

ЛИТЕРАТУРА

1. Приходько Э. В. Теоретические основы физико-химических моделей структуры многокомпонентных материалов. / Э. В. Приходько // Изв. АН СССР. Металлы. — 1991. — № 6. — С. 208—214.
2. Тогобицкая Д. Н. Опыт создания и внедрения системы контроля и управления шлаковым режимом доменной плавки в шихтовых и технологических условиях заводов Украины / Д. Н. Тогобицкая, А. И. Белькова, А. Ф. Хамхотько, Д. А. Степаненко // Сб. научных трудов ИЧМ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии». — Днепропетровск. — 2009. — Вып. 19. — С. 100—112.
3. Физико-химические основы создания системы контроля и управления шлаковым режимом доменной в изменяющихся шихтовых и технологических условиях / Д. Н. Тогобицкая, А. Ф. Хамхотько, А. И. Белькова, П. И. Оторвин // Теория и практика производства чугуна: материалы МНТК, посвященной 70-летию КГГМК «Криворожсталь». — Кривой Рог., 2004 г. — С. 504—508.
4. Приходько Э. В. Базы теоретических и технологических данных для информационных технологий в металлургии. Черная металлургия России и СНГ в XXI веке / Э. В. Приходько, Д. Н. Тогобицкая // Сб. трудов международной конференции. Изд. Металлургия. — 1994. — С. 178—180..

пост.05.06.13

Особенности математического моделирования динамических процессов в твердых телах с микроструктурой

А. А. МОЧАЛОВ, К. Д. ЕВФИМКО, Н. А. ШАПОВАЛ

Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова

Рассмотрены особенности математического моделирования динамических процессов в твердых телах, имеющих кристаллическую структуру. Описана модель процесса смещения атомов в твердом теле под действием внешней силы.

Розглянуто особливості математичного моделювання динамічних процесів у твердих тілах, що мають кристалічну структуру. Описано модель процесу зсуву атомів у твердому тілі під дією зовнішньої сили.

The features of dynamic processes mathematical modeling in solids with a crystalline structure are studied. The model of atoms displacement in solids under the influence of an external force is presented.

В настоящее время не существует уравнения состояния твердых тел, связывающего основные физические величины и термодинамические параметры, при помощи которого возможно было бы адекватно описать прочностные свойства материалов; динамику распространения тепловых и механических возмущений, учитывая влияние взаимосвязь теплофизических величин и динамику их изменения. Кроме того, все существующие физические величины, описывающие прочностные и теплофизические свойства материалов, получены на базе теории сплошных сред [1].

Теория сплошных сред предполагает, что масса тел равномерно распределена по всему объему вещества. Физические величины, полученные экспериментально на базе этой теории, справедливы только для квазистационарных условий. Использование их при расчетах быстропротекающих процессов не дает истинной картины, так как многие физические величины существенно зависят от скорости протекания процесса. Так, известно, что прочность материалов возрастает с увеличением скорости деформации [2].

Например, если струю жидкости рассекать предметом, движущимся с большой скоростью, то она разрушается как твердое тело, будто она состоит из твердой стекловидной массы. Осколки имеют ост-

рые края, спустя определенный промежуток времени они принимают каплевидную форму. В тоже время твердое тело при больших скоростях деформации (сварка взрывом) ведет себя как жидкость в некоторых: металлическая байка и подложки проникают друг в друга формируя цепочку вихрей. При этом температура в процессе скоростной деформации на 1000 К ниже температуры плавления этих металлов [3]. (рис. 1)

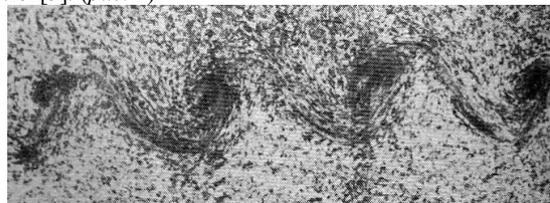


Рис. 1. Цепочка вихрей, образующихся при сварке взрывом

Из этого следует, что жидкость при больших скоростях деформации может вести себя как твердое тело, а твердое тело - как жидкость.

Особенности такого поведения различных материалов зависят от сил межатомного взаимодействия. Силы межатомного взаимодействия не в состоянии перенести атомы в новое устойчивое состояние

мгновенно, так как переходный процесс, в зависимости от величины и скорости воздействия, может происходить по экспоненциальному или по закону затухающих колебательных. На макроуровне описать силы межатомного взаимодействия практически невозможно. Следовательно, для описания сил межатомного взаимодействия необходимо перейти к атомным структурам и исследовать влияние внешних воздействий непосредственно на кристаллическую структуру вещества.

Поскольку любое кристаллическое твердое вещество состоит из определенных микроструктурных единиц – ячеек кристаллической решетки. Они, в свою очередь, состоят из атомов и молекул, взаимодействующих между собой, что формирует вид данной структурной единицы и определяет ее физические свойства. Если мы будем знать, как ведет себя та или иная структурная единица вещества под действием различных возмущений (механических, тепловых, электромагнитных), мы сможем прогнозировать поведение данного твердого тела при различных видах внешних динамических воздействий. Но при этом необходимо учитывать, что масса структурной единицы не распределена равномерно по ее объему, а локализована в конкретных точках, узлах кристаллической решетки. Несмотря на это, интегральные термодинамические характеристики, такие как плотность ρ , удельная теплоемкость c , теплопроводность λ , относительная деформация механическая δ и тепловая δ_T , должны полностью соответствовать интегральным характеристикам структурной единицы данного вещества, что дает возможность исследовать влияние различных внешних воздействий на структурную единицу, определить особенности межатомного взаимодействия атомов и молекул входящих в данную структурную единицу.

Взаимодействие атомов и молекул в структурной единице зависит от множества факторов: от несимметричного строения молекул, поляризации атомов и молекул под действием собственных электрических полей, которые в свою очередь изменяются при различных внешних воздействиях, от взаимодействия обусловленного колебательными движениями зарядов в атомах и молекулах (эти колебания порождают колебания зарядов в других атомах и молекулах, при чем сила взаимодействия существенно зависит от разности фаз колебаний). Силы взаимодействия между атомами и молекулами имеют сложную природу, и на данном этапе развития науки на базе существующих методов экспериментального исследования материалов не удается непосредственно исследовать природу каждой из сил межатомного взаимодействия. Поэтому в настоящее время для исследования динамического воздействия на структурную единицу используются различные эмпирические и теоретические методы, в частности метод динамики частиц [4,7], который базируется на потенциалах взаимодействия частиц (М-Джонсона, Морзе, приведенного потенциала и т.д.). Однако при математическом моделировании межатомного взаимодействия атомов структурной единицы лучше всего пользоваться понятием коэффициента жесткости межатомных связей, который связан с потенциалом взаимодействия следующим образом [5]

$$\frac{dk(\delta)}{d\delta} \cdot \delta + k(\delta) = \frac{d^2\Pi(\delta)}{d\delta^2} \quad (1)$$

$k(\delta)$ - коэффициент жесткости межатомных связей от относительной деформации;

$\Pi(\delta)$ - потенциал межатомного взаимодействия, функция от относительной деформации структурной единицы δ .

Для вычисления коэффициента межатомной жесткости металлов лучше пользоваться потенциалом Морзе [5,7] решив дифференциальное уравнение (1), получим зависимость коэффициента жесткости межатомного взаимодействия, как функцию от относительной деформации δ .

$$\frac{k(\delta)}{k_0} = ae^{-\delta} - de^{-A\delta} - be^{-2A\delta}, \quad (2)$$

$$\text{где } a = (1 + d + b), \quad d = \frac{A}{A-1}, \quad b = \frac{2A}{2A-1},$$

A - постоянная для данного вещества,

$$\delta = \frac{r - r_0}{r_0} - \text{относительное изменение межатомно-}$$

го расстояния,

r, r_0 - расстояние между атомами при внешнем воздействии, тоже в отсутствии внешних воздействий при $T_0=0$ К (постоянная величина для данного вещества, определяется экспериментально при температуре вещества близкой к абсолютному нулю, методом гаммаскопии, либо нейтронного облучения);

k_0 - коэффициент жесткости межатомных связей при отсутствии внешних воздействий при $T \approx 0$ К.

Величина γ , входящая в относительное изменение межатомного расстояния, в свою очередь зависит от величины результирующей деформирующей силы, количество тепла поглощенного или выделившегося в структурной единице, и, как следствие, от температуры T , давления p .

Зависимость относительной деформации межатомного расстояния от термодинамических параметров p, T записывается выражением

$$\delta = \frac{r - r_0}{r_0} = \beta T - k_p p,$$

где β - коэффициент линейного расширения;

k_p - коэффициент линейной сжимаемости;

$$\frac{r - r_0}{r_0} = ap - bp^2,$$

где a, b постоянные для данного вещества [6].

Для исследования относительного смещения атомов в структурной единице под действием внешних воздействий, запишем уравнение Ньютона, в приращениях относительной деформации, для i -го атома структурной единицы при взаимодействии с k -м атомом [7]

$$\left\{ \begin{aligned} m_i \frac{d\Delta\dot{\delta}_i}{dt} &= \xi\Delta\dot{\delta}_{xi} + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^N \int k_{ik} \Delta\dot{\delta}_{xi} dt + \frac{F_x(t)}{r_0} \cos(\Delta\dot{\delta}_{xi}x) \\ m_i \frac{d\Delta\dot{\delta}_i}{dt} &= \xi\Delta\dot{\delta}_{yi} + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^N \int k_{ik} \Delta\dot{\delta}_{yi} dt + \frac{F_x(t)}{r_0} \cos(\Delta\dot{\delta}_{yi}y) \\ m_i \frac{d\Delta\dot{\delta}_i}{dt} &= \xi\Delta\dot{\delta}_{zi} + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^N \int k_{ik} \Delta\dot{\delta}_{zi} dt + \frac{F_x(t)}{r_0} \cos(\Delta\dot{\delta}_{zi}z) \end{aligned} \right. \quad (4)$$

где m_i – масса i -го атома;

$\Delta\dot{\delta}_{xi}, \Delta\dot{\delta}_{yi}, \Delta\dot{\delta}_{zi}$ – скорость перемещения i -го атома по направлению координатных осей

$$\frac{d\Delta\dot{\delta}_i}{dt} = \frac{d\Delta\dot{\delta}_{xi}}{dt} + \frac{d\Delta\dot{\delta}_{yi}}{dt} + \frac{d\Delta\dot{\delta}_{zi}}{dt};$$

ξ – коэффициент диссипации энергии при деформации (смещении атома);

$k_{ik}(\Delta\dot{\delta}_{ik})$ – коэффициент жесткости межатомной связи между i -м и k -м атомами;

$F_x(t)$ – внешнее воздействие в направлении оси x , действующее на первую грань структурной единицы;

$\cos(\Delta\dot{\delta}_{xi}x), \cos(\Delta\dot{\delta}_{yi}y), \cos(\Delta\dot{\delta}_{zi}z)$ – направляющие косинусов по соответствующим координатным осям x, y, z .

Данную систему уравнений для N атомов структурной единицы необходимо дополнить взаимосвязью координатных векторов i -го, k -го, m -го, j -го, $\vec{\delta}_{ik}, \vec{\delta}_{mj}$ с векторами перемещений $\Delta\vec{\delta}_{ij}, \Delta\vec{\delta}_{\perp}$ в направлении силы $F_x(t)$ и перпендикулярное ей в произвольный момент времени t .

$$\vec{\delta}_{ik}^c + \Delta\vec{\delta}_{ii} + \vec{\delta}_{II} = \vec{\delta}_{ik}^H + \vec{\delta}_{\perp}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{\delta}_{li}^c + \vec{\delta}_{\perp} + \vec{\delta}_{II} &= \vec{\delta}_{li}^H \\ \vec{\delta}_{mj}^c + \Delta\vec{\delta}_{jj} &= \vec{\delta}_{mj}^H + \vec{\delta}_{\perp} \\ \vec{\delta}_{ii} &= \Delta\vec{\delta}_{jj} + \vec{\delta}_{\perp} \\ \Delta\vec{\delta}_{jj} &= \vec{\delta}_{II} = \Delta\vec{\delta}_{ii} \\ \vec{\delta}_{\perp} &= \vec{\delta}_{\perp} \sqrt{2} \end{aligned} \right. \quad (5)$$

Если структурную единицу представить в виде периодической цепочки из приведенных масс, находящихся в атомарных плоскостях ячейки, на которую действуют с силой f , система уравнений (1-5) упрощается.

Результаты расчета переходного процесса движения приведенных масс под действием различных внешних сил показаны на рис.2.

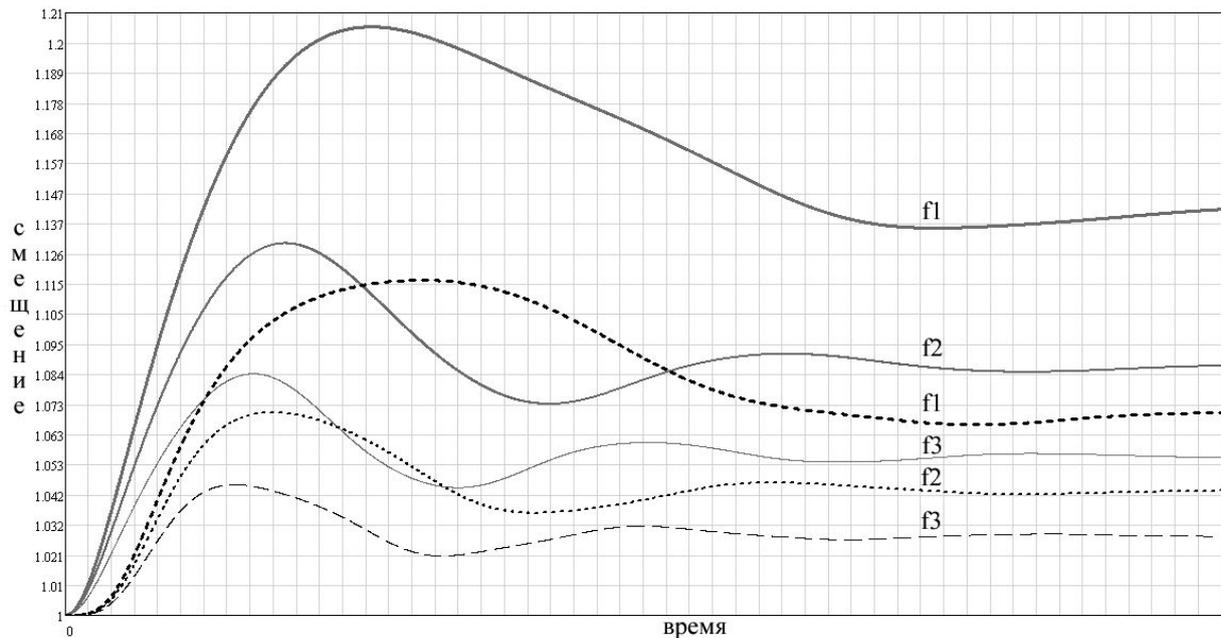


Рис. 2. Переходный процесс смещения атомарных плоскостей в ГЦК структурной единице под действием внешней силы f .

Характер переходного процесса, приведенных масс находящихся в атомарных плоскостях структурных единиц, показанный на рис.2 подтверждается реальными событиями, описываемыми при землетрясениях. Сначала идет первая волна с большой магнитудой, за ней спустя определенный промежуток времени, идет волна с меньшей магнитудой и так далее, пока переходный процесс не заканчивается.

Используя модель [7] периодической цепочки из приведенных масс атомарных плоскостей структурной единицы вещества, можно вычислить скорость распространения упругих волн сжатия в этом веществе. Сравнивая ее со скоростью звука, полученной экспериментально, можно, решив обратную задачу, получить значение постоянной A , которая входит в потенциал межатомного взаимодействия и коэффициент жесткости данного материала. В работе [7], на базе переходных процессов приведенных масс атомарных плоскостей структурных единиц вычислена скорость распространения в железе, которая составила 3300 м/с (возмущение считалось достаточным, если смещение масс атомарных плоскостей достигало 0,5%). Если использовать результаты приведенных на рис.2 для вычисления скорости звука в веществе, то необходимо вычислить среднеинтегральную скорость за переходный процесс

$$\langle v_{зв} \rangle = \frac{1}{t_{пер}} \cdot \int_0^{t_{пер}} v(t) dt$$

Результаты приведены на рис. 2, можно получить используя способ регистрации распространения возмущений [8], который даст возможность регистрировать импульсы сжатия на входе и выходе из образца, их отражение от свободных концов материала. Анализируя результаты, в реальном времени можно получить зависимость коэффициента рассеивания энергии ξ , скорость распространения упругих волн, периодичность максимумов. Зная эти параметры, с использованием выражений (1-5) с учетом [7], можно решить обратную задачу, которая позволяет найти величину ξ , $k(t)$. Зная зависимости $k(\delta)$ и $\delta(t)$ используя выражение (3), дает возможность вычислить зна-

чение A , для данного материала и как следствие потенциал межатомного взаимодействия $\Pi(\delta)$, а при известной зависимости $\delta(t)$, можно получить зависимость $\Pi(\delta,t)$, для данного материала, в реальном времени.

ЛИТЕРАТУРА

1. Седов А. И. Механика сплошных сред. — М., Наука, 1983, том 1, 528 с, том 2, 1984, 560 с.
2. Капель Г. И., Разорелов С. В. и др. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. — М.: 1973, — 416 с.
3. Лаврентьев М. А., Шабай Б. В. Проблемы гидродинамики и их математические модели. — М.: Наука, 1973, 416 с.
4. Индейцев Д. А., Кривцов А. М., Ткачев П. В. Доклады академии наук, 2006, том 407, №3, С. 1—3, Исследование методом динамики частиц взаимосвязи между осколочной прочностью и скоростью деформации твердых тел.
5. Мочалов А. А., Гайша А. А. Методика расчета коэффициента жесткости межатомной связи на основе экспериментальной кривой напряжений. — Ж.: Нано-та Електронної фізики, том 1, №1, 01001 — 1, 2012.
6. Справочник физических констант горнах порд. — М.: Мир, 1969, С. 109.
7. Мочалов А. А., Гайша А. А., Евфимко К. Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия. — Ж.: Нано-та Електронної фізики, том 1, № 1, 2009, С. 70—79.
8. U2009 06783 от 30.06.09 «Пристрій для визначення коефіцієнта тертя між атомами кристалічної решітки матеріалу» Мочалов А. А., Евфимко К. Д., Гайша А. А., Степанов П. А.
9. Мочалов А. А., Гайша А. А., Евфимко К. Д. Исследование зависимости потенциала Морзе от температуры и давления для металлов. — Ж.: Метал и литве України, № 11—12, 2009, С. 58.