = \Delta\Phi + \Delta D, \tag{2}$$

gdzie Φ jest całkowitą energią swobodną Helmholtza, a ΔD jest przyrostem energii dyssypowanej, w obu przypadkach na jednostkę objętości reprezentatywnej. Wielkość przyrostu jest każdorazowo ograniczona wymogiem jednokierunkowej przemiany fazowej przy określaniu przyrostu ΔD.

2.2. Energia swobodna wraz z energią powierzchniową

Całkowita energia swobodna Helmholtza Φ w reprezentatywnym elemencie materiału z mikrostrukturą wyraża się przez sumę energii objętościowej Φ_v i kilku członów energii powierzchniowej Φ_k na różnych poziomach,

$$\Phi = \Phi_v + \Phi_i, \qquad \Phi_i = \sum_k \Phi_k. \tag{3}$$

Każdy składnik Φ_k energii powierzchniowej wynika z gęstości energii powierzchniowej w określonej skali przestrzennej, scałkowanej po wszystkich granicach strukturalnych w tej skali i podzielonej przez objętość elementu reprezentatywnego. Wyróżnione są dwa rodzaje energii powierzchniowej, mianowicie energia oddziaływań w skali atomowej i energia kontynualnych mikro-odkształceń sprężystych przy granicach obszarów o wewnętrznej mikrostrukturze. Ta druga energia jest w istocie energią objętościową w niższej skali wymiarowej, jednakże odniesiona do jednostkowej powierzchni w skali wyższej (zgrubnej), jest interpre-

BPK BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ

towana jako energia powierzchniowa. Ta część energii w sposób istotny zależy od charakterystycznego wymiaru mikrostruktury, tak więc wartość odpowiedniego członu energii Φ_k *zależy od skali wymiarowej*.

Natomiast człon energii objętościowej Φ_v *nie zależy od skali wymiarowej* i obejmuje niezależny od skali wpływ odkształceń sprężystych, jak również energię chemiczną związaną z przemianą fazową. Należy podkreślić, że w podejściu mikromechanicznym przy wyznaczaniu energii objętościowej Φ_v stosowane są metody uśredniania bazujące na założeniu separacji skal. Dzięki uwzględnieniu energii mikro-odkształceń sprężystych w członach energii powierzchniowej, wymagania dotyczące separacji skal są mniej restrykcyjne.

2.3. Dyssypacja

Analogicznie do energii swobodnej, przyrost dyssypacji również składa się z członu dyssypacji objętościowej ΔD_v niezależnego od skali oraz zależnych od skali członów dyssypacji powierzchniowej ΔD_k,

$$\Delta D = \Delta D_v + D_i, \qquad \Delta D_i = \sum_k \Delta D_k. \tag{4}$$

Ewolucji mikrostruktury towarzyszy powstawanie nowych lub anihilacja istniejących granic strukturalnych. Dyssypacja towarzysząca powstawaniu nowych granic strukturalnych jest tu włączona do niezależnego od skali członu ΔD_v. Natomiast dyssypacja towarzysząca uwalnianiu zależnej od skali energii powierzchniowej Φ_k musi również zależeć od skali. Jako że przekształcenie energii powierzchniowej w objętościową energię swobodną jest możliwe jedynie w ograniczonym zakresie, wartość tej części dyssypacji może być znacząca. Przyjmujemy założenie, że zależny od skali człon dyssypacji ΔD_k jest określany jako cześć uwalnianej energii powierzchniowej $(-\Delta\Phi_k) > 0$,

$$\Delta D_k = \kappa_k \left\langle -\Delta\Phi_k \right\rangle, \quad \left\langle \psi \right\rangle = \begin{cases} \psi & \text{if } \psi > 0 \\ 0 & \text{if } \psi \le 0 \end{cases} \tag{5}$$

gdzie κ_k jest współczynnikiem z zakresu $0 \le \kappa_k \le 1$.

Niezależny od skali przyrost dyssypacji objętościowej ΔD_v obejmuje wszystkie pozostałe mechanizmy dyssypacyjne i jest dla uproszczenia przyjęty jako proporcjonalny do bezwzględnej wartości przyrostu udziału objętościowego η martenzytu, tj.:

$$\Delta D_v = f_c \left|\Delta\eta\right|, \tag{6}$$

gdzie $f_c > 0$ oznacza wartość progową termodynamicznej siły napędowej $f = -\partial\Phi_v / \partial\eta$. Powyższe wzory mają zastosowanie do wirtualnych przyrostów dostatecznie małych dla zapewnienia jednokierunkowości zachodzących przemian w ramach pojedynczego kroku obliczeniowego. Przy zaniedbaniu wszystkich członów związanych z energią powierzchniową, przyrostowa minimalizacja energii z przyrostem dyssypacji ΔD_v określonym przez (6) prowadzi do kryterium przemiany fazowej w postaci $\left|f\right| \le f_c$ wykorzystywanej uprzednio, np. w pracy [17].

BPK BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ

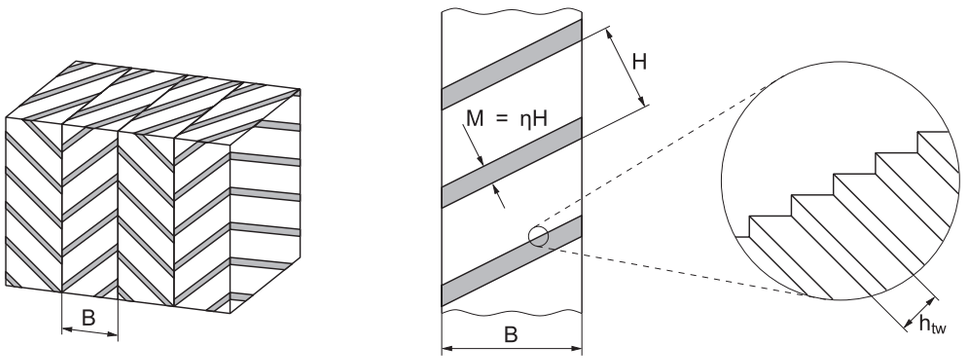
3. Ewolucja mikrostruktury w laminacie trzeciego rzędu

Rozpatrzmy periodyczny laminat trzeciego rzędu jako możliwie najprostszy model polikryształu stopu z pamięcią kształtu (rys. 1). Na najwyższym poziomie mikrostruktury, ziarna o dwóch orientacjach krystalograficznych i płaskich granicach ziaren tworzą laminat prosty. Pod wpływem obciążenia, na skutek indukowanej naprężeniowo przemiany martenzytycznej, w każdym ziarnie powstaje jedna rodzina równoległych płytek martenzytu. Z kolei każda płytka martenzytu jest zbliźniaczona, to znaczy składa się z dwóch wariantów martenzytu rozdzielonych równoległymi płaszczyznami bliźniakowania, a więc również ma formę laminatu. Charakterystyczne wymiary mikrostruktury pokazano na rysunku 1: B oznacza wielkość ziarna, M – grubość płytki martenzytu, H – odstęp płytek martenzytu, h_{tw} – grubość pary bliźniaków.

Przyjmując, że orientacje ziaren spełniają pewne warunki symetrii (por. [12]) i stosując związki liniowej teorii sprężystości dla materiału jednorodnego i izotropowego sprężyście z odkształceniami własnymi, gęstość objętościowej energii swobodnej Φ_v można wyrazić w następującej postaci:

$$\Phi_v = \phi_0 + \eta\Delta^{am}\phi_0 + \frac{1}{2}E\left(\varepsilon_u - \eta\overline{\varepsilon}^t\right)^2 + \frac{1}{2}qE\eta^2, \tag{7}$$

gdzie η oznacza udział objętościowy martenzytu, $\Delta^{am}\phi_0$ – tzw. energię chemiczną przemiany, E – moduł Younga, ε_u – makroskopowe odkształcenie osiowe, ε^t – składową osiową odkształcenia transformacji, natomiast q jest parametrem wzmocnienia, które związane jest z brakiem kompatybilności odkształceń transformacji w obu rozważanych ziarnach. Wzór (7) jest wynikiem ścisłego przejścia mikro-makro z uwzględnieniem pełnego trójwymiarowego stanu naprężenia i odkształcenia.



Rys. 1. Laminat trzeciego rzędu jako prosty model polikryształu

Fig. 1. Rank-three laminate as an idealized polycrystal

BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ

Energia powierzchniowa rozpartywana jest na trzech poziomach: na granicach bliźniaczych (γ_{tw}), na powierzchniach rozdziału austenitu i martenzytu (γ_{am}) oraz na granicach ziaren (γ_{gb}):

$$\gamma_{tw} = \gamma^a_{tw}, \quad \gamma_{am} = \gamma^a_{am} + \gamma^e_{am} = \gamma^a_{am} + \Gamma^e_{am} h_{tw}, \quad \gamma_{gb} = \gamma^e_{gb} = \Gamma^e_{gb} H \,. \tag{8}$$

γ^a_k oznacza energię w skali atomowej, natomiast γ^e_k oznacza energię mikroodkształceń sprężystych, która jest iloczynem niezależnego od skali parametru Γ^e_k oraz charakterystycznego wymiaru mikrostruktury na danym poziomie, por. rysunek 1.

Energia mikroodkształceń sprężystych $\gamma^e_{am} = \Gamma^e_{am} h_{tw}$ wynika z lokalnego niedopasowania poszczególnych wariantów martenzytu i austenitu (zbliźniaczona płytka martenzytu jest kompatybilna z austenitem jedynie w sensie średnim). Jest ona iloczynem niezależnego od skali parametru Γ^e_{am} oraz charakterystycznego wymiaru mikrostruktury na tym poziomie, czyli grubości pary bliźniaków h_{tw}. Podobne zależności zachodzą dla energii γ^e_{gb} na granicach ziaren. Parametry Γ^e_{am} oraz Γ^e_{gb} oszacowano w pracach [9, 12, 16] z wykorzystaniem metody elementów skończonych. Parametry γ^a_{tw} i γ^a_{am} charakteryzujące energię w skali atomowej oszacowano na podstawie literatury [5, 13], por. [12].

Wkład energii powierzchniowej do całkowitej energii swobodnej wyznaczamy jako iloczyn gęstości energii powierzchniowej na danym poziomie i całkowitej powierzchni granic międzyfazowych na tym poziomie. Dla prostej mikrostruktury pokazanej na rysunku 1 nie stanowi to problemu i w efekcie otrzymujemy gęstość energii powierzchniowej na jednostkową objętość w postaci:

$$\Phi_i = \Phi_{tw} + \Phi_{am} + \Phi_{gb}, \tag{9}$$

gdzie:

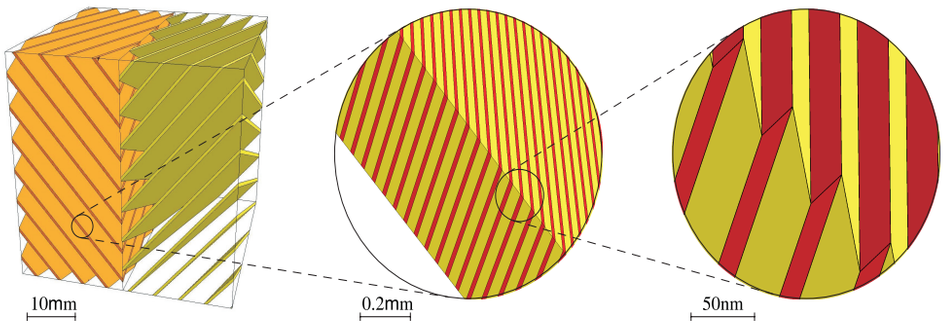
$$\Phi_{tw} = \frac{2\eta\gamma^a_{tw}}{h_{tw}}, \quad \Phi_{am} = \frac{2(\Gamma^e_{am} h_{tw} + \gamma^a_{am})}{H}, \quad \Phi_{gb} = \frac{2\Gamma^e_{gb} H}{B}. \tag{10}$$

W połączeniu z przyrostowym schematem minimalizacji energii (1) oraz wyrażeniami (4)–(6) na dyssypację, powyższe zależności stanowią kompletny model konstytutywny rozpatrywanego układu. Poniżej podano przykładowe wyniki obliczeń uzyskane dla przemiany $\beta_1 \rightarrow \gamma_1'$ w stopie CuAlNi. W szczególności pokazano wpływ dyssypacji, w tym dyssypacji zależnej od skali, na ewolucję parametrów mikrostruktury i na makroskopową odpowiedź materiału. Wartości parametrów materiałowych podano w pracy [12].

Na rysunku 2 pokazano przykładową mikrostrukturę uzyskaną w wyniku obliczeń przeprowadzonych dla wielkości ziarna B = 20 μm. Mikrostruktura ta odpowiada chwili, gdy udział objętościowy martenzytu jest równy η = 0,127 (podczas obciążania). Wszystkie wymiary charakterystyczne pokazane są w skali (patrz znaczniki skali).

Rysunek 3 (a, c, e) (kolumna lewa) przedstawia wyniki uzyskane z uwzględnieniem zależnej od skali dyssypacji opisanej równaniem (5) dla parametrów dyssypacji κ_k bliskich jedności (κ_{tw} = 1, κ_{am} = 0,95, κ_{gb} = 0,9). Rysunki te ilustrują wpływ wielkości ziarna B na makroskopową zależność naprężenie-odkształcenie oraz na ewolucję parametrów mikrostruktury H i M (na rysunku podano ewolucję parametru H^{-1}, który odpowiada gęstości płytek martenzytu). Zgodnie z argumentacją podaną w pracy [12] przyjęto, że dyssypacja związana ze zmianami parametru h_{tw} jest na tyle duża, że h_{tw} nie ulega zmianie podczas procesu. Tak więc w obliczeniach przyjęto, że $h_{tw} = h^0_{tw}$, gdzie h^0_{tw} oznacza grubość pary bliźniaków, gdy powstają pierwsze płytki martenzytu.

BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ



Rys. 2. Przykładowa mikrostruktura laminatu trzeciego rzędu (na rysunku austenit jest przezroczysty, widać płytki martenzytu). Rysunek zaczerpnięty z pracy [12]

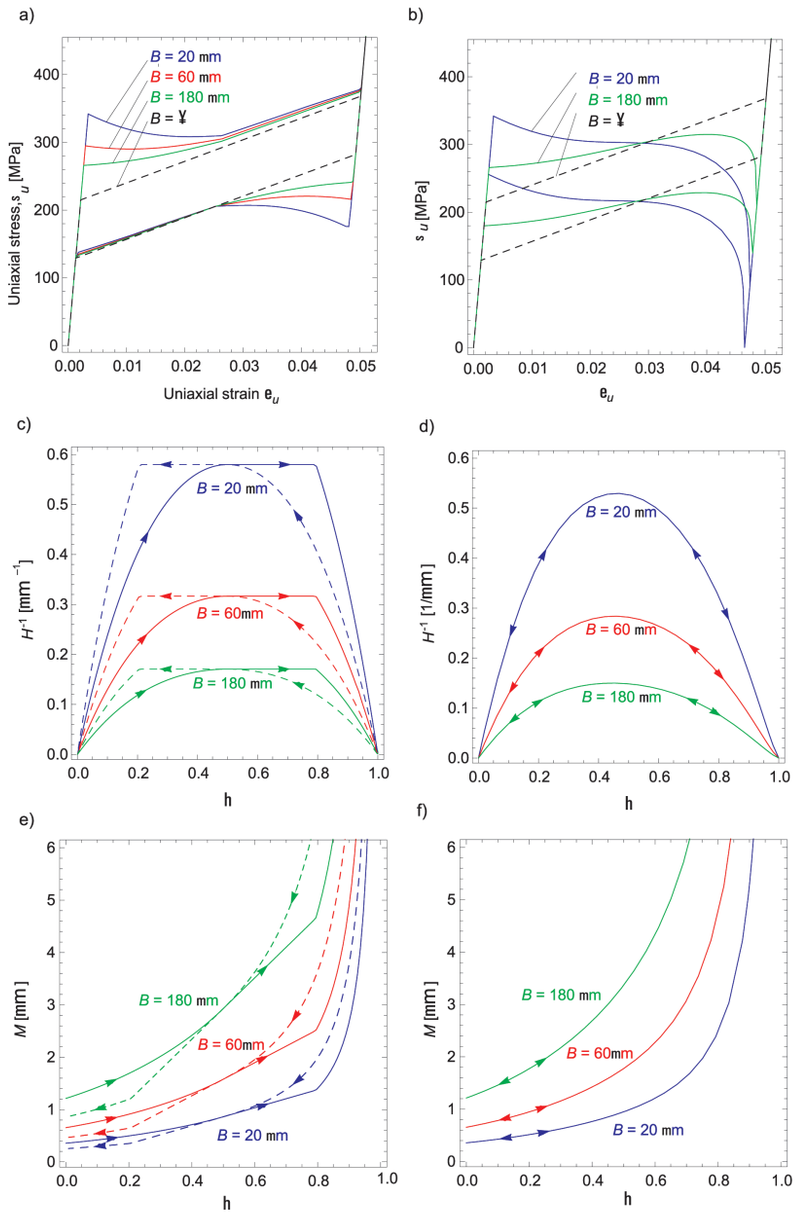
Fig. 2. An example of a rank-three laminated microstructure (in the figure, austenite is transparent and martensite plates are only visible). The figure is taken from Ref. [12]

Ewolucja parametrów mikrostruktury jest wynikiem sukcesywnej minimalizacji energii przyrostowej (2), z uwzględnieniem dyssypacji zadanej wzorem (5). W szczególności, przy tym samym udziale objętościowym martenzytu η, parametry te przyjmują inne wartości podczas obciążania (linie ciągłe na rys. 3 (c, e)) i podczas odciążania (linie przerywane na rysunku 3 (c, e)). Należy zwrócić uwagę, że charakter zmian parametrów mikrostruktury w sposób istotny zależy od niewielkich zmian wartości parametrów dyssypacji κ_k. Na rysunku 4 pokazano ewolucję parametru H^{-1} dla przypadku $\kappa_{am} = \kappa_{gb}$ oraz dla przypadku $\kappa_{am} < \kappa_{gb}$ (przypadek zaprezentowany na rysunku 3 (c) odpowiada $\kappa_{am} > \kappa_{gb}$). Jednocześnie, wpływ tak niewielkich zmian wartości parametrów κ_k na *makroskopową* odpowiedź materiału jest zaniedbywalny.

Dla porównania, na rysunku 3 (kolumna prawa) pokazano wyniki uzyskane dla przypadku bez dyssypacji zależnej od skali, czyli dla parametrów dyssypacji κ_k równych zero ($\kappa_{tw} = \kappa_{am} = \kappa_{gb} = 0$). W tym przypadku parametry mikrostruktury (H, M, h_{tw}) minimalizują energię powierzchniową Φ_i, a ich wartości nie zależą od ścieżki. Parametr h_{tw}, którego zmian nie pokazano na rysunku 3, związany jest z grubością płytki M dobrze znaną zależnością, $h_{tw} = \sqrt{M\gamma^a_{tw} / \Gamma^e_{am}}$, por. [6, 12]. Mimo różnego charakteru zmian parametrów mikrostruktury, ich wartości uzyskane przez minimalizację samej tylko energii powierzchniowej są dosyć bliskie wartościom odpowiadającym pełnej minimalizacji energii przyrostowej zawierającej dyssypację zależną od skali. Jednakże makroskopowe zależności naprężenie-odkształcenie uzyskane w obu przypadkach są zasadniczo różne, por. rysunek 3 (a, b).

Wyniki przedstawione na rysunku 3 (a, b) pokazują również, że wpływ energii powierzchniowej na właściwości makroskopowe jest znaczny i rośnie wraz ze spadkiem wielkości ziarna. Dla porównania, linią przyrywaną oznaczono zależność naprężenie-odkształcenie bez efektów energii powierzchniowej ($B = \infty$). Zależność naprężenia, przy którym rozpoczyna się przemiana fazowa, od wielkości ziarna przypomina zależność Halla-Petcha. Należy się spodziewać, że dla bardzo małych ziaren (tzn. dla materiałów ultradrobnoziarnistych i nanokrystalicznych) następuje zmiana mechanizmu przemiany fazowej i towarzysząca jej zmiana charakteru zależności naprężenia przemiany od wielkości ziarna.

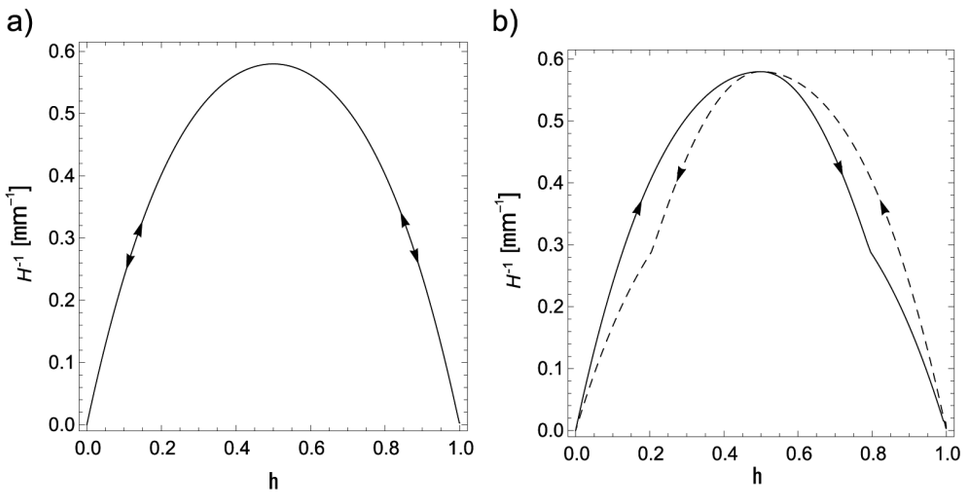
BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ



Rys. 3. Makroskopowa zależność naprężenie-odkształcenie (a, b) oraz ewolucja parametrów mikrostruktury (c-f) uzyskane przez minimalizację energii przyrostowej z uwzględnieniem dyssypacji zależnej od skali (kolumna lewa) oraz bez dyssypacji zależnej od skali (kolumna prawa)

Fig. 3. The macroscopic stress-strain response (a, b) and evolution of microstructural parameters (c, d) determined by incremental energy minimization, with scale-dependent dissipation accounted for (left column) or not (right column)

BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ



Rys. 4. Wpływ parametrów κ_{gb} i κ_{am} na ewolucję gęstości płytek H^{-1}: (a) $\kappa_{am} = 0{,}9$, $\kappa_{gb} = 0{,}9$; (b) $\kappa_{am} = 0{,}9$, $\kappa_{gb} = 0{,}95$

Fig. 4. The influence of parameters κ_{gb} and κ_{am} on evolution of plate density H^{-1}: (a) $\kappa_{am} = 0{,}9$, $\kappa_{gb} = 0{,}9$; (b) $\kappa_{am} = 0{,}9$, $\kappa_{gb} = 0{,}95$

4. Wnioski

Przedstawiono wyniki zastosowania metody przyrostowej minimalizacji energii do analizy ewolucji mikrostruktury w quasi-statycznym i izotermicznym procesie deformacji i przemiany martenzytycznej w stopie CuAlNi z pamięcią kształtu. Wpływ energii powierzchniowej na właściwości makroskopowe przyjętego wieloskalowego modelu materiału z pamięcią kształtu jest znaczny i rośnie wraz ze spadkiem wielkości ziarna. W niniejszej pracy wykazano, że znaczący wpływ na uzyskane przebiegi zależności naprężenie-odkształcenie przy jednoosiowym rozciąganiu ma również sposób transformacji energii powierzchniowej uwalnianej wskutek anihilacji granic mikrostrukturalych. Gdy uwalniana energia powierzchniowa jest z powrotem przekształcana w objętościową energię odkształceń sprężystych, to może wystąpić znaczny spadek naprężenia potrzebnego do wysycenia przemiany. Natomiast przyjęcie bardziej realistycznego założenia, że uwalniana energia powierzchniowa jest głównie dyssypowana, prowadzi do zniwelowania takiego spadku z równoczesnym poszerzeniem pętli histerezy. Z kolei wpływ dyssypacji energii powierzchniowej na ewolucję parametrów mikrostrukturalnych, choć również widoczny, okazuje się mniej znaczący.

Wyniki przedstawione w niniejszej pracy zostały uzyskane w ramach grantu MNiSW nr N N501 267734.

BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ

Literatura

[1] Arndt M., Griebel M., Novak V., Roubiček T., Sittner P., *Martensitic transformation in NiMnGa single crystals: Numerical simulation and experiments*, Int. J. Plasticity, 22, 2006, 1943-1961.

[2] Ball J.M., James R.D., *Fine phase mixtures as minimizers of energy*, Arch. Ration. Mech. Anal., 100, 1987, 13-50.

[3] Bhattacharya K., *Microstructure of martensite: why it forms and how it gives rise to the shape-memory effect*, Oxford University Press, Oxford 2003.

[4] Hackl K., Heinen R., *A micromechanical model for pretextured polycrystalline shape-memory alloys including elastic anisotropy*, Continuum Mech. Thermodyn, 19, 2008, 499-510.

[5] Howe J.M., *Interfaces in Materials, John Wiley & Sons*, Inc., New York 1997.

[6] Khachaturyan A.G., *Theory of Structural Transformations in Solids*, John Wiley and Sons, New York 1983.

[7] Kohn R.V., Müller S., *Branching of twins near an austenite-twinned-martensite inter-face*, Phil. Mag. A, 66(5), 1992, 697-715.

[8] Kružik M., Mielke A., Roubiček T., *Modelling of microstructure and its evolution in shape-memory-alloy single-crystals*, *in particular in CuAlNi*, Meccanica, 40, 2005, 389-418.

[9] Maciejewski G., Stupkiewicz S., Petryk H., *Elastic microstrain energy at the austenite–twinned martensite interface*, Arch. Mech., 57(4), 2005, 277-297.

[10] Petryk H., *Incremental energy minimization in dissipative solids*, C. R. Mecanique, 331, 2003, 469-474.

[11] Petryk H., Stupkiewicz S., *Interfacial energy and dissipation in martensitic phase transformations. Part I: Theory*, J. Mech. Phys. Solids, 58, 2010, 390-408.

[12] Petryk H., Stupkiewicz S., Maciejewski G., *Interfacial energy and dissipation in martensitic phase transformations*, Part II: *Size effects in pseudoelasticity*, J. Mech. Phys. Solids, 58:, 2010, 373-389.

[13] Porter D.A., Easterling K.E., *Phase Transformations in Metals and Alloys*, Chapman & Hall, London 1992.

[14] Ren X., Truskinovsky L., *Finite scale microstructures in nonlocal elasticity*, J. Elasticity, 59, 2000, 319-355.

[15] Roytburd A.L., *Thermodynamics of polydomain heterostructures. II. Effect of microstresses*, J. Appl. Phys., 83(1), 1998, 239-245.

[16] Stupkiewicz S., Maciejewski G., Petryk H., *Low-energy morphology of the interface layer between austenite and twinned martensite*, Acta Mater., 55, 2007, 6292-6306.

[17] Stupkiewicz S., Petryk H., *Modelling of laminated microstructures in stress-induced martensitic transformation*, J. Mech. Phys. Solids, 50, 2002, 2303-2331.

[18] Waitz T., Antretter T., Fischer F.D., Simha N.K., Karnthaler H.P., *Size effects on the martensitic phase transformation of NiTi nanograins*, J. Mech. Phys. Solids, 55, 2007, 419-444.

BIBLIOTEKA CYFROWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ