

Феноменологічна модель твердого тіла з урахуванням кінетики деформації

МОЧАЛОВ О.О., ЄВФИМКО К.Д., ГАЙША О.О.

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова

Описано феноменологічну модель твердого тіла з урахуванням кінетики деформації. Запропоновано методику та спосіб створення рівняння стану твердого тіла з урахуванням кінетики деформації та зміни термодинамічних параметрів, що базується на використанні узагальненого потенціалу парної міжатомної взаємодії.

Описана феноменологическая модель твердого тела с учётом кинетики деформации. Предложена методика и способ создания уравнения состояния твёрдого тела с учётом кинетики деформации и изменения термодинамических параметров, базирующаяся на использовании обобщенного потенциала парного межатомного взаимодействия.

The phenomenological model of solid is presented taking into account deformation kinetics and thermodynamic parameters. Method of solid state equation development based on the generalized diatomic bound potential is presented.

Аналіз проблеми. Нині активно розвиваються фундаментальні і прикладні дослідження в галузі фізики твердого тіла, зокрема актуальним є дослідження структури і властивостей кристалічних речовин. Сучасні багатопроцесорні системи дозволяють моделювати практично будь-які мікроструктури, що робить особливо актуальною розробку моделей, які на базі мікроструктурних змін, що виникають в матеріалі в результаті тих або інших зовнішніх дій, могли б адекватно описувати його властивості, доповнюючи комп'ютерним моделюванням проблеми, що не вирішуються аналітично. Такий підхід дозволяє досліджувати структуру і властивості речовини з урахуванням багатьох чинників, таких як кінетика деформації, час і швидкість навантаження, динаміка термодинамічних параметрів і коефіцієнтів.

На сьогодні розроблені математичні моделі для опису таких процесів як плавлення, кування, штампування, обробка тиском, термообробка, механічна обробка, зварювання і інших. [1-8]. Ці моделі по суті є теоретичними моделями фізичних процесів деформації, тепло- і масопереносу. Диференціальні рівняння, що описують подібні моделі, істотно нелінійні. Такі моделі в більшості своїй є адекватними лише для дуже вузького діапазону параметрів і часто не враховують усі складові зазначених процесів, оскільки рівняння вимагають лінеаризації, при їх рішенні приймаються різні допущення. До того ж складність і вузька спеціалізація моделей часто не дозволяє використовувати їх при розрахунках, що перешкоджає застосуванню сучасних експериментальних методик дослідження властивостей матеріалів [9-10].

Нині практично не існує рівнянь стану твердих тіл і математичних моделей, які могли б бути адекватними в широкому діапазоні зміни термодинамічних параметрів і механічних впливів. Це обумовлено тим, що науці повною мірою не відомі характер і природа сил, що забезпечують міжатомну взаємодію. Гіпотези Ван-дер-Ваальса практично не відображають реальні процеси що протікають в кристалічній решітці твердого тіла. Єдине що відоме - це характер зміни потенціалу взаємодії між атомами речовини [11]. Різні речовини відрізняються структурою кристалічних решіток, які при зміні термодинамічних параметрів і механічних взаємодій можуть переструктуруватися, переходити одна в іншу.

При цьому міняється і характер взаємодії між атомами кристалічної структури [12].

Постановка задачі. Виходячи з того, що істинні сили, діючі між атомами кристалічної структури нам не відомі, для створення рівняння стану твердого тіла можливе використання феноменологічної моделі взаємодії атомів в кристалічних структурах. Мета данної роботи – розробити феноменологічну модель твердого тіла з урахуванням кінетики деформації та зміни термодинамічних параметрів деформованого тіла.

Феноменологічна модель твердого тіла
Пропонована нами модель передбачає розбиття твердого тіла на структурні одиниці залежно від його макроскопічних характеристик кристалічної решітки [13]. Потім довільним чином вибирається потенціал взаємодії, параметри якого пов'язані з макроскопічними властивостями досліджуваного твердого тіла. До таких потенціалів можна віднести: потенціал Леннарда-Джонса, Морзе, модифікований потенціал, сплайновий потенціал та інші [14].

У загальному вигляді будь-який потенціал є функцією енергії зв'язку і відстані між взаємодіючими атомами $\Pi(\delta)$. У свою чергу, відносна зміна міжатомної відстані δ залежить від термодинамічних параметрів і швидкості деформації. Сила взаємодії між атомами визначається згідно із законами класичної механіки.

$$f(a) = -\frac{d\Pi(\delta)}{d\delta} = -\Pi'(\delta) \quad (1)$$

У свою чергу, криві потенціалу $\Pi(\delta)$ та сили $f(\delta)$ мають особливі точки, в яких потенціал взаємодії, його перша і друга похідні звертаються в нуль..

$$\begin{aligned} \Pi(\delta_{\Pi 0}) &\equiv 0, \quad \Pi'(a_0) \equiv -f(a_0) \equiv 0, \\ \Pi''(\delta_{f \min}) &\equiv -f'(\delta_{f \min}) \equiv 0 \end{aligned} \quad (2)$$

де: $r_{\Pi 0}$ – відносна міжатомна відстань при якій потенціал взаємодії дорівнює нулю; a_0 – рівноважна міжатомна відстань у вакуумі при температурі абсолютного нуля; $r_{f \min}$ – відносна міжатомна відстань при якій сила міжатомної взаємодії набуває мінімального значення $f(\delta) = \min$.

Додатковими особливими точками є точки перегину функції $\Pi(\delta)$ і $f(\delta)$, точки в яких другі похідні $\Pi''(\delta)$ і $f''(\delta)$ міняють знак. Координати цих точок $\delta_{\Pi \text{ пер}}$ та $\delta_{f \text{ пер}}$ (рис. 1)

Особливі точки характеризують деякі особливості і властивості макроструктури твердого тіла. У свою чергу, вона складається з мікроструктур, які через свою регулярність, зв'язують макроскопічні параметри деформації з мікроскопічними параметрами структури виділених структурних одиниць (осередків) твердого тіла.

При динамічних навантаженнях на тверде тіло потенціал взаємодії грає важливу роль. За допомогою його можна вчислити роботу деформації структурної одиниці, її теплоємність, відстань між атомами, що входять в структурну одиницю.

Розбиття на структурні одиниці дозволяє з достатньою точністю досліджувати вплив кінетики деформації навантажуваного зразка твердого тіла на мікроскопічні параметри цієї речовини.



Рис. 1. Криві потенціалу взаємодії $\Pi(\delta)$, сили міжатомної взаємодії $f(\delta)$ і коефіцієнта пружної сили $K(\delta)$ з іншого боку, використання такого методу дозволяє найоптимальніше використовувати обчислювальні потужності і дає можливість моделювати

на одній або групі структурних одиниць кінетику навантаження і рівняння руху взаємодіючих атомів в структурній одиниці. У свою чергу, рівняння руху дозволяє змоделювати швидкість відносної деформації структурної одиниці $\dot{\delta} = \frac{d\delta}{dt}$ і відносну деформацію

$\delta = \frac{a - a_0}{a_0} = \delta(t)$ залежно від характеру сили, діючої на грані структурної одиниці.

Рівняння руху часток в структурній одиниці в загальному вигляді має вигляд:

$$\frac{d\dot{\delta}}{dt} + 2\beta\dot{\delta} + \int_0^t K(\delta)\dot{\delta}dt = F_e(t) \quad (3)$$

де $F_e(t)$ - приведена сила зовнішньої дії; $\dot{\delta} = \frac{d\delta}{dt}$ - швидкість деформації структурної одиниці; $K(\delta)$ - коефіцієнт пружної сили; β - коефіцієнт дисипації енергії деформації.

З рис. 1 видно, що коефіцієнт $K(\delta)$ є істотно нелінійною функцією. Рішенням рівняння (1) буде швидкість деформації структурної одиниці:

$$\dot{\delta} = \frac{d\delta}{dt} = f_1(t) \quad (4)$$

Інтегруючи рівняння (4), отримаємо залежність деформації від часу:

$$\delta = \int_0^t f_1(t)dt \quad (5)$$

Підставивши рішення рівняння (5) у функцію потенціалу $\Pi(\delta)$ і в рівняння (1) отримаємо залежність зміни потенціалу взаємодії і сили взаємодії між елементами, що входять в структурну одиницю з часом:

$$\Pi(\delta) = f_2(t), \quad f(\delta) = f_3(t) \quad (6)$$

Експериментальні дослідження, в свою чергу, дозволяють отримати наступні залежності:

$$\delta_{\mathcal{E}} = f_{\delta}^{\mathcal{E}}(t), \quad \frac{d\dot{\delta}}{dt} = f_1^{\mathcal{E}}(t), \quad \frac{d\dot{\delta}}{dt} = f_S^{\mathcal{E}}(t), \quad \frac{d\sigma}{dt} = f_3^{\mathcal{E}}(t) \quad (7)$$

На базі відповідних функцій отриманих теоретично і експериментально при дослідженні певного зразка, формуємо чотири функціонали:

$$\text{Енергетичний: } \Delta\Pi^T(t) - \Delta A_{\text{деф}}^{\mathcal{E}} \leq \min = 0;$$

$$\text{Силовий: } f_2^T(t) - f_3^{\mathcal{E}}(t) \leq \min = 0;$$

$$\text{Швидкісний: } \dot{\delta}^T(t) - \dot{\delta}^{\mathcal{E}}(t) \leq \min = 0;$$

$$\text{Деформаційний: } \delta^T(t) - \delta^{\mathcal{E}}(t) \leq \min = 0.$$

Мінімізація цих функціоналів дозволяє знайти оптимальні значення величин, що описують взаємодію між елементами, які входять до структурної одиниці. Невідомими величинами, які описують цю взаємодію, є: енергія зв'язку D ; розмір структурної одиниці a_0 при температурі абсолютного нуля $T_0 = 0$; коефіцієнт дисипації енергії β ; коефіцієнт ангармонічності b ; коефіцієнт жорсткості зв'язку K ; стала, що характеризує речовину A . З шести невідомих елементів опису

Мінімізація чотирьох функціоналів дає можливість вичислити значення величин β , b , K , A , в даний момент часу, тобто досліджувати залежність цих коефіцієнтів від динаміки навантаження зразка.

У рамках запропонованої моделі отримані чисельні значення і розподіл (Рис. 2) узагальненого потенціалу $\Pi = -D(e^{-2Ar} - 2e^{-Ar})$, (D – енергія дисоціації, r – вектор зміни міжатомної відстані, A – константа, що залежить від природи речовини) для ГЦК структурної одиниці заліза.

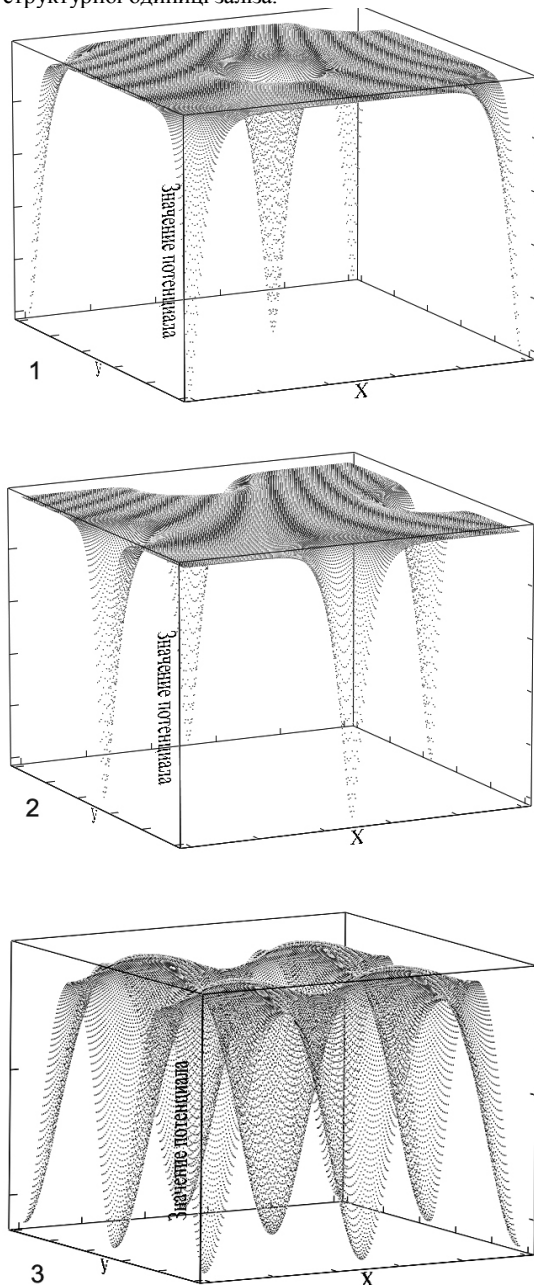


Рис. 2. Розподіл узагальненого потенціалу $\Pi = -D(e^{-2Ar} - 2e^{-Ar})$ в ГЦК структурній одиниці : 1 - на гранях, 2 - в центральному перерізі, 3 - в перерізі, що відділяє чверть осередку.

У рамках розробленої моделі досліджений вплив високого тиску на макроскопічні параметри металу, зокрема в роботі [15] представлені результати дослідження залежності коефіцієнта об'ємного зтиснення k від температури і тиску. Також, на базі даної моделі авторами розроблено метод теоретичного дослідження динаміки деформації структурної одиниці твердого тіла [16].

Висновки

За допомогою розробленої феноменологічної моделі твердого тіла з урахуванням динаміки деформації розрахований об'ємний розподіл потенціалу для різних типів структурних одиниць як у недеформованому, так і у деформованому стані. Знання розподілу потенціалу взаємодії у відповідних точках структурної одиниці дозволяє розрахувати вірогідний розподіл електронів. Модель дозволяє теоретично розрахувати швидкість розповсюдження звуку та коефіцієнт внутрішнього тертя, які відповідають еспериментальним даним.

Запропонована феноменологічна модель дає можливість за допомогою ряду експериментальних даних досліджувати вплив кінетики параметрів зовнішньої дії (швидкості деформації, тиску, температури і інших) на деформаційний процес з метою коригування коефіцієнтів рівняння стану речовини, що, на думку авторів, в перспективі дозволить вирішити низку скрутних питань сучасної фізики твердого тіла.

ЛІТЕРАТУРА

1. В. Хермель, Т. Кайбак, В. Шатт и др., Процессы массопереноса при спекании. - Киев: Наукова думка, 1987. -152 с.
2. Г.А. Фаркасов, А.Г. Фридман, В.М. Каринский, Плазменная плавка. - Москва: Металлургия, 1968. - 172 с.
3. В.С. Немков, Б.С. Полеводов, Математическое моделирование на ЭВМ устройств высокочастотного нагрева, - Ленинград: Машиностроение, 1980. - 62 с.
4. В. Г. Лисиенко, В. В. Волков, А. Л. Гончаров, Математическое моделирование теплообмена в печах и агрегатах. - Киев: Наукова думка, 1984. - 230
5. Л.М. Анищенко, С.Ю. Лавринюк, Математические основы проектирования высокотемпературных технологических процессов. - Москва: Машиностроение, 1986. - 226 с.
6. А.Г. Артамонов, В.М. Володин, В.Г. Авдеев, Математическое моделирование и оптимизация плазмохимических процессов. - Москва: Химия, 1989. - 223 с.
7. А.Г. Кобелев, И.Н. Потапов, Е.В. Кузнецов, Технология слоистых металлов.- Москва: Металлургия, 1991.- 248 с.
8. Л.Н. Ларионов, В.И. Исачев, Диффузия в металлах и сплавах. - Киев: Наукова думка, 1987. - 509 с.
9. Б.С. Бокштейн, Диффузия в металлах. - Москва: Металлургия, 1978. - 248 с.

10. Ф.М. Гольцман, Физический эксперимент и статистические выводы. - Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1982. – 191 с.
11. М. Ашкрофт, Н. Мермин Физика твёрдого тела, в 2т., М: Мир 1977
12. Р.Флейшер, У.Хиббард. Структура и механические свойства металлов. Металлургия. М. 1967 С. 85.
13. А.М. Кривцов, Н.В. Кривцова. Метод частиц и его использование в механике деформации твердого тела. Дальневосточный МЖ ДВО РАН. 2002, Т.3. №2. С. 254-276.
14. Erkos S. Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties. Physics Reports. 1977. V.278. №2 P. 80-105.
15. Мочалов А.А., Евфимко К.Д. Исследование влияния высокого давления на макроскопические параметры вещества //Вісник СумДУ – 2008. №1 С.156-160.
16. Мочалов А.А., Гайша А.А., Евфимко К.Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия //Журнал нано- та електронної фізики – 2009. Т1, №1 С.70-79.

пост. 18.04.2011

Математична модель нестационарної зміни термодинамічних параметрів при обробці металів в газостатах

ЄВФИМКО К.Д., ШАПОВАЛ Н.О.

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова

Запропоновано математичну модель нестационарної зміни термодинамічних параметрів при обробці металів в газостатах. Описана методика розрахунку зміни термодинамічних параметрів процесів, що протікають в газостатах, з урахуванням кінетики наноструктурних і макроскопічних параметрів.

Предложена математическая модель нестационарного изменения термодинамических параметров при обработке металлов в газостатах. Описана методика расчета изменения термодинамических параметров процессов, протекающих в газостатах, с учетом кинетики наноструктурных и макроскопических параметров.

The mathematical model of thermodynamic parameters transient changes in the metals gas-static processing is presented. The method of calculating the thermodynamic parameters of the gas-static processes taking into account nanostructure and macroscopic parameters kinetics is described.

Аналіз проблеми. Останнім часом у світовій практиці процес обробки матеріалів в газостатах набув широкого поширення. Ізостатичне пресування дозволяє помістити матеріал в рідке або газоподібне середовище, на яке діє певний тиск, що розподіляється рівномірно по усій поверхні матеріалу. Матеріал, у свою чергу, піддається стискуванню по багатьох напрямках і утворює форму, аналогічну заготівлі, але менших розмірів. Ця технологія дозволяє отримувати матеріали з гомогенною дрібнозернистою структурою, без сегрегацій, високою міцністю та з високими та пластичними характеристиками. У багатьох випадках ці характеристики значно перевищують рівень, що досягається при гарячій деформації відповідних компактних матеріалів. Це дає можливість отримання багатьох нових матеріалів і розробки принципово нових технологій їх отримання. При правильно підібраних режимах з'являється можливість досягнення теоретичної щільності матеріалу, отримання рекордних фізико-хімічних і механічних характеристик деталей.[1]

Інструментом для здійснення усебічного об'ємного стискування служать установки гарячого ізостатичного пресування, в якому робочим тілом, що передає усебічний тиск, є інертний газ, що забезпечує умови ізостатичної дії високого тиску впродовж

Розробка першої установки була свого часу виконана в США в Battelle Memorial Institute під керівництвом Ч. Бойера в 1955 р. і сьогодні вони використовуються в багатьох країнах. Своє застосування газостати знаходять для будь-яких конструкційних матеріалів виконаних литвом, біметалічних матеріалів, у порошковій металургії, для з'єднання різномірних матеріалів і інших. Але висока вартість зарубіжних установок, а також використання дорогих матеріалів не дозволяють в сучасних реаліях купувати і використовувати їх в нашій країні.

Усі вищезгадані чинники дозволяють зробити висновок про те, що в даний момент в нашій країні актуальні розробка і проектування газостатів, а також вивчення процесів, що протікають при ізостатичному стискуванні і технологічних аспектів гарячого ізостатичного пресування. Одним з найважливіших етапів в цьому процесі є математичне моделювання зміни термодинамічних параметрів при обробці металів в газостатах, том що емпіричним шляхом робити такі дослідження у більшості випадків неможливо, тому що необхідно враховувати наноструктурні зміни в умовах надвисокого тиску.

Постановка задачі. У цій роботі поставлена завдання дослідити, як будуть змінюватися

