

УДК 539.37

*О.И. ДАНЕЙКО^{1,2}, Т.А. КОВАЛЕВСКАЯ^{1,2}, О.В. МАТВИЕНКО^{1,2}***ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ НЕКОГЕРЕНТНЫХ ЧАСТИЦ НА ПРОЧНОСТНУЮ ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ ЛЁГКИХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ***

С использованием математического моделирования исследуется влияние размеров некогерентных частиц на прочность гетерофазного сплава на основе алюминия в материалах с одинаковой объёмной долей упрочняющей фазы. Показано влияние размеров частиц на эволюцию в процессе деформации различных типов дислокаций: матричных, призматических петель, диполей. Выявлено, что при малой объёмной доле некогерентных частиц кривые течения имеют различное поведение в зависимости от размера частиц. Определены диапазоны изменения масштабных характеристик упрочняющей фазы для термической стабильности дисперсно-упрочнённого сплава.

Ключевые слова: дисперсно-упрочнённые материалы, наноразмерные частицы, пластическая деформация, математическое моделирование, деформационное упрочнение.

Введение

Алюминиевые сплавы благодаря своим свойствам (высокой технологичности, электро- и теплопроводности, высокой устойчивости к коррозии) широко используются в различных отраслях промышленности. Дисперсно-упрочнённые материалы на основе алюминия обладают повышенными прочностными характеристиками и жаропрочностью, что является решающим фактором для применения их в авиастроении и космической промышленности. В настоящее время чрезвычайно актуальным является исследование влияния нанодисперсных упрочняющих частиц на свойства алюминиевых сплавов, что является основой для создания новых материалов с уникальными свойствами.

Целью настоящей работы является исследование влияния размера некогерентных частиц на прочностную термическую стабильность дисперсно-упрочнённых материалов с алюминиевой матрицей при малой объёмной доле упрочняющей фазы. Для исследования использовалась математическая модель пластической деформации дисперсно-упрочнённых материалов с ГЦК-матрицей и некогерентными недеформируемыми сферическими частицами.

Математическая модель пластической деформации

Математическая модель пластической деформации дисперсно-упрочнённых сплавов опирается на физическую модель, детально разработанную в ряде предыдущих работ, основой которой является концепция упрочнения и отдыха [1, 2]. Модель включает уравнения баланса деформационных линейных и точечных дефектов с учетом их генерации, аннигиляции и трансформации в процессе пластической деформации. Система дифференциальных уравнений, описывающих процессы накопления линейных и точечных дефектов, неоднократно уточнялась в связи с введением в физическую модель дополнительных деталей, необходимость которых диктовалась реальными физическими явлениями.

При моделировании процесса пластической деформации и деформационного упрочнения дисперсно-упрочнённых материалов с ГЦК-матрицей, содержащих некогерентную дисперсную фазу, предполагается, что формируется зона сдвига и образуются следующие типы деформационных дефектов: линейные – сдвигообразующие дислокации (их плотность обозначена ρ_m), призматические петли вакансионного (ρ_p^v) и межузельного (ρ_p^i) типа, дислокационные диполи вакансионного (ρ_d^v) и межузельного (ρ_d^i) типа, точечные деформационные дефекты – межузельные атомы (их концентрация обозначена c_i), моновакансии (c_v), бивакансии (c_{2v}).

Моделирование процесса генерации сдвигообразующих дислокаций основывается на том, что одним из основных способов, которым серии дислокаций могут генерироваться в одной плоскости

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-13-01252).

скольжения, является работа источника Франка – Рида, в результате которой возникает серия замкнутых дислокаций, порождающих зону кристаллографического сдвига. При моделировании генерации призматических петель учтено, что плотность дислокаций, образованных на частицах, определяется плотностью призматических петель, образующихся непосредственным выдавливанием около частиц (механизм Эшби) и плотностью призматических петель, образующихся при перестроении колец Орована в призматические петли (механизм Хирша – Хэмпфри) [3–12].

В процессе моделирования формирования зоны сдвига были учтены: соотношения масштабных характеристик дислокационной структуры и упрочняющей фазы, трёхмерный характер движения дислокаций (движение дислокаций с порогами, за которыми остаются, накапливаются, аннигилируют и релаксируют деформационные точечные дефекты: межузельные атомы, вакансии, бивакансии), а также динамическая природа этого движения. Предполагалось, что формирование дислокационных диполей начинается при достижении в материале критической плотности дислокаций [13], определяемой масштабными характеристиками упрочняющей фазы (размером частиц, расстоянием между центрами частиц). После формирования диполя величина его плеча может изменяться в результате осаждения на образующих его дислокациях точечных дефектов, в результате чего диполь может аннигилировать, либо дислокации, составляющие диполь, могут потерять устойчивость и перейти в разряд сдвигообразующих дислокаций.

Внешнее воздействие на материал задается уравнением или системой уравнений, имеющих различную структуру в зависимости от физического воздействия, которое является причиной деформации. Таким образом, система уравнений баланса элементов деформационной дефектной среды может быть записана в виде [14–17]

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_m}{da} &= (1-\omega_s P_{as}) \frac{F}{Db} - \frac{2b}{\dot{a}} ((1-\omega_s) \rho_m^2 \min(r_a, \rho_m^{-1/2}) (c_{2v} Q_{2v} + c_{1v} Q_{1v} + c_i Q_i) + \\ &+ \alpha \sqrt{\rho} (\rho_p^v (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v}) + \rho_p^i c_i Q_i) + \frac{1}{r_a} (\rho_d^i c_i Q_i + \rho_d^v (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v}))), \\ \frac{d\rho_p^i}{da} &= \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{2\alpha}{\dot{a}} \sqrt{\rho} \rho_p^i b (2c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + 2c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{d\rho_p^v}{da} &= \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{2\alpha}{\dot{a}} \sqrt{\rho} \rho_p^v b (c_{2v} Q_{2v} + 2c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{d\rho_d^v}{da} &= \frac{1}{\Lambda_p b} - \frac{2b}{\dot{a} r_a} \rho_d^v (c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{d\rho_d^i}{da} &= \frac{1}{\Lambda_p b} - \frac{2b}{\dot{a} r_a} \rho_d^i (c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{dc_i}{da} &= q \frac{\tau_{\text{dyn}}}{G} - \frac{c_i}{\dot{a}} [((1-\omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 Q_i + Q_{1v} c_{1v} + Q_{2v} c_{2v} + Q_i (c_{1v} + c_{2v})], \\ \frac{dc_{1v}}{da} &= \frac{q \tau_{\text{dyn}}}{6G} - \frac{1}{\dot{a}} [(((1-\omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 + c_i + c_{1v}) Q_{1v} c_{1v} + Q_i c_i c_{1v} - (Q_{2v} + Q_i) c_i c_{2v}], \\ \frac{dc_{2v}}{da} &= \frac{5q \tau_{\text{dyn}}}{6G} - \frac{1}{\dot{a}} [(((1-\omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 + c_i) Q_{2v} c_{2v} + Q_i c_i c_{2v} - Q_{1v} c_{1v}^2], \\ \dot{a} &= \frac{8}{\pi} \frac{\nu_D B \beta_r^{1/2}}{\xi^{1/6} F (1 - \beta_r)} \frac{\tau^3 (((1 - \beta_r) \rho_m + \rho_p + \rho_d) (\tau - \tau_a))^{1/3}}{G^{4/3} b^{1/3} (\tau^2 - G^2 b^2 \xi \beta_r \rho_m) \rho_m^{1/2}} \exp \left[-\frac{0.2 G b^3 - (\tau - \tau_a) \Lambda b^2}{kT} \right]. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь a – деформация сдвига; \dot{a} – скорость деформации; F – параметр, определяемый формой дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига; D – диаметр зоны сдвига; b – модуль вектора Бюргерса; ω_s – доля винтовых дислокаций; P_{as} – вероятность аннигиляции винтовых дислокаций; r_a – критический радиус захвата; τ_{dyn} – напряжение, избыточное над статическим со-

противлением движению дислокаций; Q_j – кинетический коэффициент; ν_D – частота Дебая; k – постоянная Больцмана; T – температура деформирования; $\langle \chi \rangle$ – средняя величина параметра, характеризующего геометрию дислокаций на частицах; Λ_p – расстояние между частицами второй фазы; δ – размер частиц; q – параметр, определяющий интенсивность генерации точечных дефектов; G – модуль сдвига; B – параметр, определяемый вероятностью образования дислокационных барьеров, ограничивающих зону сдвига; ρ – плотность дислокаций; ξ – множитель Смоллмэна; $\rho_p = \rho_p^i + \rho_p^v$ – плотность призматических дислокационных петель; $\rho_d = \rho_d^i + \rho_d^v$ – плотность дислокаций в дипольных конфигурациях; τ – сдвиговое напряжение; Λ – длина свободного дислокационного сегмента; β_r – доля реагирующих дислокаций леса.

Атермическая составляющая сопротивления движению дислокаций τ_a в дисперсно-упрочнённом сплаве с некогерентными частицами обусловлена напряжением трения τ_f , взаимодействием с реагирующими дислокациями леса τ_d и напряжением обхода частиц $\tau_{ог}$: $\tau_a = \tau_f + \tau_d + \tau_{ог}$.

Для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих баланс деформационных линейных и точечных дефектов, необходимо задать начальные значения концентраций точечных дефектов и плотностей дислокаций. Начальная концентрация точечных дефектов соответствует концентрации термодинамически равновесных точечных дефектов при данной температуре, начальная плотность сдвигообразующих дислокаций соответствует состоянию недеформированного кристалла, предполагается отсутствие дислокационных призматических петель и дислокаций в дипольных конфигурациях при $a = 0$: $\rho_m^{(0)} = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_p^{(0)} = \rho_d^{(0)} = 0$, $c_i^{(0)} = \exp(-U_i^f/kT)$, $c_v^{(0)} = \exp(-U_v^f/kT)$, $c_{2v}^{(0)} = \exp(-U_{2v}^f/kT)$.

Основные расчеты проведены при следующих значениях параметров для монокристаллов дисперсно-упрочнённых сплавов с алюминиевой матрицей: $b = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $F = 4$, $\nu_D = 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $\beta_r = 0.14$, $\xi = 0.5$, $\tau_f = 1 \text{ МПа}$, $\alpha_{\text{dyn}} \approx 0.33$, $k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$, $\omega_s = 0.3$, $U_v^f = 0.73 \text{ эВ}$, $U_{2v}^f = 1.37 \text{ эВ}$, $U_i^f = 3.2 \text{ эВ}$. Объёмная доля упрочняющей фазы задавалась равной $f = 10^{-4} \%$ для материалов с разными масштабными характеристиками упрочняющей фазы. Размеры упрочняющих частиц и расстояния между ними варьировались в физически реализуемых пределах.

Решение уравнений баланса элементов деформационной дефектной среды осуществлялось методом Рунге – Кутты – Мерсона четвертого порядка точности [18] с автоматическим выбором шага интегрирования, позволяющим решать умеренно и сильно жесткие системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Автоматический выбор шага позволяет значительно сократить время вычислений.

Анализ полученных результатов

Решение системы (1) позволяет получить зависимости плотностей всех линейных и точечных дефектов от степени деформации, а также кривые течения $\tau(a)$. Модель позволяет анализировать влияние температуры деформации, размера упрочняющих частиц и расстояния между ними на механические характеристики материала.

Рассмотрены материалы с одинаковой объёмной долей упрочняющих частиц, но с разными сочетаниями масштабных характеристик упрочняющей фазы. Результаты расчётов показывают, что зависимость напряжения течения от деформации является возрастающей (рис. 1). При этом на кривой течения наблюдается излом, который разделяет кривую на две части. Одна характеризует докритическую область плотностей дислокаций, когда в материале присутствуют только сдвигообразующие дислокации и призматические петли, другая – закритическую область, в которой начинается формирование дипольных структур в составе дислокационного ансамбля. При увеличении размера частиц начало стадии с накоплением диполей смещается в область малых значений степеней деформации на кривой течения (рис. 1).

На рис. 2 приведена величина деформации, при которой происходит смена режима деформации в зависимости от размера упрочняющих частиц. Чем больше размер частиц, тем при меньших деформациях начинают формироваться дипольные конфигурации. При этом формирование дислокационных диполей сопровождается заметным усилением упрочняющего эффекта (рис. 1, кривые 1, 2, 3 после излома). Увеличение размера частиц снижает эффект деформационного упрочне-

ния на стадии появления диполей в ансамбле дислокаций, но остаётся выше, чем на стадии накопления призматических петель в докритической области плотностей дислокаций (рис. 1, кривые 1, 2, 3 до излома).

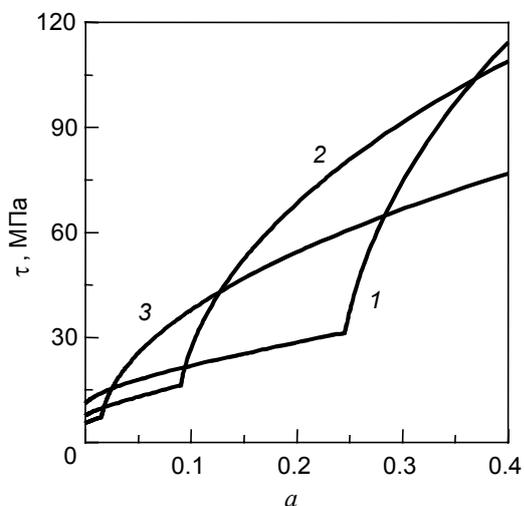


Рис. 1. Кривые течения сплава на основе алюминия. Температура 193 К. Диаметр упрочняющих частиц, нм: кр. 1 – 10, кр. 2 – 20, кр. 3 – 50; расстояние между частицами, нм: кр. 1 – 1000, кр. 2 – 2000, кр. 3 – 5000

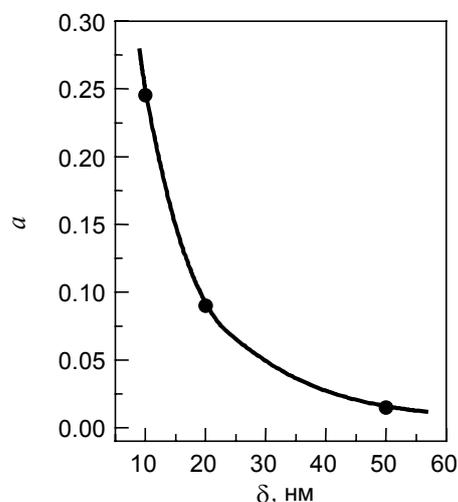


Рис. 2. Начало стадии накопления дислокационных диполей в зависимости от диаметра упрочняющих частиц δ . Температура 193 К

Анализ температурной зависимости напряжения течения при различных степенях деформации выявляет некоторые различия в поведении кривой $\tau(T)$ для различных сочетаний масштабных характеристик упрочняющей фазы при одной объёмной доле частиц (рис. 3).

В целом, прочностные свойства снижаются с ростом температуры (рис. 3). При низких температурах деформации ($T < 293$ К) скорость уменьшения напряжения течения с ростом температуры заметно более высокая, чем для интервала температур $293 \text{ К} < T < 393$ К. При этом масштабные характеристики упрочняющей фазы вносят свои коррективы в форму кривых $\tau(T)$. Например, наблюдается плавное снижение кривых $\tau(T)$ для размеров частиц 10 и 50 нм (рис. 3, а, в), а для размеров частиц 20 нм (рис. 3, б) выявлено некое подобие температурной стадийности.

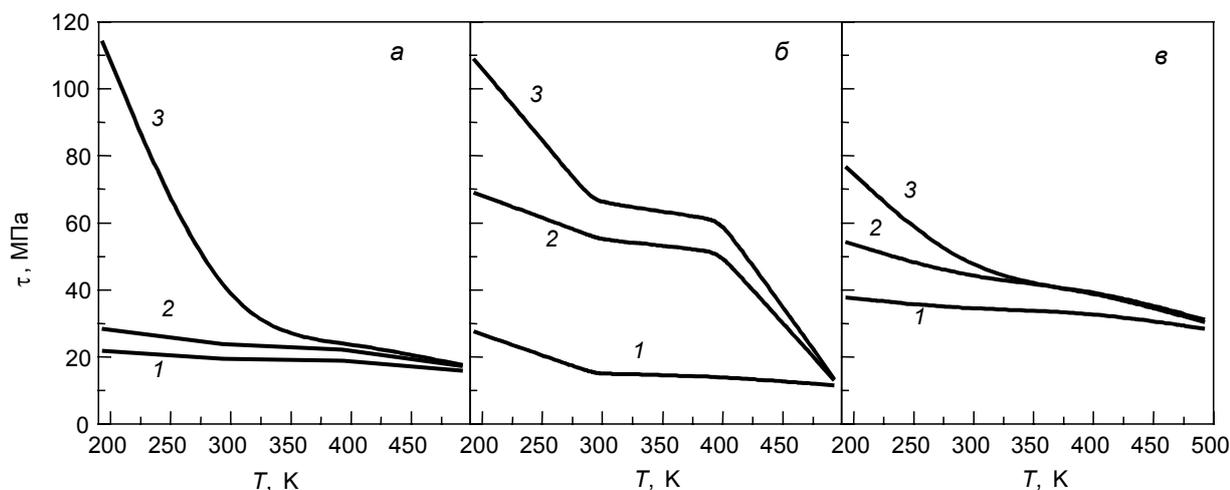


Рис. 3. Температурная зависимость напряжения течения в материале, упрочнённом малой объёмной долей частиц. Масштабные характеристики упрочняющей фазы: а) $\delta = 10$ нм, $\Lambda_p = 1000$ нм; б) $\delta = 20$ нм, $\Lambda_p = 2000$ нм; в) $\delta = 50$ нм, $\Lambda_p = 5000$ нм. Степень деформации: кр. 1 – 0.1; кр. 2 – 0.2; кр. 3 – 0.4

Для дисперсно-упрочнённого сплава с некогерентными частицами размером 20 нм проявляется трёхстадийность (рис. 3, б, кривые 2, 3) на кривой $\tau(T)$, когда в интервале температур $193 \text{ K} < T < 293 \text{ K}$ наблюдается существенное снижение напряжения течения с ростом температуры, в интервале $293 \text{ K} < T < 393 \text{ K}$ величина $\tau(T)$ почти не изменяется, а при дальнейшем увеличении температуры ($T > 393 \text{ K}$) наблюдается резкое падение напряжения течения до величины 12–14 МПа. Существенное возрастание скорости падения напряжения течения при высоких температурах связано с тем, что аннигиляционные процессы в этом интервале температур не позволяют достичь в материале критической плотности дислокаций, при которой начинают формироваться дислокационные дипольные конфигурации. Это влечёт за собой уменьшение плотности дислокаций и напряжения течения.

Численные значения напряжения течения τ , начиная со степеней деформации $a = 0.2$, достигают заметно более высоких величин в материалах с размером частиц 20 нм по сравнению с другими рассматриваемыми материалами (рис. 3, кривые 2, 3). Исключение составляют самые низкие температуры (193 К), здесь значения τ выше в материале с самыми мелкими частицами (рис. 3, а, кривая 3), а также высокие температуры (450–500 К), в этом случае самые большие значения τ достигаются в материале с более крупными частицами $\delta = 50 \text{ нм}$ (рис. 3, в, кривые 2, 3). При небольших степенях деформации (рис. 3, кривая 1) более высокие значения напряжения течения достигаются в материале с более крупными частицами ($\delta = 50 \text{ нм}$) при всех температурах деформации.

На рис. 4 показано изменение напряжения течения и составляющих дислокационной подсистемы алюминиевого сплава с малой объёмной долей некогерентных упрочняющих частиц в процессе деформации при температуре 493 К (рис. 4, кривые 1–3).

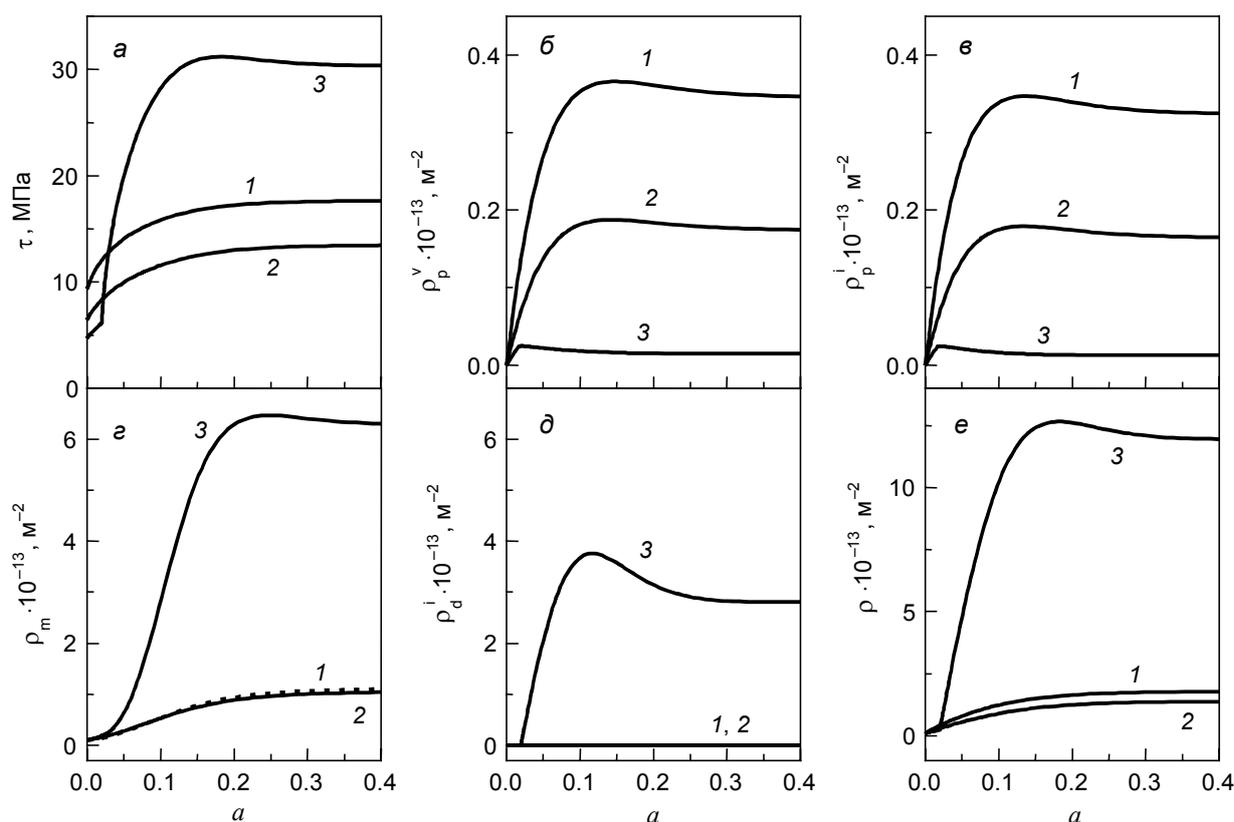


Рис. 4. Кривые течения (а) и зависимости плотностей составляющих дислокационной подсистемы (призматических петель вакансионного (б) и межузельного (в) типа, сдвигообразующих дислокаций (г), дислокаций в дипольных конфигурациях межузельного типа (д)), общей плотности дислокаций (е) от степени деформации при температуре 493 К. Размер упрочняющих частиц, нм: кр. 1 – 10; кр. 2 – 20; кр. 3 – 50. Расстояние между частицами, нм: кр. 1 – 1000; кр. 2 – 2000; кр. 3 – 5000

При малых степенях пластической деформации наблюдается заметное увеличение τ , при больших степенях деформации кривые напряжения течения выходят на горизонтальную асимптоту (рис. 4, а), которая зависит от масштабных характеристик упрочняющей фазы. Для трёх исследованных материалов при $T = 493$ К максимальной прочности достигает сплав с размером упрочняющих частиц $\delta = 50$ нм (рис. 4, а, кривая 3). Это определяется тем, что в составе дислокационной структуры данного материала формируются дипольные конфигурации (рис. 4, д, кривая 3), которые вносят большой вклад в суммарную плотность дислокаций (рис. 4, е, кривая 3). В двух других материалах с размером частиц 10 и 20 нм критическая плотность дислокаций в процессе пластической деформации не достигается, поэтому дислокационные диполи не формируются (рис. 4, д, кривые 1, 2). Дислокационный ансамбль, таким образом, включает в себя только сдвигообразующие дислокации (рис. 4, з, кривые 1, 2) и призматические петли вакансионного (рис. 4, б, кривые 1, 2) и межузельного типа (рис. 4, в, кривые 1, 2).

В докритической области плотностей дислокаций, когда диполи ещё не начали формироваться, наблюдается следующая зависимость: чем мельче частицы, тем выше напряжение течения материала при одной и той же объёмной доле упрочняющей фазы (рис. 4, а).

Плотность матричных сдвигообразующих дислокаций имеет в определённом смысле аномальную зависимость от температуры деформации (рис. 5). Такой немонотонный ход температурной зависимости $\rho_m(T)$ связан с релаксацией дипольных структур и их переходом в разряд сдвигообразующих дислокаций при осаждении на диполях деформационных и термодинамически равновесных точечных дефектов определённого типа (на межузельных диполях – межузельных атомов, на вакансионных диполях – вакансий и бивакансий).

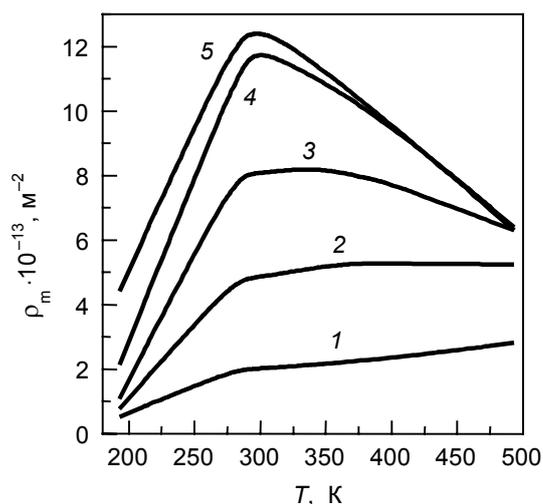


Рис. 5. Температурная зависимость плотности сдвигообразующих дислокаций в материале на основе алюминия, упрочнённом некогерентными частицами размером $\delta = 50$ нм. Расстояние между упрочняющими частицами $\Lambda_p = 5000$ нм. Степень деформации: кр. 1 – 0.1; кр. 2 – 0.15; кр. 3 – 0.2; кр. 4 – 0.3; кр. 5 – 0.4

Тот факт, что плотность матричных дислокаций сопоставима с плотностью дипольных дислокаций, свидетельствует об активации процессов трансформации части дипольных конфигураций в сдвигообразующие матричные дислокации. Это объясняется тем, что высокая температура ($T > 493$ К) способствует активации миграции деформационных и термодинамически равновесных точечных дефектов (вакансий, бивакансий, межузельных атомов), осаждению их на диполях и увеличению плеча диполя вплоть до их трансформации в сдвигообразующие дислокации.

Заключение

Таким образом, в настоящей работе проведено математическое моделирование поведения в процессе пластической деформации прочностных свойств дисперсно-упрочнённого сплава на основе алюминия с наноразмерными некогерентными частицами малой объёмной доли. Показано,

что размер упрочняющих частиц является определяющим параметром для величины напряжения течения лёгких сплавов при разных температурах.

В ходе проведенных исследований обнаружен диапазон размеров частиц (при заданной объёмной доле) и диапазон температур, в которых достигается максимальная прочность материала в процессе пластической деформации. В докритической области плотностей дислокаций наблюдается увеличение напряжения течения при уменьшении размера частиц в материалах с одинаковой объёмной долей упрочняющей фазы. Формирование дислокационных дипольных конфигураций после достижения в материале критической плотности дислокаций влечёт за собой значительное увеличение плотности дислокаций и усиление упрочняющего эффекта.

Обнаружен диапазон температур для материалов с разным сочетанием масштабных характеристик упрочняющей фазы, в котором напряжение течения изменяется слабо (так называемая термическая стабильность).

Для промышленного использования при высоких температурах наиболее перспективными являются дисперсно-упрочнённые алюминиевые сплавы с более крупными наночастицами ($\delta \approx 50$ нм). Прогнозируется сохранение механических свойств этих сплавов при повышении температуры. Расчёт изменения плотности деформационных дефектов соответствует выявленным особенностям пластического поведения дисперсно-упрочнённого материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Пластическая деформация сплавов. – М.: Металлургия, 1984. – 182 с.
2. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. // Изв. вузов. Физика. – 1982. – Т. 25. – № 6. – С. 56–82.
3. Orowan E. // Proc. Symp. on Intern. Stresses in Metals. – 1948. – P. 451–454.
4. Ashby M. F. // Phil. Mag. – 1966. – V. 14. – No. 132. – P. 1157–1178.
5. Эшби М.Ф. // Физика прочности и пластичности. – М.: Металлургия, 1972. – С. 88–108.
6. Ebeling R. and Ashby M. F. // Phil. Mag. – 1966. – V. 13. – No. 124. – P. 805–834.
7. Хирш П.Б., Хэмпфри Ф. Дж. // Физика прочности и пластичности. – М.: Металлургия, 1972. – С. 158–186.
8. Hazzledine P. M. and Hirsch P. B. // Phil. Mag. – 1974. – V. 30. – No. 6. – P. 1331–1351.
9. Humphreys F. J. and Hirsch P. B. // Phil. Mag. – 1978. – V. 34. – P. 373–399.
10. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
11. Stewart A. T. and Martin J. W. // Acta Met. – 1975. – V. 23 – P. 1–7.
12. Humphreys F. J. and Hirsch P. B. // Proc. Roy. Soc. Lond. – 1970. – V. A318. – No. 1532. – P. 73–92.
13. Ковалевская Т.А., Виноградова И.В., Попов Л.Е. Математическое моделирование пластической деформации гетерофазных сплавов. – Томск.: Изд-во Том. ун-та, 1992. – 168 с.
14. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н., Семёнов М.Е. // Журнал функциональных материалов. – 2007. – Т. 1. – № 3. – С. 98–103.
15. Данейко О.И., Кулаева Н.А., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. // Изв. вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 3. – С. 46–51.
16. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. // Деформация и разрушение материалов. – 2006. – № 1. – С. 29–35.
17. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. и др. // Известия РАН. Сер. физич. – 2014. – Т. 78. – № 3. – С. 351.
18. Джонсон К. Численные методы в химии. – М.: Мир, 1983.

¹ Томский государственный архитектурно-строительный университет,
г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 23.03.18.

² Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия

Данейко Ольга Ивановна, к.ф.-м.н., доцент каф. теоретической механики ТГАСУ, ст. науч. сотр. НИ ТГУ, e-mail: olya_dan@mail.ru;

Ковалевская Татьяна Андреевна, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. теоретической механики ТГАСУ, ст. науч. сотр. НИ ТГУ, e-mail: takov47@mail.ru;

Матвиенко Олег Викторович, д.ф.-м.н., профессор каф. теоретической механики ТГАСУ, профессор каф. физической и вычислительной механики НИ ТГУ, e-mail: matvolegv@mail.ru.