

TiNi 合金的动态伪弹性行为和 率相关相变本构模型*

郭扬波, 刘方平, 载翔宇, 唐志平, 虞吉林

(中国科学技术大学力学和机械工程系, 安徽 合肥 230027)

摘要: 采用万能材料试验机和 SHPB 实验技术对 TiNi 形状记忆合金在 10^{-3} s^{-1} 和 10^2 s^{-1} 应变率下的伪弹性相变行为进行了实验研究。实验数据表明: TiNi 合金的相变过程具有应变率效应, 其原因主要是相变阻力受应变率影响——应变率越大, 相变阻力越大。在三线性热弹性相变模型的基础上, 考虑了应变率对相变阻力的影响, 并给出了相变阻力的具体形式, 建立了一个一维率相关相变本构模型。模型对 TiNi 合金相变行为的模拟与实验数据吻合较好。

关键词: 固体力学; 相变本构模型; 三线性热弹性理论; TiNi 形状记忆合金; 相变阻力; 应变率

中图分类号: O344.1 国标学科代码: 130·1515 文献标志码: A

1 引言

相变是材料在一定条件下发生相突变的临界现象, 相变对材料和结构的力学响应有重大影响, 是继塑性力学之后固体力学的又一研究热点。

本构关系的研究是材料性质研究的重要组成部分, 材料性质的研究最终都归结为建立本构模型, 因此相变本构研究在相变研究中占据重要地位。但是迄今为止, 有关相关本构的研究还很不够, 动载下材料的相变本构描述则更为缺乏。

目前相变本构的研究从思路上可分为三类: Landau 唯象理论^[1]、细观本构理论^[2]和三线性热弹性理论^[3]。其中三线性热弹性模型形式简单、便于应用, 且模型预测与实验结果能定性相符, 是近年来的研究热点。王文强^[4]由三线性热弹性模型出发并考虑相变速率受应变率影响, 建立了一个一维率相关相变本构模型, 该模型能较好的预测硫化镉晶体的冲击相变波形。

我们通过对 TiNi 合金实验数据的分析发现相变阻力随应变率增大而增大, 但传统模型均未考虑这一影响。本文中, 试图在三线性热弹性模型的基础上, 考虑应变率对相变阻力的影响, 建立起新的一维率相关相变本构模型。

2 实验数据及其分析^[5]

实验材料为 TiNi 合金, $x_{\text{Ni}} = 50.68\%$, 准静态实验试件为 $\varnothing 8 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ 的圆柱体, 实验在万能材料试验机上进行, 应变率为 10^{-3} s^{-1} 。动态实验试件为 $\varnothing 8 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ 的圆柱体, 实验在 SHPB 上进行, 应变率为 10^2 s^{-1} 。图 1 是温度 298K 时 TiNi

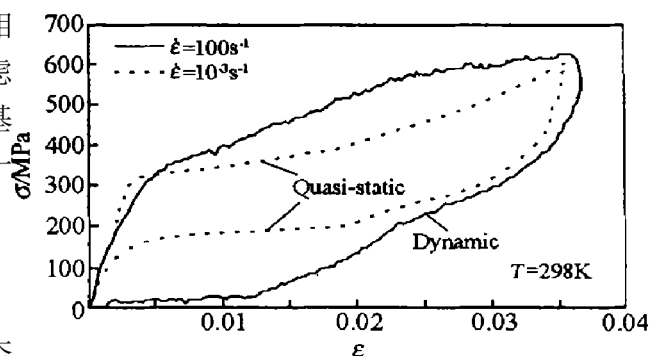


图 1 TiNi 合金的准静态和
动态应力-应变曲线

Fig. 1 Quasi-static and dynamic
stress-strain curve of TiNi alloy

* 收稿日期: 2002-01-31; 修回日期: 2002-06-11

基金项目: 国家自然科学基金项目(10176029); 国家基金委和中国工程物理研究院联合基金项目(10072058)

作者简介: 郭扬波(1966—), 男, 博士研究生。

形状记忆合金的准静态和动态应力-应变曲线,呈现出典型的热弹性马氏体相变的伪弹性行为,卸载后无残余应变。进一步观察还可知,正向相变时,准静态和动态的相变起始点基本相同,但当相变继续进行,动态应力-应变曲线在准静态之上;逆相变时,两者起始点也基本相同,但当逆相变继续进行,动态应力-应变曲线反在准静态之下。造成这种情况的原因可能有两个:一是应变率较高时相变速率跟不上加载率,使得材料的宏观模量增大;另一个是相变阻力具有应变率效应,随应变率的增大而增大。

Meyers 等^[6]曾指出马氏体相变在微秒量级内即可进行。图 1 中的应变率最高只有 100 s^{-1} ,不会出现相变速率跟不上加载率的情况,造成实验中不同应变率间差异的原因拟可归结为相变阻力的应变率效应。

3 本构模型

3.1 理想材料的相变本构

本文中,理想材料(无缺陷)的相变本构采用三线性热弹性模型^[3],如图 2 所示。图中, M 为正相变点, m 为逆相变点,1 相为母相,2 相为不稳的中间相,3 相为新相。因主要研究 TiNi 形状记忆合金中的马氏体相变,则 1 相对应奥氏体相,3 相为马氏体相。加载时,当应力超过 σ_M 时,1 相转变为 3 相,卸载时,当应力低于 σ_m 时,3 相回复为 1 相。 $\sigma_0 = \sigma_0(T)$ 是平衡应力,表示温度为 T 时,1 相和 3 相的自由能相等的应力。

本构关系可表为

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon - E\alpha(T - T_0) & 0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_M \\ E \left[\varepsilon - \frac{\varepsilon - \varepsilon_M(T)}{\varepsilon_m(T) - \varepsilon_M(T)} \varepsilon_T \right] - E\alpha(T - T_0) & \varepsilon_M < \varepsilon < \varepsilon_m \\ E(\varepsilon - \varepsilon_T) - E\alpha(T - T_0) & \varepsilon < \varepsilon_m \end{cases} \quad (1)$$

式中: α 为热膨胀系数; T_0 是相变温度,即应力为 0 时,1 相和 3 相的自由能相等的温度; ε_T 为常数; $\varepsilon_M = \varepsilon_M(T)$ 和 $\varepsilon_m = \varepsilon_m(T)$ 分别是温度为 T 时 1 相的最大应变和 3 相的最小应变。

Abeyaratne 等^[3]指出 $\varepsilon_M(T)$ 和 $\varepsilon_m(T)$ 随温度线性增加,可表示为

$$\begin{cases} \varepsilon_M = \varepsilon_M(T_0) + \beta_M(T - T_0) \\ \varepsilon_m = \varepsilon_m(T_0) + \beta_m(T - T_0) \end{cases} \quad (2)$$

式中: β_M 和 β_m 为材料常数。

单位体积的 Gibbs 自由能可表示为

$$\begin{cases} g = \int_0^\varepsilon \sigma d\varepsilon - \sigma\varepsilon + \varphi(T) \\ \varphi(T) = -c_V T \ln(T/T_0) \end{cases} \quad (3)$$

将式(1)代入 Gibbs 自由能的表达式(3)可求得各相的自由能,具体形式可参见文献[3]。

3.2 实际相变中新相的成核与生长

实际材料总是存在各种缺陷,相变时材料首先在缺陷处成核,然后向周围生长。原因在于缺陷造成应力集中,加载时缺陷位置首先达到 σ_M ,发生相变并形成新相的晶核。一旦成核,材料中其它地方就可通过相边界的传播而相变,不必一定达到 σ_M 。一维情况下相边界的传播,其驱动力 f 由下式给出^[7]

$$f(\varepsilon^m, \varepsilon^a) = \int_{\varepsilon^m}^{\varepsilon^a} \sigma(\varepsilon) d\varepsilon - \frac{1}{2} [\sigma(\varepsilon^a) + \sigma(\varepsilon^m)] (\varepsilon^a - \varepsilon^m) \quad (4)$$

式中: ε^a 和 ε^m 分别表示母相和新相的应变。

将式(1)代入式(4)可得

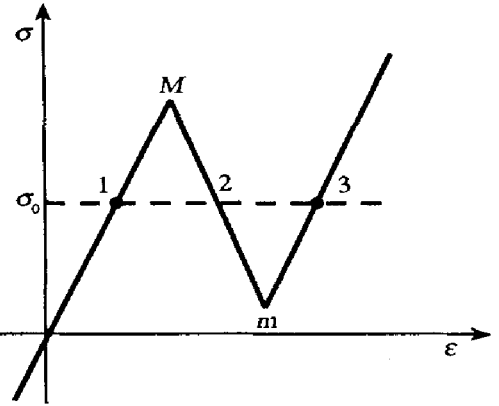


图 2 三线性热弹性相变模型

Fig.1 Trilinear thermoelastic phase transition model

$$f(\epsilon^m, \epsilon^a) = E\epsilon_T(\epsilon^a + \epsilon^m - \epsilon_m - \epsilon_M)/2 \quad (5)$$

相变时,相边界两边的应变存在间断,相边界传播时,相边界两边的速度存在间断,应力也应存在间断。将相边界作为强间断来处理,可得

$$\sigma^m - \sigma^a = \rho_0 \dot{z}^2 (\epsilon^m - \epsilon^a) \quad (6)$$

式中: z 是相边界位置。

注意:这里的相边界是指微观相边界,与宏观相边界不同:宏观相边界传播时,相边界走过的地方材料可能未完全转变为新相,存在新相和母相的混合相区^[8];而微观相变界走过的地方,材料均处于新相,不存在混合相区。

相变的发生需要一定的过驱动力:驱动力 $f=0$ 时,并不发生相变;只有当 $f>f_r$ 时,才会发生相变, f_r 称为相变阻力。如果在正相变和逆相变中都使用 $f(\epsilon^m, \epsilon^a)$ 作相变驱动力,那么逆相变时,相变驱动力就为负,表示相变向反方向进行,这样逆相变时相边界速度和相变阻力均为负。Abeyaratne 等^[3]由热激活理论出发得到了相边界速度,但在考虑热激活过程中的势垒时,没有考虑相变阻力的影响,在其基础上加入相变阻力的影响,得到的相边界速度可表示为

$$\dot{z} = \begin{cases} R \left[\exp \frac{g_1 - (g_2 + f_{13})}{rkT} - \exp \frac{g_3 - g_2}{rkT} \right] & f \geq f_{13} \\ 0 & f_{31} < f < f_{13} \\ R \left[\exp \frac{g_1 - g_2}{rkT} - \exp \frac{g_3 - (g_2 - f_{31})}{rkT} \right] & f \leq f_{31} \end{cases} \quad (7)$$

式中: g_1, g_2, g_3 是 1、2、3 相的单位体积 Gibbs 自由能; $f_{13}>0$ 是正相变的相变阻力; $f_{31}<0$ 是逆相变的相变阻力; r 是单位体积原子数; k 是 Boltzmann 常数; R 是常数。

3.3 相变阻力

准静态加载时,因为相边界的传播速度很慢,所以相变驱动力近似等于相变阻力。在准静态加载-卸载过程中,正相变时,为了使相变继续,必须在相变区内增加应力,相应驱动力和相变阻力(均为正值)都随 3 相含量的增加而增大;逆相变时,随着 3 相含量的减少,相变驱动力和相变阻力(均为负值)是减小的,因此可以认为相变阻力是 3 相百分含量 ξ 的函数。Abeyaratne 等^[3]指出,准静态过程中相变驱动力可表示为

$$f = \epsilon_T \sigma - \frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T - T_0) \quad (8)$$

式中: λ_0 是温度为 T_0 时单位质量的相变潜热。考虑零应力下的温度循环实验:(1)降温时,当温度降至 T_{M_s} 时,正相变开始,材料从 1 相向 3 相转变;当温度降至 T_{M_f} 时,材料全部转变为 3 相。(2)升温时,当温度升至 T_{A_s} 时,逆相变开始,材料从 3 相向 1 相转变;当温度升至 T_{A_f} 时,材料全部回复为 1 相。则

$$\begin{cases} f_{13}(0) = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_s} - T_0) \\ f_{13}(1) = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_f} - T_0) \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} f_{31}(0) = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{A_s} - T_0) \\ f_{31}(1) = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{A_f} - T_0) \end{cases} \quad (10)$$

式中:括号内的数表示 ξ 的值, $\xi=0$ 表示未发生相变, $\xi=1$ 表示相变已结束;下标 M、A 分别表示马氏体相变和奥氏体相变,下标 s、f 表示分别表示马氏体相变和奥氏体相变的开始与结束。

下面来考虑相变阻力随 ξ 的变化。正相变时,相变阻力 f_{13} 随 ξ 的增大而增大。假定 f_{13} 是 ξ 的二次函数,且当 $\xi=1$ 时, f_{13} 取最大值,则可得

$$f_{13}(\xi) = -(f_{13}(1) - f_{13}(0))\xi^2 + 2(f_{13}(1) - f_{13}(0))\xi + f_{13}(0) \quad (11)$$

将式(9)代入式(11),可得

$$f_{13}(\xi) = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_s} - T_{M_f}) \xi^2 + \frac{2\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_s} - T_{M_f}) \xi - \frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_s} - T_0) \quad (12)$$

同样,对逆相变,假定 f_{31} 是 $1 - \xi$ 的二次函数,且当 $1 - \xi = 1$ 时, f_{31} 取最小值,可得

$$f_{31} = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{A_s} - T_{A_f}) (1 - \xi)^2 + \frac{2\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{A_s} - T_{A_f}) (1 - \xi) - \frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{A_s} - T_0) \quad (13)$$

上面的讨论都是对准静态进行的,由第 2 节知,相变阻力有应变率效应,随应变率的增大而增大。

正相变时,由图 1 可知应变率不同时,相变起始点基本相同,说明相变起始点处的相变阻力 $f_{13}(0)$ 不受应变率影响,随应变率增加的是 $f_{13}(1) - f_{13}(0)$,即生成的马氏体相使相应阻力增加的部分。为了考虑应变率对 $f_{13}(\xi) - f_{13}(0)$ 的影响,将 $f_{13}(\xi) - f_{13}(0)$ 乘以一个表征其应变率效应的因子 $\eta(\dot{\epsilon})$,取 $\eta(\dot{\epsilon}) = a + b \log_{10}(\dot{\epsilon})$,可得

$$f_{13}(\xi, \dot{\epsilon}) = -\frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_s} - T_0) + \frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{M_s} - T_{M_f}) (2\xi - \xi^2) (a + b \log_{10} \dot{\epsilon}) \quad (14)$$

式中: a, b 为常数。

逆相变时通过类似的处理,可得

$$f_{31}(\xi, \dot{\epsilon}) = -\frac{\rho_0 \lambda_0 (T_{A_s} - T_0)}{T_0} + \frac{\rho_0 \lambda_0}{T_0} (T_{A_s} - T_{A_f}) (2(1 - \xi) - (1 - \xi)^2) (a + b \log_{10} \dot{\epsilon}) \quad (15)$$

3.4 由实际相变的一维杆模型出发建立的一维率相关相变本构

实际材料在发生相变时,材料中首先形成许多新相晶核,然后晶核长大形成新相晶粒而完成相变过程。假定新相晶核在材料中均匀分布,考虑一维的情况,可用一个一维杆来模拟实际材料中的相变,杆长 l 由新相晶粒大小决定,取为新相晶粒直径的一半,如图 3 所示。图中杆的左端是新相晶核形成的地方,即正相变时,相边界由左向右传播,逆相变时,相边界由右向左传播, z 表示相边界的位置, δ 表示杆长度的变化,则可得

$$\begin{cases} \sigma^a = E\epsilon^a - E\alpha(T - T_0) \\ \sigma^m = E(\epsilon^m - \epsilon_T) - E\alpha(T - T_0) \\ (l - z)\epsilon^a + z\epsilon^m = \delta = l\epsilon \\ \epsilon = \int_0^t \dot{\epsilon} dt \\ z = \int_0^t \dot{z} dt \\ \xi = z/l \\ \sigma = \sigma^a(1 - \xi) + \sigma^m \xi \end{cases} \quad (16)$$

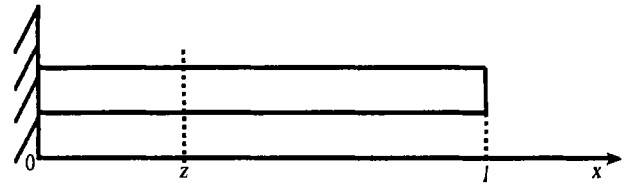


图 3 实际材料的一维杆模型

Fig. 3 One-dimensional rod model of material

式中: σ 是杆的整体应力; ϵ 是杆的整体应变。

联立式(1)、(2)、(5)、(6)、(7)、(14)、(15)和(16)即可得最后的本构模型。

4 对 TiNi 形状记忆合金实验数据的拟合

4.1 相变本构中材料常数的确定

建立的相变本构中有 11 个物理常数,8 个材料常数,其中需要通过实验数据拟合的是 8 个材料常数 $\epsilon_T, \epsilon_M(T_0), \epsilon_m(T_0), \beta_M, \beta_m, a, b$ 和 R 。物理常数的值列于表 1 中,其中 $D = 40 \mu\text{m}$ 是马氏体相的晶粒直径。下面讨论怎样确定材料常数。

考虑 ϵ_T , TiNi 合金的应力-应变曲线中,母相的初始加载段和材料完全变为新相后的初始卸载段是两条近似平行的直线,这两条直线水平距离即为 ϵ_T 。这样,由图 1 中的准静态应力-应变曲线即可确定出 $\epsilon_T = 0.03$ 。由 $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$, $T = 285\text{K}$ 和 $T = 298\text{K}$ 时的实验数据可得: $\epsilon_M(285\text{K}) = 6.11 \times 10^{-3}$, $\epsilon_m(285\text{K}) = 2.762 \times 10^{-2}$, $\epsilon_M(298\text{K}) = 7.49 \times 10^{-3}$, $\epsilon_m(298\text{K}) = 2.834 \times 10^{-2}$ 。将以上数据代入式

(2)可求得: $\epsilon_M(T_0) = 3.67 \times 10^{-3}$, $\epsilon_m(T_0) = 2.633 \times 10^{-2}$, $\beta_M = 1.061 \times 10^{-4} (\text{°C})^{-1}$, $\beta_m = 5.593 \times 10^{-5} (\text{°C})^{-1}$ 。

对图 1 中的实验数据进行分析发现: $\dot{\epsilon} = 10^2 \text{ s}^{-1}$ 时相变阻力的增加速度近似为 $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ 时的两倍, 将 $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ 作为准静态处理, 则 $a + b \log_{10}(0.001) = 1$, $a + b \log_{10}(100) = 2$, 由此可得 $a = 1.6$, $b = 0.2$ 。由第 2 节可知, 在 $10^{-3} \sim 10^2 \text{ s}^{-1}$ 的应变率范围内, 相变速率跟得上加载速率, 故模拟时只是将 R 取为一个足够大的值, 使其能够保证相变速率跟得上加载速率, 取 $R = 100 \text{ m/s}$ 。

表 1 TiNi 形状记忆合金物理常数

Table 1 Physical constants of TiNi shape memory alloy

$\rho_0 / (\text{kg/m}^3)$	E / GPa	T_0 / K	T_{M_s} / K	T_{M_f} / K	T_{A_s} / K	T_{A_f} / K	$D / \mu\text{m}$	$r / (1/\text{m}^3)$	$k / (\text{J/K})$	$\lambda_0 / (\text{J/kg})$
6450	98	262	258	240	265	276	40	7.285×10^{28}	1.38×10^{-23}	910

4.2 相变本构对 TiNi 形状记忆合金的模拟与实验数据的比较

利用所建立的相变本构模型, 忽略热膨胀的影响, 对 TiNi 形状记忆合金 ($x_{\text{Ni}} = 50.68\%$) 在不同温度、不同应变率下的力学响应进行了模拟, 结果如图 4 中的虚线所示。图 4(a)、4(b) 中, $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, 正相变时, 在相变前半段, 模拟值和实验结果符合的较好, 在相变的后半段, 模拟值和实验结果有较大差异; 逆相变时, 在相变的前半段, 模拟值和实验结果有较大差异, 在相变的后半段, 模拟值与实验结果符合的较好。造成这种情况的原因可能是材料在发生马氏体相变后还出现了马氏体再取向形成的多阶段相变, 使得正相变后期材料的宏观模量与前期相比有明显的增大, 同样逆相变前期材料的宏观模量与后期相比, 也有明显的增大。当 $\dot{\epsilon} = 10^2 \text{ s}^{-1}$ (图 4(c)) 时, 模拟值和实验结果符合的较好。

5 结论

(1) 利用万能材料试验机和 SHPB 试验技术对 TiNi 形状记忆合金进行了准静态 (10^{-3} s^{-1}) 和动态 (10^2 s^{-1}) 实验, 实验数据表明: 材料呈现热弹性马氏体相变的伪弹性行为, 相变阻力随应变率增大而增大, 具有应变率效应, 这也表明该材料在动载下能吸收更多的冲击能量。

(2) 在三线性热弹性模型的基础上, 考虑了应变率对相变阻力的影响, 给出了相变阻力的具体形式, 建立了一个一维率相关相变本构模型, 模型对 TiNi 合金相变行为的模拟与实验数据吻合较好。

(3) 得到的实验数据的应变率最高为 10^2 s^{-1} , 在此应变率范围内, 相变速率一般能跟上加载速率。为检验模型中所用的相边界速度是否适用, 我们将对 TiNi 合金进行更高应变率的实验, 并对冲击相变过程中的相转变速率和细观机理作进一步深入的研究。

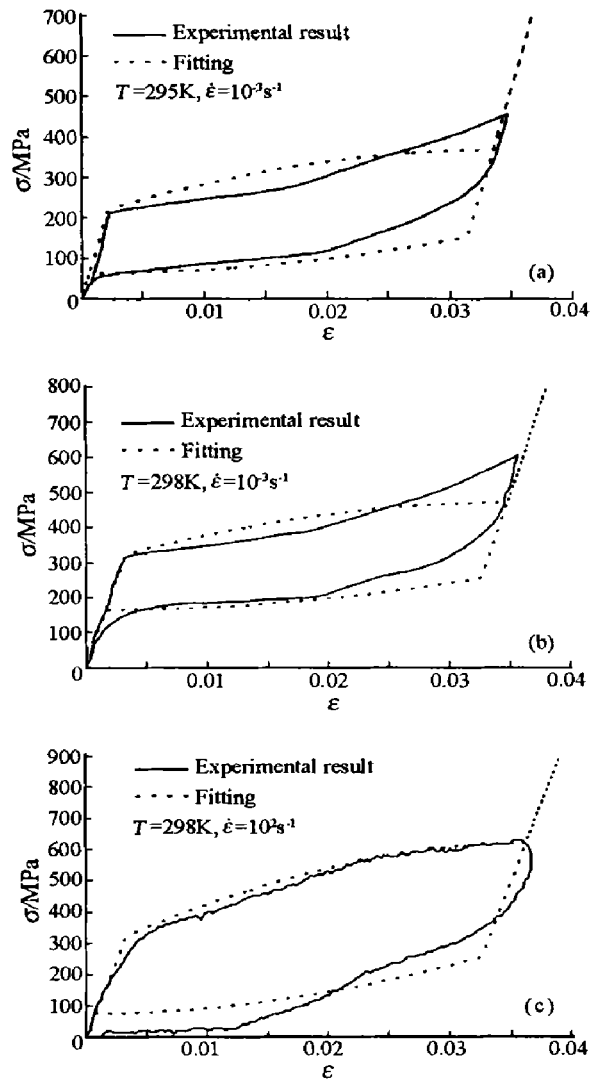


图 4 不同温度和应变率下模型拟合的应力-应变曲线与实验结果的比较

Fig. 4 Fitted stress-strain curves compared with experimental results at various temperatures and strain rates

参考文献:

- [1] Devonshire A F. Theory of ferroelectrics[J]. *Advances in Physics*, 1954, 3(10): 85—127.
- [2] Sun Q P, Hwang K C, Yu S W. A micromechanics constitutive model of transformation plasticity with shear and dilatation effect[J]. *J Mech Phys Solids*, 1991, 39(4): 507—524.
- [3] Abeyaratne R, Knowles J K. A continuum model of a thermoelastic solid capable of undergoing phase transitions[J]. *J Mech Phys Solids*, 1993, 41(3): 541—571.
- [4] 王文强, 唐志平. 关于相变本构关系的一个一维模型[J]. *高压物理学报*, 1999, 13(4): 272—277.
WANG Wen-qiang, TANG Zhi-ping. An one-dimensional phase transition constitutive model[J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 1999, 13(4): 272—277.
- [5] 刘方平. 动载下形状记忆合金的力学模型与行为研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学硕士学位论文, 1994.
- [6] Chang S N, Meyers M A, Thadhani N N, et al. Martensitic transformation induced by tensile stress pulse in an Fe-Ni-Mn alloy[A]. Schmidt S C, et al. *Shock Waves in Condensed Matter—1987*[C]. Amsterdam: Elsevier, 1988: 143—146.
- [7] Abeyaratne R, Knowles J K. On the driving traction action on a surface of strain discontinuity in a continuum[J]. *J Mech Phys Solids*, 1993, 38(3): 345—360.
- [8] 王文强, 唐志平. 冲击下宏观相边界的传播[J]. *爆炸与冲击*, 2000, 20(1): 25—31.
WANG Wen-qiang, TANG Zhi-ping. Propagation of macroscopic phase boundary under shock loading[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2000, 20(1): 25—31.

Dynamic pseudoelastic behavior of TiNi alloys and a strain rate dependent phase transition constitutive model

GUO Yang-bo, LIU Fang-ping, DAI Xiang-yu, TANG Zhi-ping, YU Ji-lin
(*Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, Anhui, China*)

Abstract: With a material test system and a split Hopkinson pressure bar, the pseudoelastic phase transition behavior of TiNi shape memory alloys, at strain rates of 10^{-3} and 10^2 s^{-1} has been investigated. By analyzing the experimental data, we found that the resistance of phase transition increase with the strain rate and obviously has a strain rate dependence. An one-dimensional phase transition constitutive model based on the trilinear thermoelastic phase transition model is established, where the strain rate effects upon the resistance of phase transition was taken into account in this article. The model applied to TiNi alloy is in good agreement with the experimental data.

Key words: solid mechanics; phase transition constitutive model; trilinear thermoelastic theory; TiNi shape memory alloy; resistance of phase transition; strain rate