

Методика визначення коефіцієнта пружності міжатомного зв'язку на основі експериментальної кривої навантаження

О.О. Мочалов, О.О. Гайша*, К.Д. Євфимко

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова,
пр. Героїв Сталінграду, 9, 54000 Миколаїв, Україна

(Одержано 07.09.2011, у відредагованій формі – 16.05.2012, опубліковано online 04.06.2012)

У статті наводиться методика розрахунку коефіцієнта пружності міжатомного зв'язку та сил міжатомної взаємодії для кристалічної решітки деформованого тіла. Основою для розрахунків є експериментальні криві навантаження, що виконувалися як у квазістатичному режимі, так і в динаміці. Отримана більш складна залежність сил міжатомної взаємодії, ніж та, яку дозволяють описувати потенціали типу Морзе, тому для збільшення точності моделювання механічних властивостей доцільно переходити до потенціалів із більшим числом параметрів (наприклад, сплайновий).

Ключові слова: коефіцієнт пружності, міжатомний потенціал, сили міжатомної взаємодії, закон Гука, коефіцієнт Пуассона.

PACS numbers: 61.50.Ah, 62.20.Dq

1. ВСТУП

У попередніх дослідженнях [1-3] розглянуто моделювання механічних властивостей речовини на основі двохчасткових міжатомних потенціалів взаємодії. Відповідні потенціали можуть задаватися як шляхом визначення енергії міжатомної взаємодії, так і її сили. Також можливе використання коефіцієнтів пружності міжатомної взаємодії та її похідних більш високих порядків, ніж 2. У даній роботі розглянемо використання коефіцієнтів пружності міжатомного зв'язку для визначення потенціалу взаємодії, та методику розрахунку цих коефіцієнтів на основі експериментальних даних.

2. ОПИС ОБ'ЄКТУ ТА МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

Взаємозв'язок між потенціалом (енергією) міжатомної взаємодії та силою цієї взаємодії є наступним:

$$F(r) = -\frac{dW(r)}{dr} \quad (1)$$

$$W(r) = -\int F(r)dr \quad (2)$$

Для визначення постійної інтегрування в (2) можна використати часто вживане положення, що $W(\infty) = 0$. Можна виконувати інтегрування у визначених межах:

$$W(r) = -\int_r^{\infty} F(r)dr = \int_{\infty}^r F(r)dr \quad (2a)$$

Ще один можливий спосіб задати потенціал полягає у визначенні коефіцієнта жорсткості міжатомного зв'язку $k(r)$. У межах закону Гука немає різниці як задавати такий коефіцієнт:

$$k_{\text{Гука}}(r) = -\frac{F(r)}{r} = -\frac{dF(r)}{dr} \quad (3)$$

Однак, міжатомний потенціал є суттєво нелінійною функцією, тому виникає необхідність у розрізненні двох коефіцієнтів пружності – статичного та динамічного:

$$k_c(r) = -\frac{F(r)}{r} \quad (4)$$

$$k_o(r) = -\frac{dF(r)}{dr} \quad (5)$$

Визначення сили міжатомної взаємодії $F(r)$ при відомому статичному коефіцієнті пружності (4) очевидне, а при відомому динамічному коефіцієнті пружності (5) аналогічне до (2) чи (2a). Також коефіцієнт пружності може використовуватися у інших співвідношеннях, відмінних від (4) та (5), зокрема, енергетичних. Тому визначення коефіцієнтів $k_c(r)$ та $k_o(r)$, в цілому, є необхідним для моделювання властивостей речовини на основі заданих міжатомних потенціалів. Зв'язок між коефіцієнтами матиме вид:

$$k_o(r) = \frac{dk_c(r)}{dr}r + k_c(r) \quad (6)$$

$$k_c(r) = \frac{1}{r} \int k_o(r)dr \quad (7)$$

Для визначення даних коефіцієнтів скористаємося експериментальними даними, а саме кривою $\sigma(\delta)$ залежності механічного напруження σ від подовжньої деформації δ та кривою $S(\delta)$ зміни площі поперечного перерізу елементарної комірки кристалічної решітки від деформації. У якості $S(\delta)$ можна, зокрема, задавати просту аналітичну залежність на основі коефіцієнту Пуассона μ :

$$S(\delta) = S_0(1 - \mu\delta)^2, \quad (8)$$

* physics2005@mail.ru

де S_0 – площа поперечного перерізу у недеформованому стані.

В цілому, вид функцій $\sigma(\delta)$ та $S(\delta)$ може бути довільним, що відповідає реальному експерименту.

Якщо дві цих залежності є відомими з експерименту, то сила $f(\delta)$, що діє на елементарну комірку решітки відома за означенням механічного напруження:

$$f(\delta) = \sigma(\delta) \cdot S(\delta). \quad (9)$$

З іншого боку ця ж сила $f(\delta)$ функціонально залежить від сили міжатомної взаємодії $F(r)$, яка в свою чергу виражається через (4) чи (5). Залежність між функцією сили міжатомної взаємодії та функцією сили, що діє на елементарну комірку, запишемо через масштабний коефіцієнт $\alpha(r)$ осьової деформації, який визначається для кожного конкретного деформованого стану і в загальному випадку є нелінійною функцією (через нелінійність самого потенціалу $W(r)$):

$$f(\delta) = \alpha(r)F(r). \quad (10)$$

Прирівнюючи (9) та (10), з урахуванням (4) та (5) отримаємо співвідношення, з яких можемо знайти експериментальні значення коефіцієнтів жорсткості міжатомних зв'язків:

$$\alpha(r)k_c(r) \cdot r = \sigma(\delta) \cdot S(\delta) \quad (11)$$

$$\alpha(r) \int k_\sigma(r) dr = \sigma(\delta) \cdot S(\delta) \quad (12)$$

Для оціночних розрахунків у першому наближенні масштабний коефіцієнт приймемо постійною величиною, відповідно до методу структурних одиниць [4].

3. ОПИС ТА АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Перейдемо до розрахунків, із (11) визначаємо $k_c(r)$. Конкретну залежність, зображену на графіку – рис.1 – отримано для заліза при його стиску за даними [5].

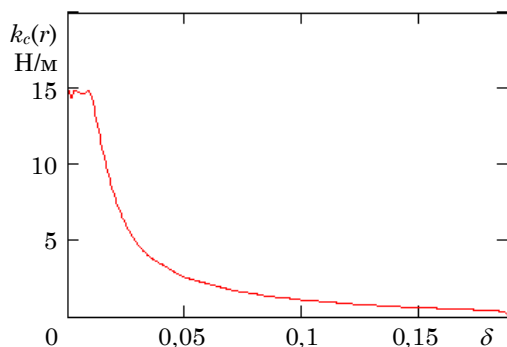


Рис. 1 – Залежність статичного коефіцієнту пружності міжатомного зв'язку від деформації при стискуванні

В результаті розрахунку за (15) отримали залежність $k_c(r)$, зображену на рис. 2 (аналогічна рис. 1). Для урахування динаміки деформації, можемо виразити $\sigma(\delta)$ із (11) та продиференціювати отриманий вираз по r :

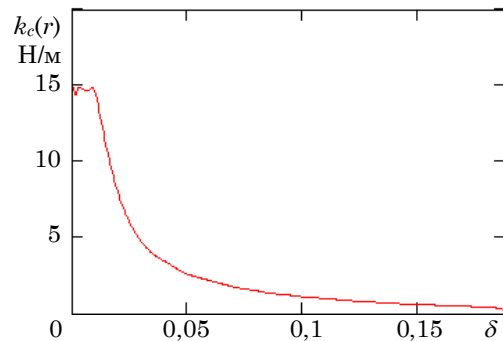


Рис. 2 – Залежність статичного коефіцієнту пружності міжатомного зв'язку від деформації при стискуванні

$$\frac{d\sigma(\delta)}{dr} = \frac{\left(\frac{dk_c(r)}{dr} r + k_c(r)\right) S(\delta) - k_c(r) r \frac{dS(\delta)}{dr}}{S(\delta)^2} \quad (13)$$

Для визначення $k_c(r)$ запишемо (13) у вигляді диференціального рівняння зі змінними коефіцієнтами:

$$\frac{dk_c(r)}{dr} + \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{S(\delta)} \frac{dS(\delta)}{dr}\right) k_c(r) = \frac{S(\delta)}{r} \frac{d\sigma(\delta)}{dr} \quad (14)$$

Запишемо (14) у компактній формі:

$$\frac{dk_c(r)}{dr} + A_i k_c(r) = B_i,$$

$$\text{де } A_i = \frac{1}{r} - \frac{1}{S(\delta)} \frac{dS(\delta)}{dr}; \quad B_i = \frac{S(\delta)}{r} \frac{d\sigma(\delta)}{dr}.$$

Розв'язувати рівняння будемо покроково, вважаючи на кожному кроці значення коефіцієнтів A і B сталими, та перераховуючи їх в кінці кроку відповідно до нових значень r , S , σ . Відповідно, на i -тому кроці рішення матиме простий вид:

$$k_i = k_{i-1} + \frac{B_i - k_{i-1} \cdot A_i}{A_i} \left(1 - e^{-A_i \Delta r}\right). \quad (15)$$

При розтягуванні і розрахунку аналогічними методами отримали наступну залежність для коефіцієнту $k_c(r)$ – рис. 3.

Обидві залежності зручно зобразити на одному графіку – рис 4.

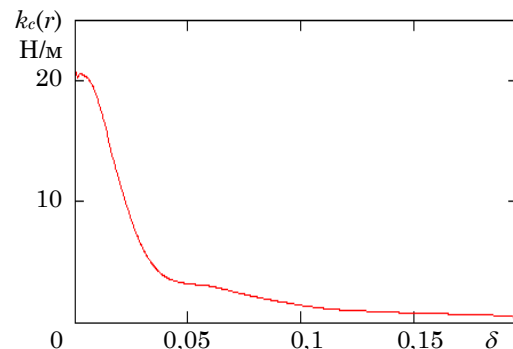


Рис. 3 – Залежність статичного коефіцієнту пружності міжатомного зв'язку від деформації при розтягуванні

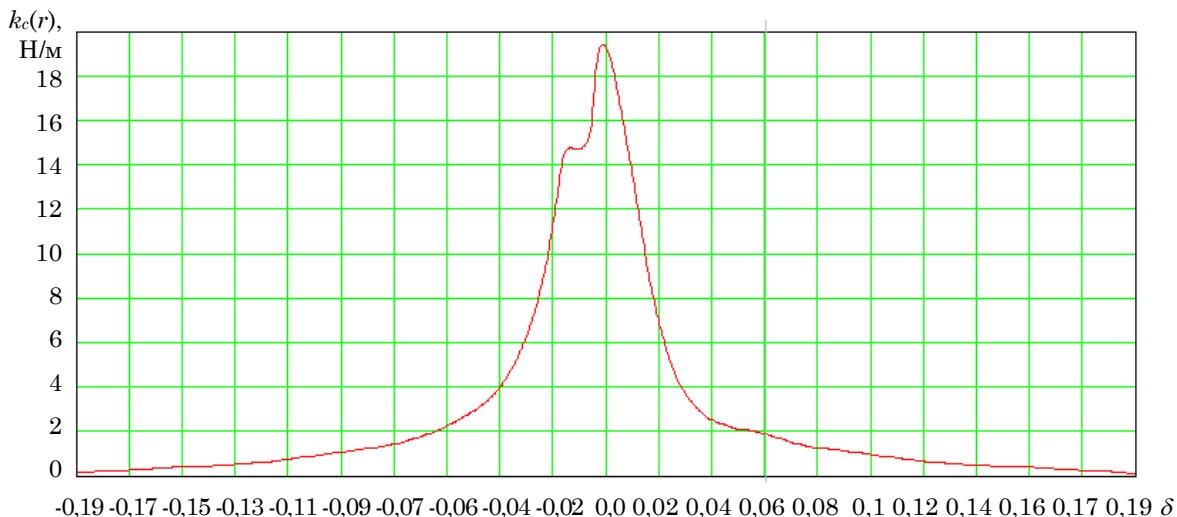


Рис. 4 – Залежність статичного коефіцієнту пружності міжатомного зв'язку від деформації при стискуванні (від'ємні деформації) та розтягуванні (додатні)

Динамічний коефіцієнт визначимо за (6). Вид залежності $k_d(r)$ зображено на рис. 5.

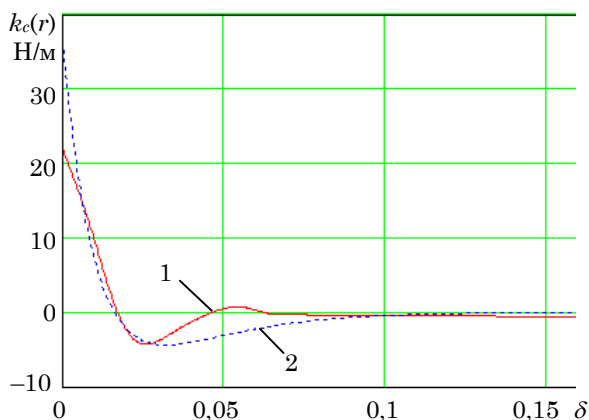


Рис. 5 – Динамічний коефіцієнт жорсткості міжатомного зв'язку: 1 – за результатами експерименту, 2 – теоретичний, на основі потенціалу міжатомної взаємодії

Із аналізу рис. 5 випливає, що основні характеристики потенціалу (рівноважна відстань та енергія дисоціації) в цілому співпадають, але форма реального потенціалу є складнішою. Таким чином, для більш точного моделювання властивостей речовини необхідно користуватися потенціалом із більшою кількістю параметрів, ніж потенціал Морзе, на основі якого виконано моделювання. Завдання додаткових параметрів дозволить більш гнучко підігнати потенціал під експериментальні дані, і, отже, більш адекватно описувати механічні властивості речовини.

Інтерес представляє сила, розрахована за формулою, оберненою до (5). Після виконання чисельного інтегрування (15) отримано наступний вид залежності сили міжатомної взаємодії – рис. 6.

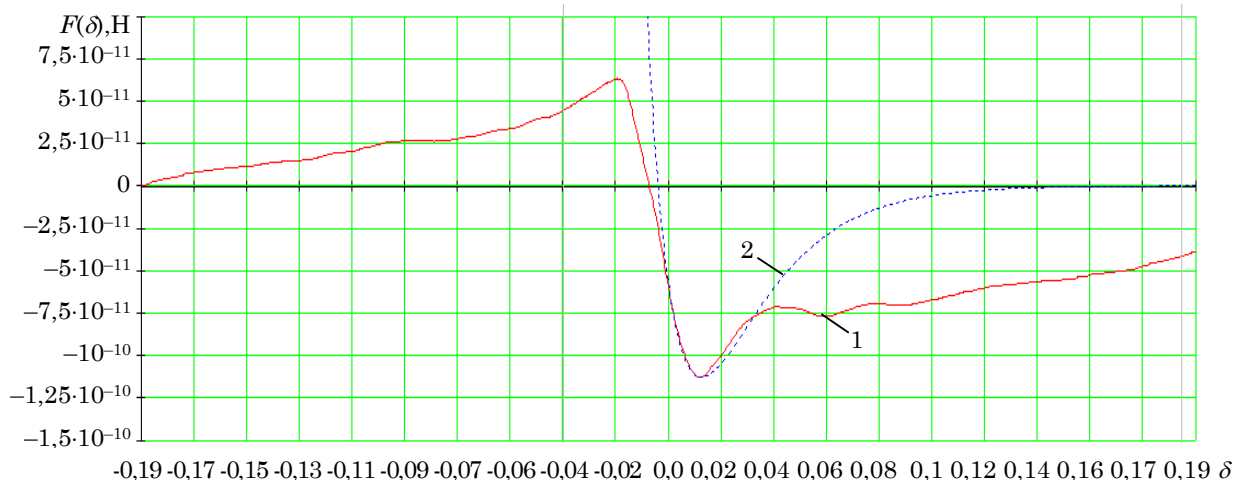


Рис. 6 – Сила міжатомної взаємодії: 1 – розрахунки на основі експериментальних даних, 2 – на основі потенціалу міжатомної взаємодії

На рисунку добре видно, що в області порівняно невеликих деформацій (до досягнення межі текучості, але виходячи за межу пропорційності) отримана з експерименту залежність задовільно співпадає з теоретичним потенціалом. Характер сил за межею текучості не може значним чином впливати на вибір форми потенціалу, так як при пластичних деформаціях та руйнуванні структура решітки не залишається стабільною і розглянута модель у такому вигляді не може застосовуватися (необхідне її коригування).

4. ВИСНОВОК

Розглянута методика дозволяє виконувати розрахунок коефіцієнту жорсткості міжатомного зв'язку і, відповідно, коригування потенціалу міжатомної взаємодії в області деформацій до початку текучості на основі експериментальних даних по діаграмі механічного навантаження (для монокристалічних тіл). В подальшому планується уточнення залежності масштабного коефіцієнту у (10) від деформації на основі розгляду деформованого стану елементарної комірки, відповідно до методу структурних одиниць.

Методика определения коэффициента упругости межатомной связи на основе экспериментальной кривой нагружения

А.А. Мочалов, А.А. Гайша, К.Д. Евфимко

Национальный университет кораблестроения имени адмирала Макарова, пр. Героев Сталинграда, 9, 54000, Николаев, Украина

В статье приводится методика расчета коэффициента упругости межатомной связи и сил межатомного взаимодействия для кристаллической решетки деформированного тела. Основой для расчетов являются экспериментальные кривые нагружения, которые выполнялись как в квазистатическом режиме, так и в динамике. Получена более сложная зависимость сил межатомного взаимодействия, чем та, которую могут описывать потенциалы типа Морзе. Таким образом, для увеличения точности моделирования механических свойств целесообразно переходить к потенциалам с большим числом параметров (например, сплайновый).

Ключевые слова: коэффициент упругости, межатомный потенциал, силы межатомного взаимодействия, закон Гука, коэффициент Пуассона.

Technique for the Determination of the Elastic Stiffness Coefficient of Interatomic Connection Based on the Experimental Weight-Loading Curve

A.A. Mochalov, A.A. Gaisha, K.D. Evfimko

¹ National University of Shipbuilding named after admiral Makarov, 9, Geroev Stalingrada Av., 54000 Mykolaiv, Ukraine

Calculation technique of the elastic stiffness coefficient of interatomic binding and interatomic forces for the crystal lattice of the deformed body is presented. The base of the investigation is the experimental weight-loading curves made both in the quasi-static regime and in dynamics. Dependence of the interatomic forces was found to be more complex than that, which can be described by the potentials like Morse. Thus, to increase the modeling accuracy of mechanical characteristics it is reasonable to turn to the potentials with larger number of parameters (for example, spline potentials).

Keywords: Elastic stiffness coefficient, Interatomic potential, Interatomic forces, Hook law, Poisson ratio.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. S. Erkos, *Physics Reports*. **278**, 79 (1977).
2. А.М. Кривцов, Н.В. Кривцова, *Дальневосточный математический журнал ДВО РАН* **3** №2, 254 (2002).
3. А.А. Мочалов, К.Д. Евфимко, П.А. Степанов, *Матер. Міжнар. наук.-техн. конф. «Материалы и механизмы морского транспорта. Методы исследования и укрепления. Технология производства»*, 48 (Севастополь, 2008).
4. А.А. Мочалов, А.А. Гайша, К.Д. Евфимко, *Ж. нано- і електрон. фіз.* **1** №1, 70 (2009) (A.A. Mochalov, A.A. Gaisha, K.D. Evfimko, *J. Nano-Electron. Phys.* **1** No1, 62 (2009)).
5. А.М. Брагов, А.К. Ломунов, И.В. Сергеевичев, А.В. Петровцев, *Труды VI Заблбахинских научных чтений* (2001).