

- Scient. School. June 2004, Cheboksary, Russia. P. 313–317.
4. **Zhitnikov, V. P.** Numerical method of calculation of axisymmetrical nonstationary electrochemical problems / V. P. Zhitnikov, O. R. Zinatullina, G. I. Fedorova // Proc. of the 7th Workshop on Computer Science and Information Technologies CSIT'2005. Ufa, Russia, 2005. Vol. 1. P. 135–140.
5. **Лаврентьев, М. А.** Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. М.: Наука, 1973. 736 с.

ОБ АВТОРАХ



Житников Владимир Павлович, проф., зав. каф. компьют. математики. Дипл. инж.-физ. (МФТИ, 1973). Д-р физ.-мат. наук по механ. жидкости, газа и плазмы (Казанск. гос. ун-т, 1993). Иссл. в обл. волновых течений жидкости, электрохим. формообразования, числ.-аналит. методов.



Федорова Галина Ильясовна, доц. той же каф. Дипл. инж.-мат. по прикл. мат. и информатике (УГАТУ, 2000). Канд. физ.-мат. наук по мат. моделир., числ. методам и комплексам программ (УГАТУ, 2004). Иссл. в обл. нестац. электрохим. формообразования.



Зинатуллина Ольга Рифовна, ассист. той же каф. Дипл. инж. по САПР (УГАТУ, 2001). Иссл. в обл. расчета электрохимического формообразования.

УДК 539.3

И. Х. БАДАМШИН

РАСЧЕТ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ БЕЗДЕФЕКТНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

Приведена формула расчета предела текучести для металлических и неметаллических монокристаллов. Формула выведена на основе фундаментальных закономерностей: закона Кулона и закона Гука. Новизна подтверждена патентом. Полученные результаты могут быть применены для расчета предела текучести нитевидных (бездефектных) монокристаллов, а значит и в эвтектических композитных материалах, недеформированных поликристаллах, а также применимы в некоторых направлениях нанотехнологий. *Бездефектный монокристалл; эвтектический композитный материал; предел текучести; нанобъем монокристалла; нанотехнологии*

Решение задачи моделирования прочностных характеристик монокристаллов предполагает проведение теоретических исследований взаимосвязи механики твердого тела и физики твердого тела.

Одним из направлений решения этой задачи является расчетное определение предела текучести — основной характеристики для многих прочностных расчетов.

Расчет предела текучести позволит существенно сократить объем дорогостоящих экспериментов (в некоторых случаях на уникальном оборудовании), что значительно снижает экономические и временные затраты в процессе проектирования элементов машин и оборудования, изготовленных, в частности, из эвтектических композитных материалов с нитевидными монокристаллами в виде армирующей фазы.

Кроме того, одним из направлений развития нанотехнологий является полное трехмерное управление структурой материалов на атомном уровне с целью размещения каждого атома на сво-

ем месте. В этих условиях важно заранее знать прочностные свойства нанобъемов монокристаллов с бездефектной структурой, откуда следует необходимость наличия расчетных формул определения прочностных характеристик, в частности, предела текучести.

В настоящее время наибольшее распространение нашли экспериментальные методы определения предела текучести.

Экспериментальная зависимость изменения напряжения от деформации для нитевидных монокристаллов — «усов» — имеет вид (в частности, для монокристалла Cu), представленный на рис. 1.

Характер кривой (рис. 1) является типичным для бездефектной кристаллической решетки [1, 2]. На кривой «напряжение–деформация» имеется ярко выраженный зуб текучести (стадия I). По достижению максимального напряжения σ_{max} , соответствующего вершине зуба текучести, в кристалле начинается пластическая деформация: зарождаются и размножаются дислокации, образуются линии скольжения (Чернова–

Людерса); увеличивается плотность дислокации, они выходят на поверхность, и, как следствие, напряжение резко падает до значений σ_T . Пики напряжений свидетельствуют о зарождении новых линий скольжения, а минимумы — об их выходе на поверхность. С увеличением степени деформации наступает стадия деформационного упрочнения (III) [2].

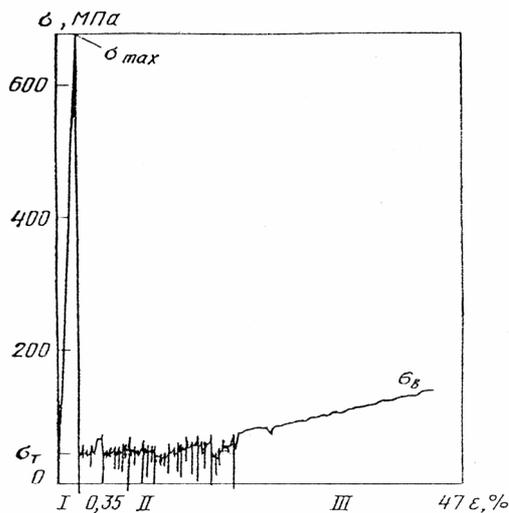


Рис. 1. Диаграмма растяжения нитевидного монокристалла меди [2, 3]

В работе предлагается математическая модель диаграммы «напряжение–деформация» нитевидных монокристаллов, основанная на электростатической природе упругости.

В основу расчета положены следующие допущения.

1. Рассматриваются бездефектные кристаллические решетки металлов, исследованные экспериментально в виде нитевидных кристаллов — «усов», которые деформируются пластически [1].

2. Используется геометрическая часть модели Я. И. Френкеля [2].

3. Максимальное напряжение сдвига (или скалывающее напряжение) определяется одним из известных способов, например, по модели Маккензи [2].

4. Под пределом текучести понимается определение, общепринятое для металлов. Причем для нитевидных монокристаллов принимается среднее значение предела текучести по отклонениям на диаграмме «напряжение–деформация» (рис. 1).

5. Связь между нормальной и тангенциальной проекциями напряжения сдвига бездефектного монокристалла определяется по формуле [2]

$$\sigma_{\max} = \tau_{\max} / (\cos \alpha \cdot \cos \beta), \quad (1)$$

где α — угол между горизонтальной плоскостью и плоскостью сдвига; β — угол между плоскостью сдвига и направлением нормального напряжения.

Теоретическая зависимость изменения напряжения от деформации для нитевидных кристаллов — «усов», предложенная автором, представлена на рис. 2.

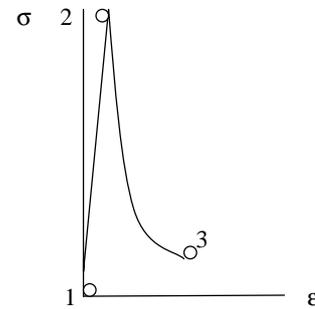


Рис. 2. Теоретическая модель диаграммы растяжения нитевидного монокристалла

В основе сил упругости лежат межатомные взаимодействия электростатической природы [4, 5].

Поэтому участок 2–3 на рис. 2 моделируется с помощью закона Кулона и определяется степенной функцией с целым отрицательным показателем вида $y = c/x^2$, так как

$$F_{\text{кул}} = Q_1 Q_2 / 4\pi \epsilon_0 r^2,$$

где $F_{\text{кул}}$ — кулоновская сила взаимодействия между атомами; Q_1, Q_2 — взаимодействующие заряды, Кл; $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Кл²/нм² — электрическая постоянная; r — расстояние между взаимодействующими зарядами. Но напряжение пропорционально силе, т. е. σ (или τ) $\sim F_{\text{кул}}$, следовательно, в окончательном виде (в соответствии с патентом RU 2235986, автор И. Х. Бадамшин) участок 2–3 на рис. 2 определяется функцией

$$\tau = c / (x/a_0)^2, \quad (2)$$

где a_0 — период кристаллической решетки; x/a_0 — угловая деформация при сдвиге простой кубической решетки.

Из соотношения (1) определяется нормальная проекция напряжения сдвига — предела текучести.

В точке 2 напряжение $\sigma = \sigma_{\max}$ (соответственно тангенциальное напряжение $\tau = \tau_{\max}$) — это так называемый «зуб текучести». В точке 3 напряжение равно пределу текучести $\sigma = \sigma_T$ (соответственно $\tau = \tau_{\text{тек}}$), при котором монокристалл переходит в поликристалл за счет формирования дислокаций.

Таким образом, зная координаты точки 2 (значения τ_{\max} и x/a_0 , например, по Маккензи) и вид функции (2), вычисляют коэффициент c , а затем определяют координаты точки 3, т. е. значение $\tau_{\text{тек}}$ по величине деформации $x = 0,5a_0$, определяемой по Френкелю. В соответствии с моделью Френкеля в точке с координатой $x = 0,5a_0$ теоретическое значение напряжения сдвига равно нулю $\tau = 0$,

Таблица 1

Наименование элемента, плоскость скольжения	Величина $\tau_{\text{тек}}$, МПа		Погрешность, %	Источник
	расчетная	экспериментальная		
Cu (ГЦК) (100)	58,7	18* ... 60	—	[1, 3]
Ag (ГЦК) (100)	36,0	40 (32,3 отожжен.)	10	[1, 6]
Cd (ГП) (0001)	10	5* (9,81)	—	[1, 6]
Fe (ОЦК) (100)	148	(177 технич.) (123 отожжен.)	—	[6]

*В экспериментальных данных не указана кристаллографическая плоскость скольжения, поэтому погрешность не рассчитывалась; в скобках указаны экспериментальные значения для недеформированных, с точки зрения технологии изготовления, поликристаллов (технических и отожженных).

т. е. атомы находятся в неравновесном состоянии, но на практике (рис. 1) [2] пластическое течение происходит при некотором постоянном значении напряжения σ_T (или $\tau_{\text{тек}}$).

Таким образом, участок 2–3 имеет координаты $[0,07a_0; 0,5a_0]$ по оси абсцисс.

Результаты расчета напряжения сдвига в точке 3, т. е. предела текучести $\tau_{\text{тек}}$, приведены в табл. 1.

В соответствии с диаграммой «напряжение–деформация» (рис. 1), начиная с предела текучести, вследствие зарождения дислокаций монокристалл переходит в поликристалл, поэтому значения предела текучести монокристалла и поликристалла одинаковы. Это позволяет сравнивать результаты расчета для монокристаллов с экспериментальными значениями предела текучести поликристаллов. Данное сравнение допустимо, в частности, для недеформированных поликристаллов (технических и отожженных).

Как видно из таблицы, результаты расчета удовлетворительно сходятся с результатами экспериментов.

Таким образом, зная значение максимального напряжения сдвига, можно рассчитать величину предела текучести для монокристаллов как металлов, так и неметаллов, например, карбидов и нитридов. Результаты работы можно использовать в практических расчетах на прочность бездефектных монокристаллов, в частности, для эвтектических композиционных материалов с нитевидными монокристаллами, используемых в рабочих лопатках газовых турбин, а также для недеформированных (с точки зрения технологии изготовле-

ния) поликристаллов и в некоторых направлениях нанотехнологий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Бережкова, Г. В.** Нитевидные кристаллы / Г. В. Бережкова. М.: Наука, 1969. 160 с.
2. **Гольдштейн, М. И.** Металлофизика высокопрочных сплавов: учеб. пособие для вузов / М. И. Гольдштейн, В. С. Литвинов, Б. М. Бронфин. М.: Металлургия, 1986. 312 с.
3. **Светлов, И. Л.** Машина для механических испытаний нитевидных кристаллов (усов) / И. Л. Светлов // Заводская лаборатория. 1964. № 9. С. 1133–1136.
4. **Китель, Ч.** Металлофизика высокопрочных сплавов: учеб. пособие для вузов / Ч. Китель. М.: Наука, 1965. 366 с.
5. **Лахтин, Ю. М.** Материаловедение: учеб. для вузов / Ю. М. Лахтин, В. П. Леонтьев. 3-е изд. М.: Машиностроение, 1990. 528 с.
6. **Свойства элементов:** справочник. Ч. 1. Физические свойства. 2-е изд. М.: Металлургия, 1976. 600 с.

ОБ АВТОРЕ



Бадамшин Ильдар Хайдарович, доц., докторант каф. авиац. двигателей. Иссл. в обл. металлофизики и материаловедения.