

**ВАРИАНТ МОДЕЛИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
В ТЕЛЕ С КОНЕЧНЫМИ ДЕФОРМАЦИЯМИ.
ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ**

Левин В.А.*, Зингерман К.М., Фрейман Е.И.*****

*Кафедра вычислительной механики, МГУ им. М.В. Ломоносова

**Кафедра вычислительной математики, Тверской госуниверситет

***Кафедра математического моделирования, Тульский госуниверситет

Поступила в редакцию 20.03.2009, после переработки 10.05.2009.

Рассматривается вариант кинетической модели фазового перехода в нагруженном нелинейно-упругом теле на основе теории Ландау–Гинзбурга при конечных деформациях. Приведены некоторые результаты расчетов напряженно-деформированного и фазового состояния тел при изотермическом нагружении для случая плоской деформации. Показана возможность возникновения стационарной неоднородной фазовой структуры вблизи полостей.

The kinetic model of phase transformation in loaded nonlinear-elastic solids is considered under finite strains. The model is based on the Landau–Ginzburg theory of phase transformations. The mode of deformation and phase state of isothermally loaded solids are analyzed for the case of plane strain. Some results of computations are presented. It is shown that the stationary inhomogeneous phase state may take place near holes.

Ключевые слова: фазовый переход, нелинейная теория упругости, конечные деформации, полости.

Keywords: phase transformation, nonlinear elasticity, finite strains, holes.

Введение

Распространенным подходом к описанию фазовых переходов является феноменологическая теория Ландау–Гинзбурга [6, 7]. Основным понятием в этой теории является понятие параметра порядка, который характеризует атомную конфигурацию в материале в процессе фазового перехода. В общем случае для описания состояния среды может использоваться несколько параметров порядка [4]. Вместо параметров порядка могут быть использованы другие скалярные величины, характеризующие структуру среды. Например, в [5] предложена модель, в которой в качестве такой величины выбрана массовая концентрация одной из фаз.

При моделировании фазовых переходов в деформируемых твердых телах возможны различные подходы. Модели одного типа используют представление о параметрах порядка или других скалярных величинах, характеризующих структуру среды [15], модели другого типа — не используют это представление [1, 2, 3, 10]. В

[5] предложен способ, позволяющий установить взаимосвязь между параметрами этих двух типов моделей. В моделях второго типа постановка задачи о фазовом переходе близка к постановке «обычных» задач механики композитов (например, задач об упругом включении), но с тем отличием, что граница включения (т.е. граница раздела фаз) заранее неизвестна, и ее необходимо определить с учетом дополнительного термодинамического условия, которое должно выполняться на этой границе. Это обстоятельство существенно осложняет решение задач о фазовом переходе в случаях, когда эти задачи не могут быть сведены к одномерным.

В [11]–[14] был предложен подход к моделированию неравновесных твердотельных фазовых переходов, вызванных действием механических напряжений. Этот подход основан на теории Ландау–Гинзбурга и ориентирован на моделирование фазовых переходов в сталях и материалах с памятью формы. В рамках этого подхода учитываются собственные деформации фаз, скрытая энергия фазового перехода, зависимость модулей упругости от параметров порядка, зависимость свободной энергии от градиентов параметров порядка. В настоящей статье этот подход развивается. При постановке и решении задачи учитываются нелинейные эффекты, возникающие при конечных деформациях и их перераспределении [8, 9], причем, в отличие от [14], конечными считаются не только собственные, но и упругие деформации. Рассматриваются результаты численного эксперимента для случая, когда в теле имеются наноразмерные неоднородности.

1. Постановка задачи

Задача формулируется для случая n независимых параметров порядка η_1, \dots, η_n ($0 \leq \eta_k \leq 1$). Используются следующие обозначения: \mathbf{E}_e^0 — тензор упругой деформации; $\Psi_{0,p}$ — аффинор деформаций при переходе из начального в p -е состояние; Ψ_t — аффинор собственной деформации частицы; $\Psi_{t,k}$ — аффинор собственной деформации k -й фазы; \mathbf{I} — единичный тензор второго ранга.

Плотность свободной энергии для изотермических фазовых переходов задается в форме [11]

$$\psi = \mathcal{A}(\mathbf{E}_e^0, \eta_1, \dots, \eta_n) + \sum_{k=1}^n f(\eta_k) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n F_{ij}(\eta_i, \eta_j), \quad (1)$$

где

$$f(\eta_k) = A\eta_k^2(1 - \eta_k)^2 + \Delta G^\theta(4\eta_k^3 - 3\eta_k^4), \quad (2)$$

$$F_{ij}(\eta_i, \eta_j) = B\eta_i\eta_j(1 - \eta_i - \eta_j)[(\eta_i - \eta_j)^2 - \eta_i - \eta_j] + D\eta_i^2\eta_j^2(1 - \eta_i - \eta_j) + \eta_i^2\eta_j^2(\eta_i + \eta_j)(\bar{A} - A) + \eta_i^2\eta_j^2(\eta_i T_{ij} + \eta_j T_{ji}), \quad (3)$$

$$\Psi_t = \mathbf{I} + \sum_{k=1}^n g(\eta_k)\boldsymbol{\varepsilon}_{t,k} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \eta_i^2\eta_j^2(\eta_i\mathbf{Z}_{ij} + \eta_j\mathbf{Z}_{ji}), \quad (4)$$

$$\mathbf{Z}_{ij} = (a - 3)\boldsymbol{\varepsilon}_{t,j} + 3\boldsymbol{\varepsilon}_{t,i}, \quad (5)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{t,k} = \Psi_{t,k} - \mathbf{I}, \quad (6)$$

$$g(\eta_k) = a\eta_k^2(1 - \eta_k)^2 + (4\eta_k^3 - 3\eta_k^4). \quad (7)$$

Здесь $\mathcal{A}(\mathbf{E}_e, \eta_1, \dots, \eta_n)$ — упругий потенциал:

$$\mathcal{A}(\mathbf{E}_e, \eta_1, \dots, \eta_n) = \frac{\lambda(\eta_1, \dots, \eta_n)}{2}(E_1)^2 + \mu(\eta_1, \dots, \eta_n)E_2. \quad (8)$$

В рассмотренной модели A, \bar{A}, B, D, a — заданные параметры; ΔG^θ — разность между тепловыми частями энергии Гиббса разных фаз; λ, μ — модули упругости, которые зависят от η_1, \dots, η_n следующим образом:

$$\lambda = \lambda_0 + \sum_{k=1}^n (\lambda_k - \lambda_0)\bar{g}(\eta_k), \quad \mu = \mu_0 + \sum_{k=1}^n (\mu_k - \mu_0)\bar{g}(\eta_k),$$

где

$$\bar{g}(\eta_k) = 3\eta_k^2 - 2\eta_k^3;$$

$$T_{ij} = -3 \left[\frac{1}{2}(\lambda_i - \lambda_0)(E_1)^2 + (\mu_i - \mu_0)E_2 \right].$$

При постановке задачи используем математический аппарат теории многократного наложения больших деформаций [8]. Будем считать, что в теле при переходе его из начального в $(p-1)$ -е состояние не происходило фазовых превращений ($\eta_k = 0, k = 1, \dots, n$). В этом состоянии в теле возник зародыш новой фазы (область, в которой один или несколько параметров порядка отличны от нуля). Вследствие этого в теле начался процесс фазовых превращений, и тело перешло в p -е (текущее, зависящее от времени) состояние.

Математическая постановка задачи включает уравнение равновесия среды (в предположении, что фазовый переход рассматривается как квазистатический процесс)

$$\nabla^{n-1} \cdot \left[(1 + \Delta_{0,n-1})^{-1} \sum_{0,n}^{n-1} \Psi_{n-1,n} \right] = 0, \quad (9)$$

здесь

$$\sum_{0,p}^{p-1} = \Psi_{0,p-1}^* \cdot \sum_{0,p}^0 \cdot \Psi_{0,p-1}, \quad (10)$$

и определяющее соотношение, соответствующее заданному выражению (1) для свободной энергии:

$$\sum_{0,p}^0 = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}_e}.$$

Постановка задачи включает также кинематические соотношения

$$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\Psi_e \cdot \Psi_e^* - \mathbf{I}), \quad \Psi_e = \Psi_t^{-1} \cdot \Psi_{0,p}, \quad (11)$$

$$\Psi_{0,p} = \Psi_{0,p-1} \cdot \Psi_{p-1,p}, \quad \Psi_{p-1,p} = \mathbf{I} + \nabla^{p-1} \mathbf{u}_p \quad (12)$$

и эволюционные уравнения для параметров порядка [14]

$$\frac{\partial \eta_k}{\partial t} = 2\Lambda\beta \nabla^{p-1} \cdot (\nabla^{p-1} \eta_k) + \Lambda X_k, \quad k = 1, \dots, n, \quad (13)$$

здесь

$$X_k = \mathcal{P} \cdot \Psi_e^* : \frac{\partial \Psi_t^*}{\partial \eta_k} - \frac{\partial \psi}{\partial \eta_k} \Big|_0^{\mathbf{E}_e}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (14)$$

есть движущие силы фазового перехода [14]; \mathcal{P} — первый (несимметричный) тензор Пиола:

$$\mathcal{P} = \sum_{0,p}^0 \Psi_{0,p};$$

Λ — кинетический коэффициент.

Граничные условия: заданные напряжения на внешней границе

$$\sigma_{0,p} = \sigma^\infty,$$

нулевые нормальные напряжения на контуре отверстия

$$\mathbf{N} \cdot \sum_{0,p}^{p-1} = \mathbf{0},$$

нулевые производные параметров порядка по направлению нормали к контуру как на внешней границе, так и на контуре отверстия

$$\mathbf{N} \cdot (\nabla \eta_k)^{p-1} = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

начальные условия: в момент t_0 начала фазового перехода (совпадающего с моментом приложения нагрузки) $\eta_k = \eta_k^{(0)}$ в некоторой заданной области; $\eta_k^{(0)}$ — некоторые заданные значения ($0 < \eta_k^{(0)} < 1$); в остальной части тела в момент начала фазового перехода $\eta_k = 0$.

Для остальных характеристик напряженно-деформированного состояния (напряжений, деформаций) начальные значения равны значениям соответствующих величин в $(p-1)$ -м состоянии. Дополнительные перемещения $\mathbf{u}_p(t_0) = \mathbf{0}$.

2. Численная реализация

Для решения рассматриваемой задачи не могут быть использованы «коммерческие» конечно-элементные пакеты, поскольку эта задача является связанной, деформации конечны и происходит их перераспределение в процессе фазового перехода. Поэтому для численных расчетов разработан подход, учитывающий специфику задачи. Этот подход программно реализован для плоских задач (плоской деформации и плоского напряженного состояния). Рассмотрим его более подробно.

В эволюционном уравнении (13) для параметра порядка производная по t заменяется конечно-разностным выражением:

$$\frac{\partial \eta_k}{\partial t}(t_j) = \frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} + O(\tau), \quad (15)$$

где τ — шаг по времени, $t_j = j\tau$.

С учетом (15) из (13) получается уравнение

$$\frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \nabla^{n-1} \cdot (\nabla \eta_k(t_j)) - \Lambda X_k(t_j) + O(\tau). \quad (16)$$

Это уравнение для j -го момента времени можно решить МКЭ [16], если $\eta(t_{j-1})$ известно. Далее можно подставить найденное $\eta_k(t_j)$ в уравнение равновесия и из него определить напряженно-деформированное состояние в момент времени t_j , а затем перейти к следующему шагу по времени.

Проблема состоит в том, что в уравнении (16) «движущие силы» $X_k(t_j)$ неизвестны, т.к. зависят от напряженно-деформированного состояния в момент времени t_j . Поэтому на каждом шаге по времени используется итерационный процесс. Сначала вместо $X_k(t_j)$ берется $X_k(t_{j-1})$, т.е. решается уравнение

$$\frac{\eta_k(t_j) - \eta_k(t_{j-1})}{\tau} = 2\Lambda\beta \nabla \cdot (\nabla^{n-1} \eta_k(t_j)) - \Lambda X_k(t_{j-1}). \quad (17)$$

Далее из уравнения равновесия рассчитывается напряженно-деформированное состояние в момент времени t_j и по нему определяются движущие силы фазового перехода $X_k(t_j)$. А затем решается уравнение (16) с найденными $X_k(t_j)$ и снова решается уравнение равновесия.

Для решения уравнения равновесия также используется метод конечных элементов [9, 16]. При расчетах используются линейные треугольные элементы.

Таким образом, на каждом шаге по времени выполняются следующие действия:

1. Решение эволюционного уравнения с использованием явной разностной схемы.
2. Решение задачи нелинейной упругости.
3. Уточнение решения эволюционного уравнения с использованием неявной разностной схемы.
4. Уточнение решения задачи нелинейной упругости.

Предварительно (для начального момента времени) определяется решение задачи нелинейной упругости для заданного начального распределения параметра порядка.

3. Результаты расчетов

Расчеты были выполнены для случая плоской деформации для двухкомпонентного параметра порядка ($n = 2$). Считается, что материал может находиться в трех фазовых состояниях: аустенит (A) и две фазы мартенсита (M_1 и M_2). Аустениту соответствуют значения $\eta_1 = \eta_2 = 0$, первой фазе мартенсита $\eta_1 = 1$, $\eta_2 = 0$, второй фазе мартенсита $\eta_1 = 0$, $\eta_2 = 1$.

Использованы следующие значения констант, характеризующие свойства среды [12]: $\Lambda = 2600$ (Па \cdot с) $^{-1}$, $\beta = 2.588 \cdot 10^{-10}$ Н, $A = 0.8$ ГПа, $\Delta G = -0.315$ ГПа, $a = 2.98$, $\bar{A} = 5.32$ ГПа, $B = 0$, $D = 0.5$ ГПа. Упругие модули фаз: $\lambda_0 = 144$ ГПа, $\mu_0 = 74$ ГПа, $\lambda_1 = \lambda_2 = 379$ ГПа, $\mu_1 = \mu_2 = 134$ ГПа, $C_i^{(1)} = C_i^{(2)} = 0$ ($i = 3, 4, 5$). Аффиноры собственной деформации фаз заданы следующим образом:

$$\Psi_{t,1} = \begin{pmatrix} 1.196 & 0 & 0 \\ 0 & 0.919 & 0 \\ 0 & 0 & 0.919 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{t,2} = \begin{pmatrix} 0.919 & 0 & 0 \\ 0 & 1.196 & 0 \\ 0 & 0 & 0.919 \end{pmatrix},$$

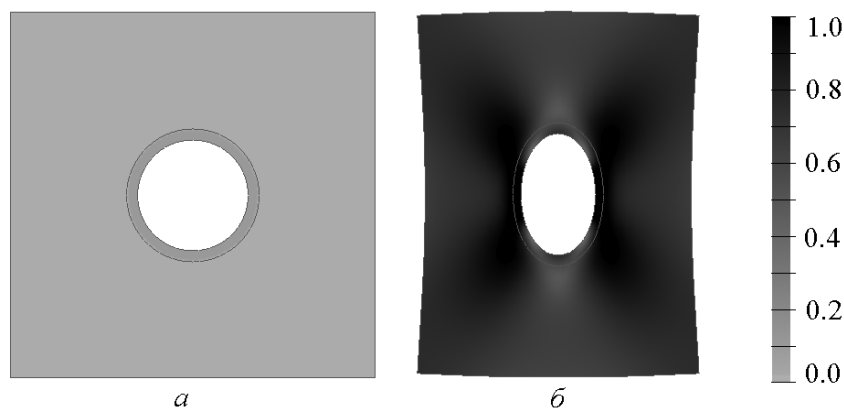


Рис. 1: Начальное распределение параметров порядка η_1 , η_2 (а) и близкое к стационарному распределение η_2 (б) в образце.

т.е. считается, что фазы мартенсита отличаются одна от другой только направлением собственных деформаций (эти деформации для второй фазы «повернуты на угол $\pi/2$ » относительно деформаций первой фазы).

Расчеты выполнены для образца квадратной формы размером 33 нм с круговым отверстием радиуса 5 нм, расположенным в центре (рис. 1, а). Вокруг отверстия располагалось включение в форме кругового кольца с тем же центром. Его внутренняя граница совпадала с границей отверстия, а внешний радиус был равен 6 нм. Включение представляло собой «смешанный» зародыш фаз M_1 и M_2 ($\eta_1 = \eta_2 = 0.1$). В остальной части образца материал находился в исходной фазе (фазе аустенита), т.е. $\eta_1 = \eta_2 = 0$. Нагрузка – одноосное растяжение в направлении оси y ($\sigma_{11} = 0$, $\sigma_{22} = 15$ ГПа).

Расчет выполнялся с шагом по времени $1.5 \cdot 10^{-5}$ нс. Площадь каждого конечного элемента не превышала 0.07 нм².

Расчет показал, что в результате фазового перехода было достигнуто (в момент времени $t = 0.00048$ нс) близкое к стационарному напряженно-деформированное и фазовое состояние образца. В этом состоянии значение параметра порядка η_1 во всем образце равно нулю, а распределение η_2 неоднородное (оно показано на рис. 1, б).

Выводы

1. Обобщена на случай конечных упругих деформаций кинетическая модель фазового перехода, предложенная в [11, 12] на основе теории Ландау–Гинзбурга.
2. Результаты расчетов показывают возможность образования в теле стационарных наноструктур (областей с неоднородным распределением параметра порядка) вблизи наноразмерных полостей.

Список литературы

- [1] Гринфельд М.А. Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. М.: Наука, 1990. 310 с.
- [2] Еремеев В.А., Сотниченко Д.М. Некоторые задачи о фазовых превращениях в деформируемых средах при конечных деформациях. // Изв. ВУЗов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. 2000. Спецвыпуск «Нелинейные проблемы механики сплошных сред». С. 52–74.
- [3] Еремеев В.А., Фрейдин А.Б., Шарипова Л.Л. О неединственности и устойчивости в задачах равновесия упругих двухфазных тел // Докл. РАН. 2003. Т. 391. № 2. С. 189–193.
- [4] Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. // М.: Наука, 1984. — 248 с.
- [5] Кондауров В.И. Кинетика фазовых переходов 1-го рода в термоупругом материале // Доклады РАН. 2004. Т. 396, № 2. С. 194–198.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Часть 1. М.: Физматлит, 2002. — 616 с.
- [7] Ландау Л.Д., Халатников И.М. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода // Доклады АН СССР. 1954. Т. ХСVI, № 3. С. 469–472.
- [8] Левин В.А. Многократное наложение больших деформаций в упругих и вязкоупругих телах. М.: Наука. Физматлит, 1999. 224 с.
- [9] Левин В.А., Калинин В.В., Зингерман К.М., Вершинин А.В. Развитие дефектов при конечных деформациях. Компьютерное и физическое моделирование. (Под ред. Левина В.А.) — М.: Физматлит, 2007. — 392 с.
- [10] Фрейдин А.Б. О равновесии фаз изотропного нелинейно-упругого материала // Изв. ВУЗов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. 2000. Спецвыпуск «Нелинейные проблемы механики сплошных сред». С. 150–168.
- [11] Levitas V.I. and Preston D.L. Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. I. Austenite–martensite. *Physical Review B*. 2002. Vol. 66, 134206.
- [12] Levitas V.I. and Preston D.L. Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. II. Multivariant phase transformations and stress space analysis // *Physical Review B*. 2002. Vol. 66. 134207.
- [13] Levitas V.I., Preston D.L., and Lee D.-W. Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. III. Alternative potentials, critical nuclei, kink solutions, and dislocation theory // *Physical Review B*. 2003. Vol. 68. 134201.

- [14] Levitas V.I., Preston D.L. Thermomechanical lattice instability and phase field theory of martensitic phase transformations, twinning and dislocations at large strains// *Physics Letters A*. 2005. Vol. 343, p. 32–39.
- [15] Wang Y. and Khachaturyan A.G. Three-Dimensional Field Model and Computer Modeling of Martensitic Transformations. — *Acta Metall. Mater.* 1997. V. 45. P. 759.
- [16] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. *The finite element method*. Vol. 1, 2. Butterworth-Heinemann. 2000.