

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана

(национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н. Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ _	Фундаментальные науки
КАФЕДРА	Прикладная математика

ДОМАШНЯЯ РАБОТА ПО КУРСУ

«Математические модели прикладной механики» НА ТЕМУ:

Упругие характеристики поликристаллических металлов

Вариант 15

Si + Mg

Студент	ФН2-71Б	В.Г. Пиневич		
	(Группа)	(Подпись, дата)	(И.О. Фамилия)	
Руководитель курсовой работы			Е.А. Максимова	
•	V 1	(Подпись, дата)	(И. О. Фамилия)	

Оглавление 2

Оглавление

Сг	іисо	к условных обозначений	3	
1.	Пос	становка задачи	4	
Вь	ычис	ление элементов матриц коэффициентов упругости и коэффи-		
	циентов податливости			
	1.1.	Матрицы податливости и упругости для кубической кристаллической решетки	5	
	1.2.	Матрицы податливости и упругости для гексагональной кристалличе-		
		ской решеткой	5	
2.	Ли	нейная податливость	6	
	2.1.	Линейная податливость для металлов с кубической кристаллической решеткой	6	
	2.2.	Линейная податливость для металлов с гексагональной кристаллической решеткой	8	
3.	Дес	рормирование шара из металла с ГПУ кристаллической решет-		
	кой	при всестороннем давлении	9	
4.	Оце	енки коэффициента Пуассона	9	
	4.1.	Оценки по Фойгту и по Рейссу	9	
	4.2.	Задача Эшелби	11	
5.	Pac	четы для пористого двухфазного сплава-смеси	12	
6.	Зак	лючение	12	
Сі	іисої	к использованных источников	15	

Список условных обозначений

С — матрица коэффициентов упругости

 C_{ij} — элементы матрицы C $(i, j = \overline{1,6})$

S — матрица коэффициентов податливости

 S_{ij} — элементы матрицы $S(i,j=\overline{1,6})$

 S_n — линейная податливость в направлении \boldsymbol{n}

 $e^{(m{n})}$ — относительное удлинение в направлении $m{n}$

 σ_{kl} — компоненты тензора напряжений $\hat{\sigma}$ $(k, l = \overline{1,3})$

 S_{ijkl} — компоненты тензора податливости \hat{S} $(i,j,k,l=\overline{1,3})$

 ε_{kl} — компоненты тензора малой деформации $\hat{\varepsilon}$ $(k, l = \overline{1,3})$

р — давление

 δ_{ij} — символ Кронекера

 V_0 — контрольный объем

 I_{ijkl} — единичный тензор 4-го ранга $(i,j,k,l=\overline{1,3})$

ν — коэффициент Пуассона

 C_{ijkl} — компоненты тензора коэффициентов упругости \hat{C} $(i,j,k,l=\overline{1,3})$

 C^o_{ijkl} — эффективные упругие характеристики поликристалла $(i,j,k,l=\overline{1,3})$

 S_{ijkl}^o — эффективные характеристики податливости поликристалла $(i,j,k,l=\overline{1,3})$

 ω_{ijkl} — тензор Эшелби $(i,j,k,l=\overline{1,3})$

E — модуль Юнга, $\Gamma \Pi$ а

 μ — модуль сдвига, $\Gamma \Pi a$

 κ — модуль объемной упругости, $\Gamma\Pi a$

1. Постановка задачи

Для заданной пары чистых металлов по значениям коэффициентов упругости (или податливости) кристаллов вычислить элементы матрицы коэффициентов податливости (или упругости), сравнив точность обращения матриц с вычислением по формулам, и построить графики зависимостей линейной податливости от направления единичного вектора для гексагональной кристаллической решетки в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла, а для кубической кристаллической решетки в плоскости грани и в плоскостях, имеющие общую точку диагонали двух граней, диагонали грани и куба, диагональ куба и ребро. Для кристаллической решетки каждого из металлов определить направления, по которым линейная податливость имеет экстремальные значения. Найти отношение полуосей эллипсоида вращения, образующегося после действия всестороннего давления на шар из металла с ГПУ кристаллической решеткой.

Для каждого из металлов в предположении хаотической ориентации зерен в поликристалле найти верхнюю и нижнюю оценки модулей сдвига, продольной и объемной упругости, оценки коэффициента Пуассона и сравнить полученные значения с вычисленными для случая статистически усредненной шаровой формы кристаллических зерен. Провести аналогичные расчеты и построить графики для пористого двухфазного сплава-смеси заданной пары металлов при трех фиксированных значениях объемной пористости, равных 0; 0.1 и 0.2, в зависимости от отношения $\frac{V_1}{(V_1 + V_2)} \in [0; 1]$, где V_1 и V_2 — объемные доли металлов в сплаве.

Таблица 1. Коэффициенты упругости и податливости

Si	C_{11}	C_{12}	C_{44}	
ГПа	167	61	76	

Mg	S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{33}	S_{44}
$T\Pi a^{-1}$	23.9	-9.48	-5.36	20.9	70.4

Вычисление элементов матриц коэффициентов упругости и коэффициентов податливости

Соотношение для связи коэффициентов упругости и коэффициентов податливости

$$C_{ijmn}S_{mnkl} = I_{ijkl}.$$

В матричной форме записи тензоров 4 ранга \hat{C},\hat{S} это выражение будет иметь вид

$$\hat{C}\hat{S} = I \tag{1}$$

1.1. Матрицы податливости и упругости для кубической кристаллической решетки

В кристаллах с кубической решеткой все оси Ox_k равноправны и матрица S коэффициентов податливости содержит лишь три отличных от нуля независимых элемента

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix}.$$

Матрица коэффициентов упругости C имеет аналогичный вид. Найдем коэффициенты податливости используя формулы из источника [1] и проведя расчеты в с помощью Wolfram Mathematica.

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_K}, S_{12} = -\frac{C_{12}}{C_K}, S_{44} = \frac{1}{C_{44}},$$

где
$$C_K = C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2$$
.

Теперь определим коэффициенты податливости при помощи матрицы C из (1). Получаем

$$S_{11} = 7.44 \text{ T}\Pi \text{a}^{-1}, S_{12} = 1.99 \text{ T}\Pi \text{a}^{-1}, S_{33} = 1.32 \text{ T}\Pi \text{a}^{-1}.$$

1.2. Матрицы податливости и упругости для гексагональной кристаллической решеткой

Кристаллы с ГПУ-решеткой обладают высокой степенью симметрии относительно кристаллографической оси Ox_3 . Поэтому их упругие свойства в плоскости, перпен-

дикулярной этой оси, изотропны, а матрица S коэффициентов податливости включает пять независимых ненулевых элементов:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{13} & S_{13} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{66} \end{pmatrix}.$$

Коэффициент $S_{66} = \frac{S_{11} - S_{12}}{2}$.

Действуя аналогично с прошлым пунктом найдем коэффициенты упругости используя формулы из источника [1].

$$C_{11} = \frac{S_{33}}{2S_h} + \frac{1}{2(S_{11} - S_{12})}, C_{12} = \frac{S_{33}}{2S_h} + \frac{1}{2(S_{11} - S_{12})}, C_{13} = -\frac{S_{33}}{2S_h},$$

$$C_{33} = \frac{S_{11} + S_{12}}{2S}, C_{44} = \frac{1}{S_{44}}, C_{66} = \frac{1}{2(S_{11} - S_{12})}$$

где $S_h = (S_{11} + S_{12}) S_{33} - 2S_{12}^2$.

Теперь определим коэффициенты податливости при помощи матрицы S из (1). Получаем

$$C_{11}=57.82~\Gamma\Pi{\rm a}, C_{12}=27.86~\Gamma\Pi{\rm a}, C_{13}=21.97~\Gamma\Pi{\rm a},$$
 $C_{33}=59.12~\Gamma\Pi{\rm a}, C_{44}=14.20~\Gamma\Pi{\rm a}, C_{66}=14.98~\Gamma\Pi{\rm a}.$

2. Линейная податливость

Пусть на кристалл действует внешнее растягивающее напряжение $\sigma_{kl} = \sigma n_k n_l$ в направлении $\boldsymbol{n} = \{n_1, n_2, n_3\}$. Тогда линейная податливость в направлении действия напряжения имеем вид

$$S_N = \frac{e^{(n)}}{\sigma} = S_{ijkl} N_i n_j n_k n_l,$$

где $e^{(n)}$ — относительное удлинение материла в направлении $m{n}$.

2.1. Линейная податливость для металлов с кубической кристаллической решеткой

Линейная податливость для металлов с кубической кристаллической решеткой равна

$$S_N = S_{11} - (2(S_{11} - S_{12}) - S_{44})(n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2).$$
 (2)

Получим зависимость линейной податливости S_n от направления единичного вектора, лежащего в плоскости грани куба. Рассмотрим грань куба, лежащую в плоскости Ox_1x_2 , на которой $n_3 = 0$ (для других граней куба аналогично). Учитывая равенство

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$$

получаем $n_2^2 = 1 - n_1^2$. Тогда соотношение (2) будет выглядеть следующим образом

$$S_n = S_{11} - (2(S_{11} - S_{12}) - S_{44}) n_1^2 (1 - n_1^2).$$

График функции S_n в плоскости грани куба в зависимости от n_2 изображен на рис. 1. В плоскости грани куба линейная податливость минимальна в направлении диагонали грани (точка с абсциссой $n_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}$ отмечена красным на графике), и максимальна в направлениях параллельных граням.

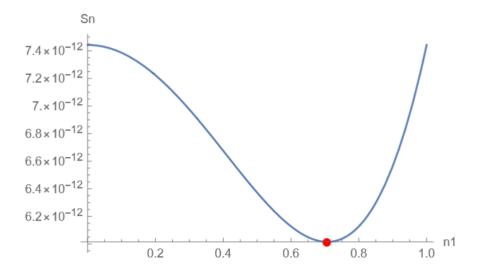


Рис. 1. Линейная податливость в плоскости грани куба

Теперь найдем зависимость линейной податливости S_n от направления единичного вектора, лежащего в плоскостях, содержащих диагонали грани и куба. Пусть диагональ грани лежит в плоскости Ox_1x_2 ($x_1=x_2$). Тогда получаем равенства $n_3^2=1-n_1^2-n_2^2$, $n_1=n_2$. Тогда соотношение (2) имеет вид

$$S_n = S_{11} - (2(S_{11} - S_{12}) - S_{44}) n_1^2 (2 - 3n_1^2)$$

График функции S_n в плоскостях, содержащих диагонали грани и куба в зависимости от n_1 представлен на рис. 2. Линейная податливость минимальна в направлении диагонали куба (точка с абсциссой $n_1 = 1\sqrt{3}$ отмечена красным на графике), и максимальна в направлении, параллельном грани куба.

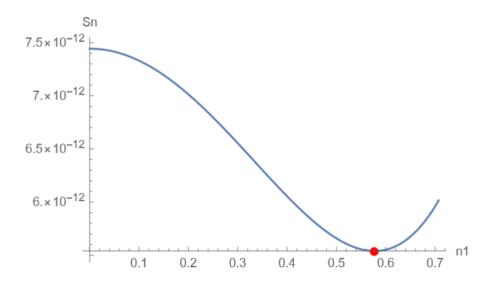


Рис. 2. Линейная податливость в плоскостях, содержащих диагонали грани и куба

Вычислим направления максимальной податливости и минимальной линейной податливости. Воспользуемся функциями Maximize и Minimize Wolfram Matematica для этого. В результате расчетов получим, что максимальное значение функции $S_N(n_1,n_2,n_3)$ в направлении вектора $\boldsymbol{n}=\{1,0,0\}$, т.е. в направлении грани куба, а минимальное значение функции при координатах вектора \boldsymbol{n} равных $n_1=n_2=n_3=\frac{\sqrt{3}}{3}$, что соответствует направлению диагонали куба.

2.2. Линейная податливость для металлов с гексагональной кристаллической решеткой

Линейная податливость кристалла с ГПУ-решеткой зависит лишь от угла между направлением действия силы и осью Ox_3 :

$$S_n = S_{11} \left(1 - n_3^2 \right)^2 + S_{33} n_3^4 + \left(2S_{13} + S_{44} \right) \left(1 - n_3^2 \right) n_3^2 \tag{3}$$

График зависимости линейной податливости от направления единичного вектора в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла, представлен на рис. 3. линейная податливость минимальна в направлении оптической оси и максимальна при $n \approx 0.63$ (точка отмечена на графике красным).

3. Деформирование шара из металла с ГПУ кристаллической решеткой при всестороннем давлении

Рассмотрим задачу действия всестороннего давления на шар из магния. Найдем отношение полуосей эллипсоида вращения, образующегося после данного воздействия. Из условия всестороннего давления p имеем $\sigma_{kl} = -p\beta_{kl}$. Деформация в направлении вектора имеет вид $e^{(n)} = \varepsilon_{ij} n_i n_j$. Учитывая выражение $\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}$, для металла с гексагональной решеткой имеем

$$e^{(\mathbf{n})} = S_{klmn} \sigma_{mn} n_K n_l = -p S_{klmn} \beta_{mn} n_k n_l = -p S_{klmm} n_k n_l = -p S_{kkmm} n_p n_p;$$

$$e^{(\mathbf{n})} = -p \left(\left(S_{11} + S_{12} + S_{13} \right) n_1^2 + \left(S_{11} + S_{12} + S_{13} \right) n_2^2 + \left(S_{13} + S_{33} + S_{13} \right) n_3^2 \right);$$

$$e^{(\mathbf{n})} = -p \left(\left(S_{11} + S_{12} + S_{13} \right) + \left(S_{33} + S_{13} - S_{11} - S_{12} \right) \right)$$

Изменение полуоси в направлении вектора n_3 имеет вид

$$a = -p((S_{11} + S_{12} + S_{13}) + (S_{33} + S_{13} - S_{11} - S_{12})),$$

а в направлении, перпендикулярном n_3 :

$$b = -p \left(S_{11} + S_{12} + S_{13} \right).$$

Следовательно, отношение полуосей эллипсоида вращения равняется

$$\frac{a}{b} \approx 1.12$$

4. Оценки коэффициента Пуассона

Значения коэффициента Пуассона будем находить из соотношения

$$v = \frac{\kappa/2 - G/3}{\kappa + G/3} \tag{4}$$

4.1. Оценки по Фойгту и по Рейссу

Для нахождения верхних оценок для модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия (по Фойгту) будем считать, что в поликристаллическом материале деформация одинакова во всех зернах ($\bar{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij}^{\circ} = const$). Такие распределения перемещений являются допустимыми для минимизируемого функционала Лагранжа. Этот функционал в данном случае принимает вид

$$J[\varepsilon_{ij}] = \frac{1}{2} \int_{V_0} C_{ijmn(M} \varepsilon_{mn}(M) \varepsilon_{ij}(M) dV.$$

Действительным распределениям перемещений в представительном объеме V_0 соответствует истинное распределение $\varepsilon_{ij}^*(M)$ компонент тензора деформации, на котором функционал $J[\varepsilon_{ij}]$ принимает минимальное значение. Задача минимизации $J[\varepsilon_{ij}]$ приводит к решению системы неравенств

$$\begin{cases} C_{kkmm} - C_{kkmm}^{\circ} \le 0, \\ C_{klkl} - C_{klkl}^{\circ} \le 0 \end{cases}$$

откуда получаем верхние оценки для модуля сдвига G^+ и модуля всестороннего сжатия κ^+ . На истинном распределении напряжений в представительном объеме V_0 функционал

Для нахождения нижних оценок для модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия (по Рейссу) будем считать, что в поликристаллическом материале напряжения одинаковы во всех зернах ($S_{ij} = S_{is}^{\circ} = const$). Такое распределения напряжений являются допустимыми для максимизируемого функционала Кастилиано. Этот функционал в данном случае принимает вид

$$I[\sigma ij] = -\frac{1}{2} \int_{V_0} S_{ijmn}(M) \sigma_{mn}(M) \sigma_{ij}(M) dV$$

На истинном распределении напряжений в представительном объеме V_0 функционал $I[\sigma ij]$ принимает максимальное значение. Задача максимизации $I[\sigma ij]$ приводит к решению системы неравенств

$$\begin{cases} S_{kkmm} - S_{kkmm}^{\circ} \le 0, \\ S_{klkl} - S_{klkl}^{\circ} \le 0 \end{cases}$$

откуда получаем нижние оценки для модуля сдвига G^- и модуля всестороннего сжатия κ^- .

Таким образом, оценки модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия для кубической кристаллической решетки имеют вид

$$G^{-} = \frac{5}{4S_{11} + 3S_{44} - 4S_{12}}, G^{+} = \frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{5}, \kappa^{-} = \frac{1}{3(S_{11} + 2S_{12})} = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} = \kappa^{+}$$

Тогда оценки для коэффициента Пуассона для кубической кристаллической решетки имеют вид

$$v_{-} = \frac{\kappa^{+}/2 - G^{+}/3}{\kappa^{+} + G^{+}/3} = 0.2184, v_{+} = \frac{\kappa^{-}/2 - G^{+}/3}{\kappa^{-} + G^{-}/3} = 0.2184$$

Оценки модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия для ГПУ-решетки:

$$G^{-} = \frac{15}{2(7S_{11} + 2S_{33} - 5S_{12} + 3S_{44} - 4S_{13})},$$

$$G^{+} = \frac{7C_{11} + 12C_{44} - 5C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}}{30},$$

$$\kappa^{-} = \frac{1}{2S_{11} + S_{33} + 2S_{12} + 4S_{13}},$$

$$\kappa^{+} = \frac{2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{13}}{9},$$

Тогда оценки для коэффициента Пуассона для ГПУ-решетки имеют вид

$$v_{-} = \frac{\kappa^{+}/2 - G^{+}/3}{\kappa^{+} + G^{+}/3} = 0.3084, v_{+} = \frac{\kappa^{-}/2 - G^{+}/3}{\kappa^{-} + G^{-}/3} = 0.3104, v^{-} \le v \le v^{+}.$$

4.2. Задача Эшелби

Для оценки характеристик поликристаллического материала можно использовать решение задачи Эшелби о взаимодействии с изотропной линейно-упругой сплошной средой изотропного линейно-упругого шарового включения. Необходимо решить систему

$$\Big\{\zeta_{kkmm} = 0, \zeta_{klkl} = 0,$$

где

$$\zeta_{pqrs} = \left(C_{ijpq} - C_{ijmn}^{\circ} \left(I_{mnpq} - \omega_{mnpq}\right)\right)^{-1} \left(C_{ijrs}^{\circ} - C_{ijrs}\right),$$

$$\omega_{ijmn} = \frac{3}{2} \frac{1 - v}{4 - 5v} \left(\frac{1 - 5v}{1 + v} \beta_{ij} \beta_{mn} + 5I_{ijmn}\right).$$

Используя правило сведения компонент симметричных тензоров 4-го ранга в матрицу, получаем систему для инвариантов тензора с компонентами ζ_{pqrs} :

$$\begin{cases} \zeta_{kkmm} = \zeta_{11} + \zeta_{22} + \zeta_{33} + 2(\zeta_{12} + \zeta_{13} + \zeta_{23}) = 0, \\ \zeta_{klkl} = \zeta_{11} + \zeta_{22} + \zeta_{33} + 2(\zeta_{44} + \zeta_{55} + \zeta_{66}) = 0, \end{cases}$$

решение которой равносильно решению следующей задачи безусловной минимизации:

$$\zeta_{kkmm}^2 + \zeta_{klkk}^2 \to min,$$

решив которую получаем точечные оценки для модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия, из которых можно найти оценку коэффициента Пуассона, используя соотношение (4). В результате имеем следующие оценки коэффициента Пуассона:

- 1) для кубической кристаллической решетки n = 0.2211;
- 2) для $\Gamma\Pi V$ -решетки n=0.3093.

5. Расчеты для пористого двухфазного сплава-смеси

Проведем аналогичные расчеты для пористого двухфазного сплава-смеси кремния и магния при трех фиксированных значениях объемной пористости. Пусть V_1 , V_2 и V_3 — объемные доли кремния и магния и объемная пористость сплава-смеси соответственно. Тогда $V_1 + V_2 + V_3 = 1$. Верхнюю и нижнюю оценки упругой характеристики Π сплава-смеси, состоящего из N компонент, можно получить по следующим формулам:

$$\Pi^{+} = \sum_{\alpha=1}^{N} \Pi_{\alpha}^{+} V_{\alpha}, \frac{1}{\Pi^{-}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{V_{\alpha}}{\Pi_{\alpha}^{-}}.$$

Поскольку $V_1+V_2+V_3=1$, и требуется построить графики от величины $\tilde{V}=\frac{V_1}{V_1+V_2}$ имеем

$$\begin{cases} V_1 + V_2 = 1 - V_3, \\ V_1 = \tilde{V}(1 - V_3), \\ V_2 = 1 - V_3 - V_1 = (1 - \tilde{V})(1 - V_3). \end{cases}$$

При решение задачи Эшелби использована функция

$$\zeta = V_1 \zeta_{Si} + V_2 \zeta_{Ma} + V_3 \zeta_0,$$

где ζ_{Si} , ζ_{Mg} — соответствующие функции для металлов с кубической и ГПУ кристаллическими решетками, ζ_0 — поправка на поры с нулевым тензором коэффициентов упругости. Построим графики зависимостей v^+ , v_- и величины v, найденной при решении задачи Эшелби, от переменной \tilde{V} (рис. 3). Из графиков видно, что при наличии ненулевой объемной пористости нижние оценки некорректны.

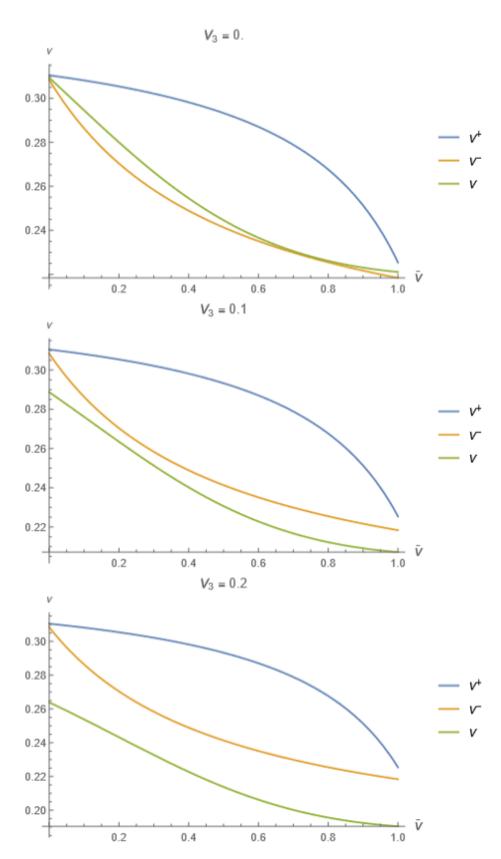


Рис. 3. Оценки коэффициента Пуассона пористого двухфазного сплава-смеси при различных значениях объемной пористости

6. Заключение 14

6. Заключение

В данной работе для заданной пары металлов были получены следующие результаты:

- 1) вычислены элементы матриц коэффициентов податливости и упругости;
- 2) построены графики зависимостей линейной податливости от направлений единичного вектора;
- 3) определенны направления, по которым линейная податливость имеет экстремальные значения;
- 4) найдены отношения полуосей эллипсоида вращения, образующегося после действия всестороннего давления на шар из металла с ГПУ-решеткой;
- 5) для поликристаллов из заданных металлов найдены оценки коэффициента Пуассона в предположении хаотической ориентации зерен (оценки по Фойгту и по Рейссу) и для случая статистически усредненной шаровой формы кристаллических зерен (задача Эшелби);
- 6) проведены аналогичные расчеты для пористого двухфазного сплава-смеси из заданных металлов при трех фиксированных значения объемной пористости;
- 7) построены графики зависимостей коэффициента Пуассона от объемных долей металлов в сплаве;
- 8) показано, что при наличии пор в двухфазном сплаве-смеси нижние оценки некорректны.

Список использованных источников

- 1. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
- 2. Зарубин В.С. Прикладные задачи термопрочности элементов конструкций. М.: Машиностроение, 1985. 296 с.
- 3. Зарубин В.С. Физические и математические модели микромеханики: учеб- ное пособие. В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2020. 194 с.