

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
Болгарская Академия наук
ООО «ЛИТТ»

ИННОВАТИКА-2017

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

**XIII Международной школы-конференции студентов,
аспирантов и молодых ученых
20–22 апреля 2017 г.
г. Томск, Россия**

Под ред. А.Н. Солдатов, С.Л. Минькова

Scientific & Technical Translations



ИЗДАТЕЛЬСТВО

Томск – 2017

АНАЛИЗ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ПРИЗМАТИЧЕСКОГО СКОЛЬЖЕНИЯ В ГЦК-МЕТАЛЛАХ

К.О. Некрасова, С.И. Самохина

Национальный исследовательский Томский государственный университет

e-mail: nekrasovaxo@gmail.com

ANALYSIS OF THE MODEL OF THE PRISMATIC SLIP DYNAMICS IN FCC-METALS

K.O. Nekrasova, S.I. Samokhina

National Research Tomsk State University

In the paper the mathematical model of surface prismatic slip dynamics is to investigate its hardness. The model is a system of simple first-order differential equations. It is shown the investigate system has hardness in any initial conditions.

Keywords: mathematical modeling, study of the nonlinear differential equations system.

Физико-механические и технологические свойства металлов определяются видом металла и его кристаллическим строением. Металлы и сплавы в твёрдом состоянии имеют кристаллическое внутреннее строение, то есть атомы металлов располагаются в пространстве закономерно и в строго определённом порядке, образуя кристаллическую решётку, узлы которой являются местом расположения атомов. Поэтому механические, физические и химические свойства кристаллов неодинаковы. Деформация металлов представляет собой результат изменения межатомных расстояний и перегруппировки блоков атомов.

Развитие деформации, близкой к поверхности, достаточно сильно отличается от деформации, происходящей внутри кристалла. При механическом воздействии на кристалл возрастают напряжения, и дислокации образуют замкнутые дислокационные петли вокруг частиц. Такие дислокации имеют краевую или близкую к ней ориентацию, а поверхность скольжения для них – цилиндрическая. Оставив вокруг частиц петли, дислокации останавливаются или продолжают скользить в прежнем направлении. Данного типа дислокационные петли именуют призматическими.

Такой механизм деформации металлов весьма важен, так как он вносит вклад в конъюнктурные процессы, происходящие при механических воздействиях. Дислокационная призматическая петля, сформировавшаяся у некоторого концентратора напряжения у поверхности кристалла, ускользает при напряжениях близких к пределу прочности кристалла (рис. 1).

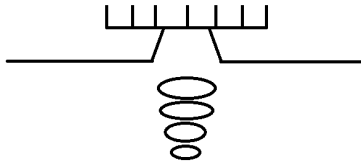


Рис. 1. Схема зарождения призматических дислокационных петель при вдавливании микрошероховатости

В поле концентратора такие дислокации приобретают высокую кинетическую энергию, которая в свою очередь способствует более глубокому проникновению в объем кристалла. В таком случае, призматическая дислокационная петля осуществляет работу против сил, обусловленных решеточным трением, упругими полями атомов примесей, рассеянием фононов и электронов проводимости.

Математическая модель динамики призматического скольжения представляет собой систему нелинейных однородных дифференциальных уравнений первого порядка, разрешена относительно производных (записана в нормальной форме), является автономной и нелинейной [1-5]:

$$\begin{cases} \frac{d\varepsilon_k}{dt} = \left(-\tau_R b - B c \sqrt{1 - \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^{-2}} \right) \left(c \sqrt{1 - \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^{-2}} \right), \\ \frac{dz}{dt} = \left(c \sqrt{1 - \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^{-2}} \right). \end{cases} \quad (1)$$

В качестве базового набора значений параметров использованы следующие данные: модуль сдвига G (медь) = $5,556 \cdot 10^{10}$ Н/м², параметр междислокационных взаимодействий $\alpha=0.5$, $B = 2,1 \cdot 10^{-5}$ Па·с; модуль вектора Бюргера $b = 2,5 \cdot 10^{-10}$ м; $\tau_f = 1 \cdot 10^6$ МПа; плотность дислокаций $\rho = 10^{-12}$ м², коэффициент Пуассона $\nu=1/3$, скорость звука в меди $c=3790$ м/с, $\delta = 0.1 \cdot 10^{-6}$ Мкм, Вектор Бюргера $V = 2,1 \cdot 10^{-5}$, коэффициент «сухого» трения $\tau_r = 1 \cdot 10^6$, вычисляется по формуле $\tau_r = \tau_f + \alpha G b \rho^{0.5}$.

При параметрическом анализе системы ОДУ нельзя не упомянуть о таком понятии, как жесткость. Класс жестких задач представляют собой задачи, для решения которых лучше использовать неявные методы.

Изначально интерес к жестким системам возник при изучении уравнений химической кинетики. Тогда и было выяснено, что обычные методы (типа Рунге-Кутты) неприменимы, так как стали давать сбой при расчетах. Существуют разные методы для определения жесткости нелиней-

ных ОДУ. В данном исследовании было взято за основу следующее определение. Система ОДУ является жесткой, если собственные числа λ_k , $i=1..N$ матрицы А удовлетворяют следующим условиям:

1. $Re(\lambda_i) < 0, i=1..N$;
2. Число жесткости велико:

$$S = \frac{\max_{1 \leq i \leq N} \{ |Re(\lambda_i)| \}}{\min_{1 \leq i \leq N} \{ |Re(\lambda_i)| \}} \quad (2)$$

На практике задачу можно считать жесткой, если коэффициент жесткости больше 10, однако часто встречаются задачи с коэффициентом жесткости 10^6 и более.

Исследуемая система (1) имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{d\varepsilon_k}{dt} = \varphi(\varepsilon_k, z) \\ \frac{dz}{dt} = \psi(\varepsilon_k, z) \end{cases} \quad (3)$$

Для дальнейшего исследования необходимо, записать (3) в векторной форме:

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_{\varepsilon_k} & 0 \\ \psi_{\varepsilon_k} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

Далее имеем: $Det(A - \lambda E) = \begin{vmatrix} \varphi_{\varepsilon_k} - \lambda & 0 \\ \psi_{\varepsilon_k} & -\lambda \end{vmatrix} = 0$ или $(\varphi_{\varepsilon_k} - \lambda)(-\lambda) = 0$.

Следовательно, $\lambda_1 = 0$ и $\lambda_2 = \varphi_{\varepsilon_k}$.

Производные правых частей системы дифференциальных уравнений (5) выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varepsilon_k}{dt^2} = \frac{Bc^2}{\varepsilon_0 \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^3} - \frac{c \left(\tau_R b + B c \sqrt{1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^2}} \right)}{\varepsilon_0 \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^3 \sqrt{1 - \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^2}}; \\ \frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{c}{\varepsilon_0 \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^3 \sqrt{1 - \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0}\right)^2}}. \end{cases} \quad (5)$$

Ранее были рассчитаны минимальная и максимальная оценка кинетической энергии призматической дислокации, благодаря которым мы сможем произвести дальнейшее исследование на жесткость: $\varepsilon_k^{(min)} = 2,403 \cdot 10^{-8}$ и $\varepsilon_k^{(max)} = 4,638 \cdot 10^{-8}$. При вычислении получаем собственные значения, равные $\lambda_1 = -3,726 \cdot 10^9$ и $\lambda_2 = 0$ при минимальной оценке кинетической энергии, $\lambda_1 = -1,629 \cdot 10^9$ и $\lambda_2 = 0$ при максимальной оценке.

Если значения λ_1 и λ_2 (при максимальной и минимальной оценке) подставить в (5), то получается деление на ноль из чего можно из чего можно сделать вывод, что данная система является жесткой при любых параметрах.

Литература

1. Пуспешева С.И., Колупаева С.Н., Попов Л.Е. Призматическое скольжение в ГЦК-металлах / Физическая мезомеханика. – 2004. – Т. 7, № 6. – С. 51-57.
2. Попов Л.Е., Пуспешева С.И., Колупаева С.Н. Динамика приповерхностных призматических петель // Вестник Тамбовского университета. – 1998. – Т. 3, № 3. – С. 221–222.
3. Petelina Y., Samokhina S., Petelin A., Polosukhin K., Vik K., Kolupaeva S. The dynamics – of near-surface prismatic loops in lead // AIP Conference Proceedings 2. – 2016. – С. 040004-1–040004-4
4. Петелин А.Е. Влияние размера пятна контакта на динамику призматической дислокационной петли в свинце / А.Е. Петелин и др. // Перспективные материалы в технике и строительстве. – 2015. – С. 219–221.
5. Самохина С.И., Петелин А.Е., Колупаева С.Н. Моделирование зоны кристаллографического сдвига в ГЦК-металлах // Вестник Томского государственного университета. – 2007. – № 23. – С. 333.