



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
(Группа)

(Подпись, дата)

В. Г. Пиневич

(И. О. Фамилия)

Руководитель курсовой работы

(Подпись, дата)

Е. А. Максимова

(И. О. Фамилия)

2023 г.

Оглавление

Список условных обозначений	3
1. Постановка задачи	4
Вычисление элементов матриц коэффициентов упругости и коэффициентов податливости	5
1.1. Матрицы податливости и упругости для кубической кристаллической решетки	5
1.2. Матрицы податливости и упругости для гексагональной кристаллической решеткой	6
2. Линейная податливость	6
2.1. Линейная податливость для металлов с кубической кристаллической решеткой	7
2.2. Линейная податливость для металлов с гексагональной кристаллической решеткой	11
3. Деформирование шара из металла с ГПУ кристаллической решеткой при всестороннем давлении	12
4. Оценки коэффициента Пуассона	12
4.1. Оценки по Фойгту и по Рейссу	12
4.2. Задача Эшелби	14
5. Расчеты для пористого двухфазного сплава-смеси	15
6. Заключение	19
Список использованных источников	20

Список условных обозначений

C	— 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 \mathbf{n}
$e^{(\mathbf{n})}$	— относительное удлинение в направлении \mathbf{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 $\hat{\varepsilon}$ ($k, l = \overline{1, 3}$)
p	— 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_{ijkl}^o	— 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, ГПа
μ	— модуль сдвига, ГПа
κ	— модуль объемной упругости, ГПа

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

<i>Si</i>	C_{11}	C_{12}	C_{44}	<i>Mg</i>	S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{33}	S_{44}
ГПа	167	61	76	ТПа ⁻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

$$\hat{C}\hat{S} = I \quad (1)$$

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. Найдём коэффициенты податливости используя формулы из источника [1] и проведя расчёты 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

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

Норма ошибки:

$$\|S - C^{-1}\| = 2 \cdot 10^{-27}.$$

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, перпендикулярной 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

$$C_{11} = 57.82 \text{ ГПа}, C_{12} = 27.86 \text{ ГПа}, C_{13} = 21.97 \text{ ГПа},$$

$$C_{33} = 59.12 \text{ ГПа}, C_{44} = 14.20 \text{ ГПа}, C_{66} = 14.98 \text{ ГПа}.$$

Норма ошибки:

$$\|C - S^{-1}\| = 1.5 \cdot 10^{-5}.$$

2. Линейная податливость

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

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

где $e^{(\mathbf{n})}$ — относительное удлинение материала в направлении \mathbf{n} .

2.1. Линейная податливость для металлов с кубической кристаллической решеткой

Линейная податливость для металлов с кубической кристаллической решеткой равна

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

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, и максимальна в направлениях параллельных граням.

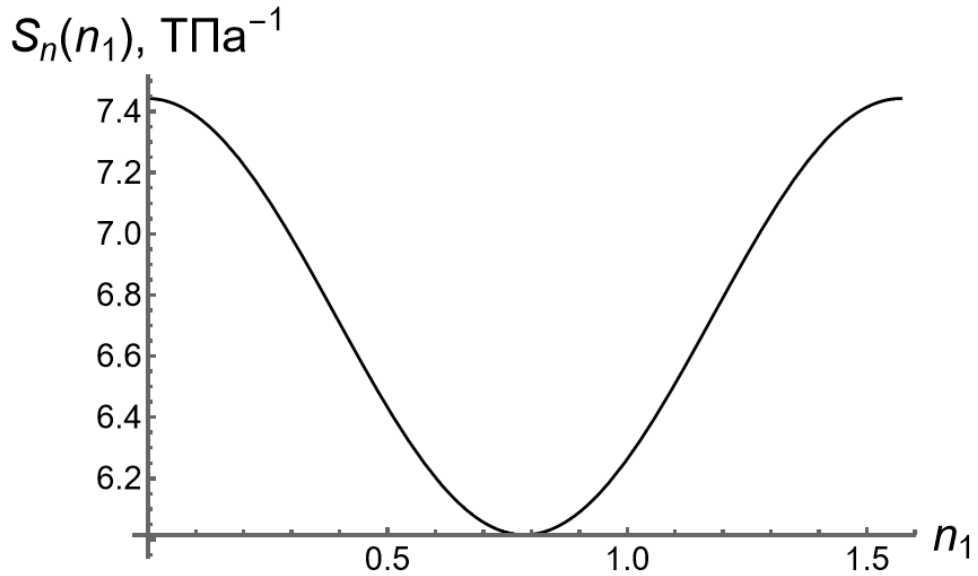


Рис. 1. Линейная податливость в плоскости грани куба

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, и максимальна в направлении, параллельном грани куба.

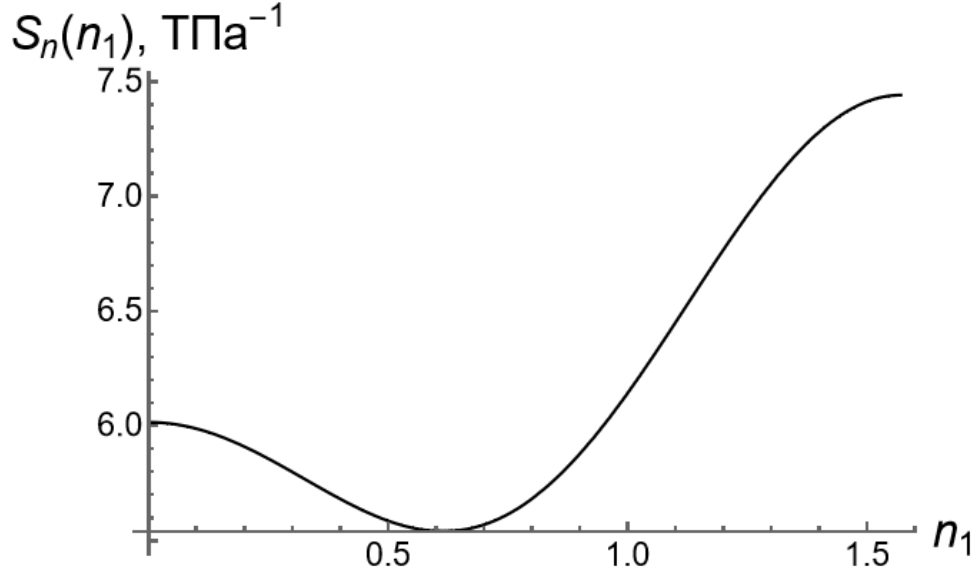


Рис. 2. Линейная податливость в плоскостях, содержащих диагонали грани и куба

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

Теперь найдем зависимость линейной податливости S_n от направления единичного вектора, лежащего в плоскостях, содержащих диагонали двух граней, имеющих общую точку.

Пусть первая диагональ лежит в двух разных плоскостях, а общая точка — начало координат. Векторы $\mathbf{b}_1 = \mathbf{i} + \mathbf{k}$ и $\mathbf{b}_2 = \mathbf{j} + \mathbf{k}$, лежат на этих диагоналях, следовательно, в рассматриваемой плоскости. \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 не ортогональны, потому что $\cos \widehat{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2} > 0$. Ортогонализируем по алгоритму Грама-Шмидта:

$$\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{b}_1}{\|\mathbf{b}_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{i} + \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{d}_2 = \mathbf{b}_2 - \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{b}_2 \rangle \mathbf{e}_1 = -\frac{1}{2}\mathbf{i} + \mathbf{j} + \frac{1}{2}\mathbf{k},$$

$$\mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{d}_2}{\|\mathbf{d}_2\|} = -\frac{1}{\sqrt{6}}\mathbf{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{j} + \frac{1}{\sqrt{6}}\mathbf{k}.$$

Тогда вектор \mathbf{e}_3 определим:

$$\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{j} + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{k}.$$

$$A_{\mathcal{B} \rightarrow \mathcal{E}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Тогда получим

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}n_1 - \frac{1}{\sqrt{6}}n_2 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}n_2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}n_1 + \frac{1}{\sqrt{6}}n_2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

В случае, если плоскость внутри отрезка $\left[0; \frac{\pi}{3}\right]$ вектор \mathbf{n} расположен внутри куба и плоскости $-x_1 - x_2 + x_3 = 0$. Получим зависимость:

$$S_n(n_1, n_2) = S_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}n_1 - \frac{1}{\sqrt{6}}n_2, \sqrt{\frac{2}{3}}n_2, \frac{1}{\sqrt{2}}n_1 + \frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{1-n_1^2}\right)$$

$$S_n(n_1) = S_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}n_1 - \frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{1-n_1^2}, \sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{1-n_1^2}, \frac{1}{\sqrt{2}}n_1 + \frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{1-n_1^2}\right).$$

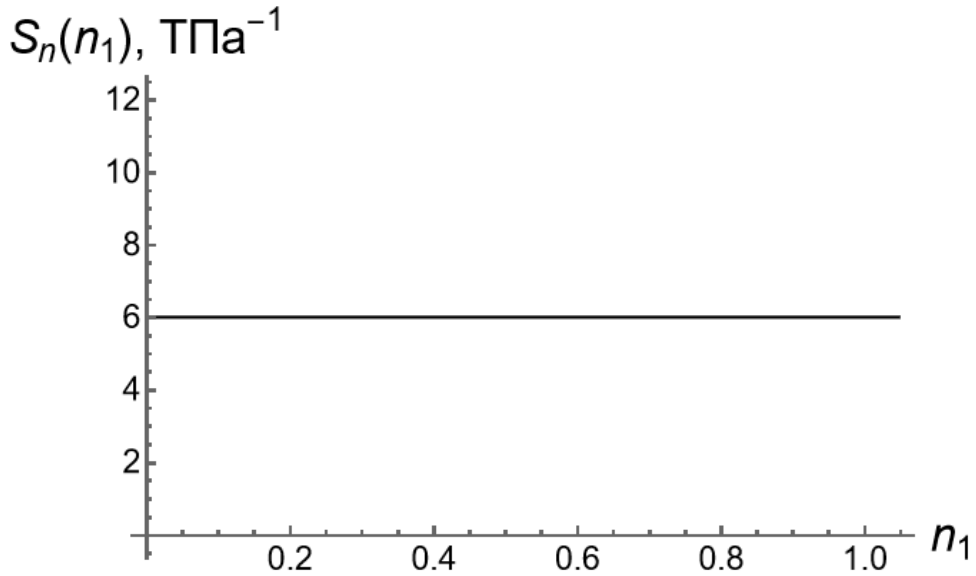


Рис. 3. Линейная податливость в плоскостях, содержащих диагонали двух граней

Получаем, что графиком функции является прямая, параллельная оси абсцисс. Полученный результат закономерен, так как $n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2 = \frac{1}{4}$.

Теперь найдем зависимость линейной податливости S_n от направления единичного вектора, лежащего в плоскостях, содержащих диагональ куба и ребро, имеющих общую точку.

Пусть диагональ куба проходит через начало координат, ребро лежит на оси x_1 . Векторы $\mathbf{e}_1 = \mathbf{i}$, $\mathbf{b}_2 = \mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}$ лежат на ребре и диагонали соответственно, а следовательно, и в рассматриваемой плоскости. Но они не ортогональны, так как $\cos(\widehat{\mathbf{e}_1, \mathbf{b}_2}) = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Применим к ним процесс ортогонализации Грама-Шмидта:

$$\mathbf{d}_2 = \mathbf{b}_2 - \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{b}_2 \rangle \mathbf{e}_1 = \mathbf{j} + \mathbf{k},$$

$$\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{j} + \mathbf{k}).$$

Оставшийся вектор \mathbf{e}_3 определим из соотношения

$$\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{j} + \mathbf{k}).$$

Выберем $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ в качестве базиса ε . Тогда

$$\mathcal{A}_{\mathcal{B} \rightarrow \varepsilon} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \end{pmatrix}.$$

При $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$ вектор \mathbf{n} расположен внутри куба в плоскости $-x_2 + x_3 = 0$. Получим зависимость

$$S_n(n_1, n_2) = S_n\left(\cos \alpha, \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha, \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha\right).$$

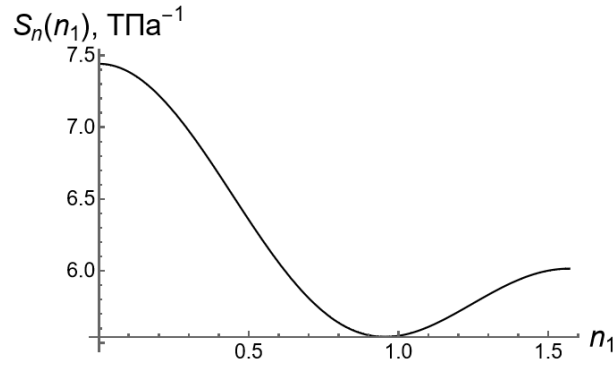


Рис. 4. Линейная податливость в плоскостях, содержащих диагональ куба и ребро

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 :

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

График зависимости линейной податливости от направления единичного вектора в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла, представлен на рис. 5. линейная податливость минимальна в направлении оптической оси и максимальна при $n_3 \approx 1$.

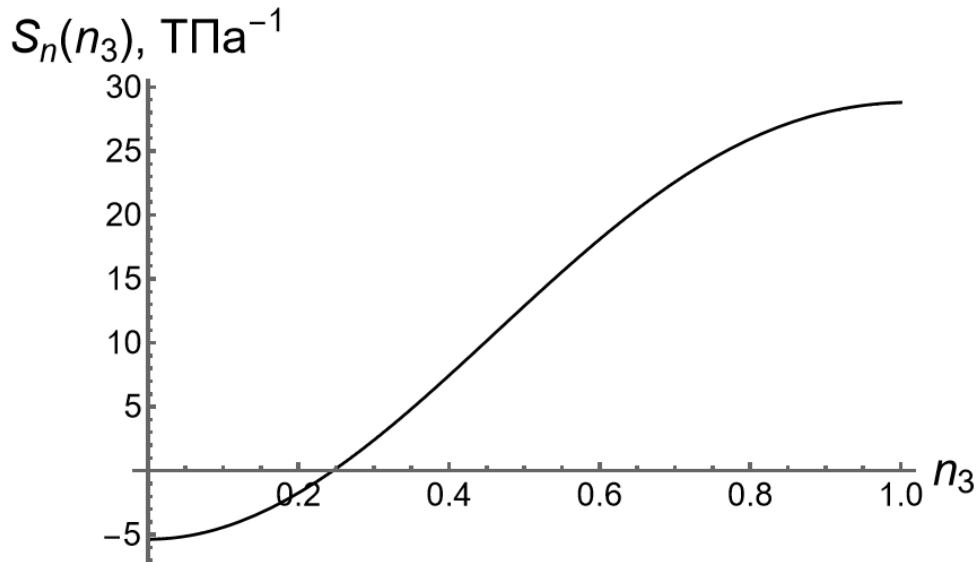


Рис. 5. Линейная податливость в плоскости, содержащей оптическую ось кристалла

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

Рассмотрим задачу действия всестороннего давления на шар из Mg . 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 $e^{(n)} = \varepsilon_{ij}n_in_j$. Учитывая выражение $\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl}$, для металла с гексагональной решеткой имеем

$$\begin{aligned} e^{(n)} &= S_{klmn}\sigma_{mn}n_kn_l = -pS_{klmn}\beta_{mn}n_kn_l = -pS_{klmm}n_kn_l = -pS_{kkmm}n_pn_p; \\ e^{(n)} &= -p((S_{11} + S_{12} + S_{13})n_1^2 + (S_{11} + S_{12} + S_{13})n_2^2 + (S_{13} + S_{33} + S_{13})n_3^2); \\ e^{(n)} &= -p((S_{11} + S_{12} + S_{13}) + (S_{33} + S_{13} - S_{11} - S_{12})) \end{aligned}$$

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 :

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

Следовательно, отношение полуосей эллипсоида вращения равняется

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

4. Оценки коэффициента Пуассона

Значения коэффициента Пуассона можем найти из соотношения

$$\nu = \frac{\kappa/2 - G/3}{\kappa + G/3} \quad (5)$$

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 ($\bar{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij}^o = const$). Для минимизируемого функционала Лагранжа такие распределения перемещений являются допустимыми. Этот функционал в таком 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

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

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 ($S_{ij} = S_{is}^\circ = \text{const}$). Для минимизируемого функционала Кастилиано такие распределения перемещений являются допустимыми. Этот функционал в таком 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

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

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:

$$\begin{aligned} G^- &= \frac{15}{2(7S_{11} + 2S_{33} - 5S_{12} + 3S_{44} - 4S_{13})}, \\ G^+ &= \frac{7C_{11} + 12C_{44} - 5C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}}{30}, \\ \kappa^- &= \frac{1}{2S_{11} + S_{33} + 2S_{12} + 4S_{13}}, \\ \kappa^+ &= \frac{2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{13}}{9}, \end{aligned}$$

Тогда оценки для коэффициента Пуассона для ГПУ-решетки имеют вид

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

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. Для этого необходимо решить систему

$$\begin{cases} \zeta_{kkmm} = 0, \zeta_{klkl} = 0, \end{cases}$$

где

$$\begin{aligned} \zeta_{pqrs} &= (C_{ijpq} - C_{ijmn}^\circ (I_{mnpq} - \omega_{mnpq}))^{-1} (C_{ijrs}^\circ - C_{ijrs}), \\ \omega_{ijmn} &= \frac{3}{2} \frac{1 - \nu}{4 - 5\nu} \left(\frac{1 - 5\nu}{1 + \nu} \beta_{ij} \beta_{mn} + 5I_{ijmn} \right). \end{aligned}$$

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:

$$\zeta_{kkmm}^2 + \zeta_{klkl}^2 \rightarrow \min,$$

решив которую получаем точечные оценки для модуля сдвига и модуля всестороннего сжатия, из которых можно найти оценку коэффициента Пуассона, используя соотношение (5). В результате имеем следующие оценки коэффициента Пуассона:

- 1) для кубической кристаллической решетки $n = 0.2211$;
- 2) для ГПУ-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:

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

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 решении задачи Эшелби использована функция

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

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 ν^+ , ν^- и величины ν , найденной при решении задачи Эшелби, от переменной \tilde{V} (рис. ??). Из графиков видно, что при наличии ненулевой объемной пористости нижние оценки некорректны.

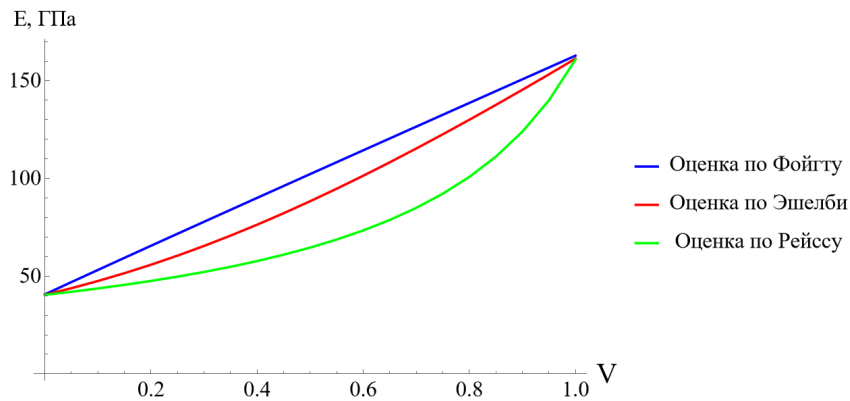


Рис. 6. Оценки модуля Юнга пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0$

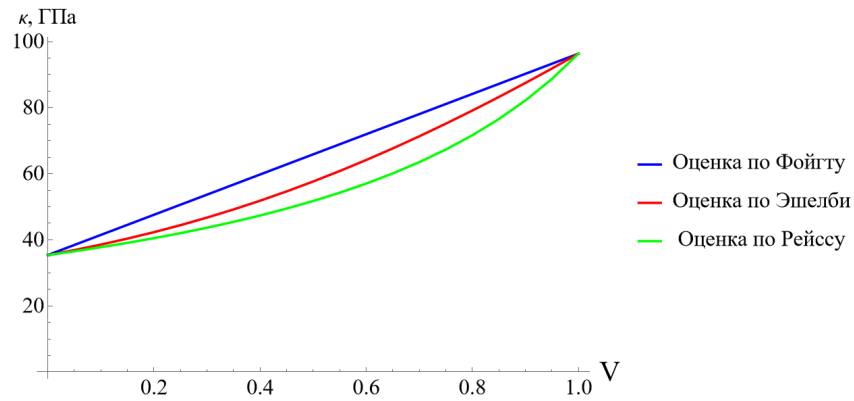


Рис. 7. Оценки модуля объемной упругости пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0$

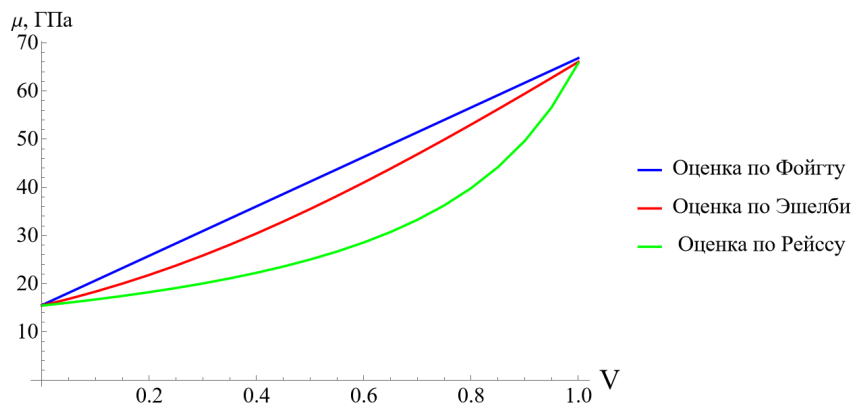


Рис. 8. Оценки модуля упругости пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0$

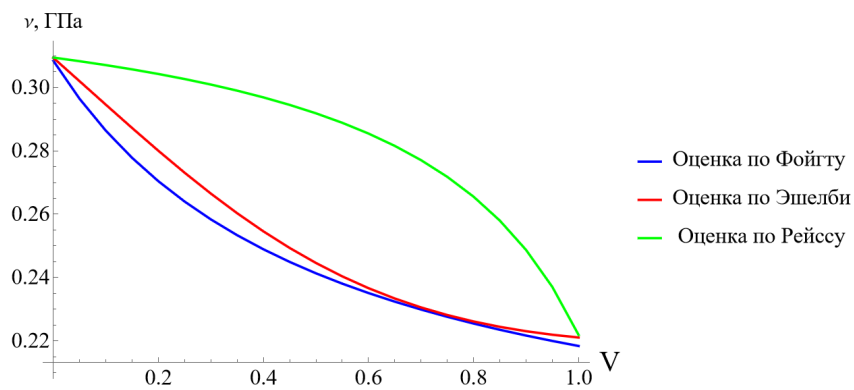
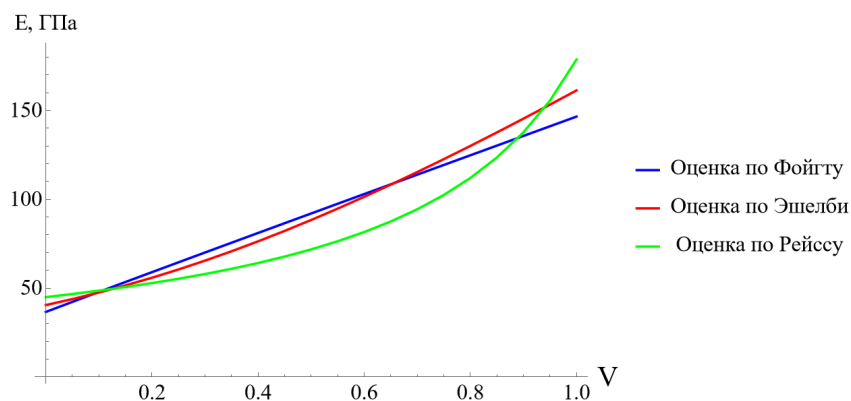
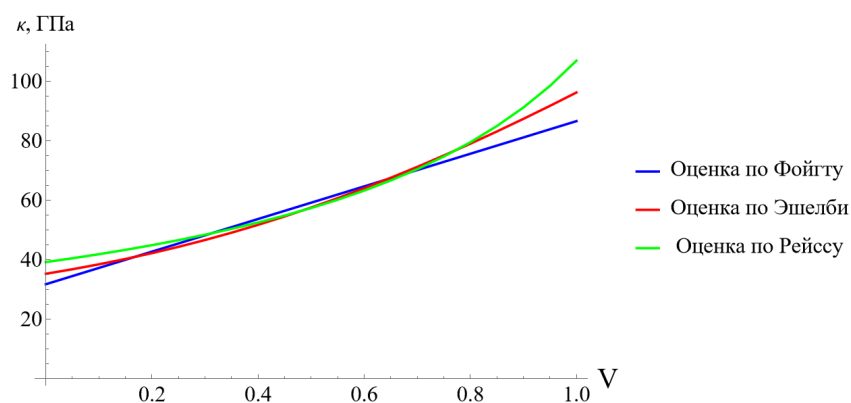
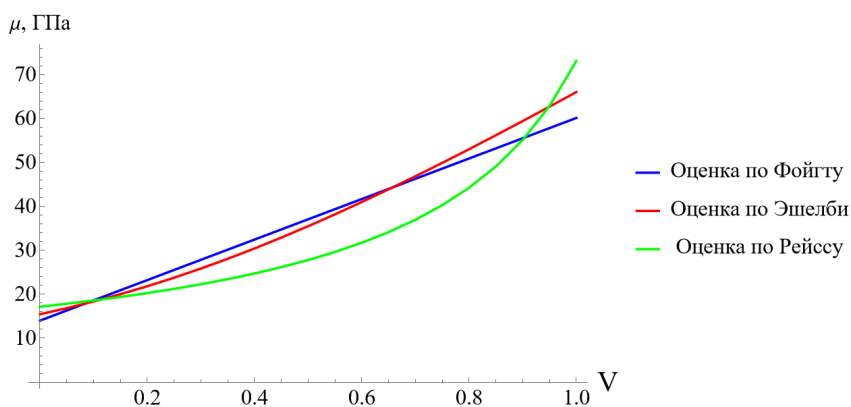


Рис. 9. Оценки коэффициента Пуассона пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0$

Рис. 10. Оценки модуля Юнга пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.1$ Рис. 11. Оценки модуля объемной упругости пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.1$ Рис. 12. Оценки модуля упругости пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.1$

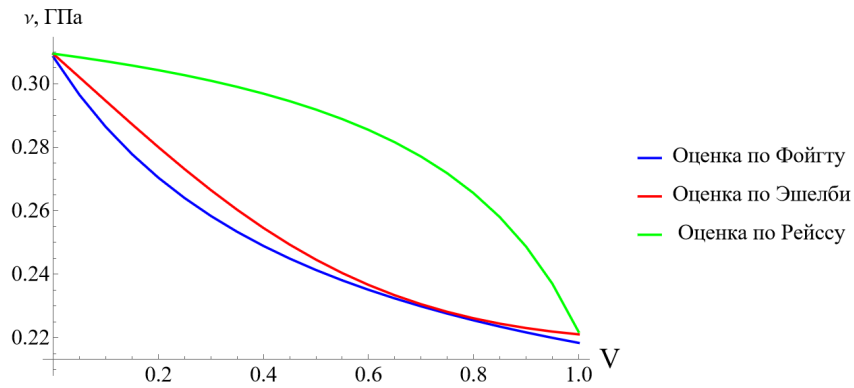


Рис. 13. Оценки коэффициента Пуассона пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.1$

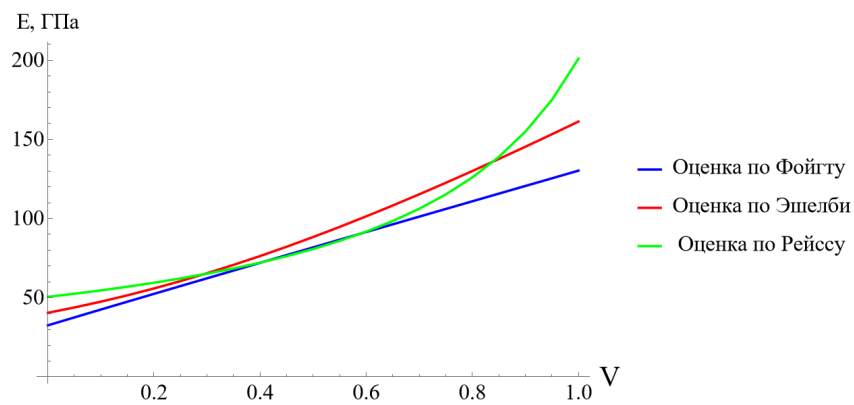


Рис. 14. Оценки модуля Юнга пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.2$

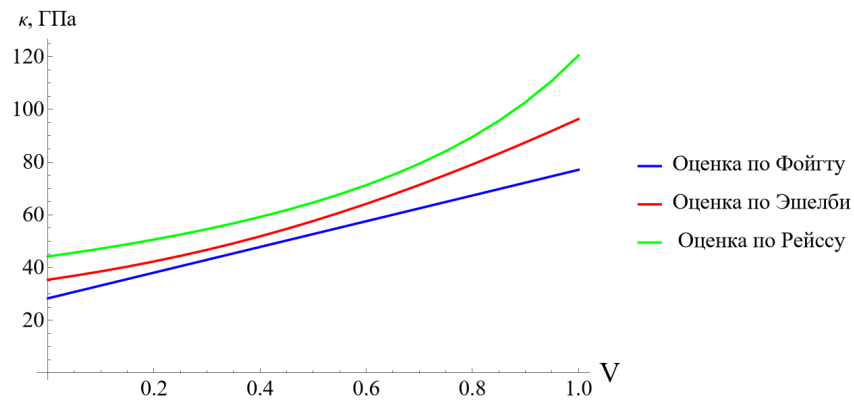


Рис. 15. Оценки модуля объемной упругости пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.2$

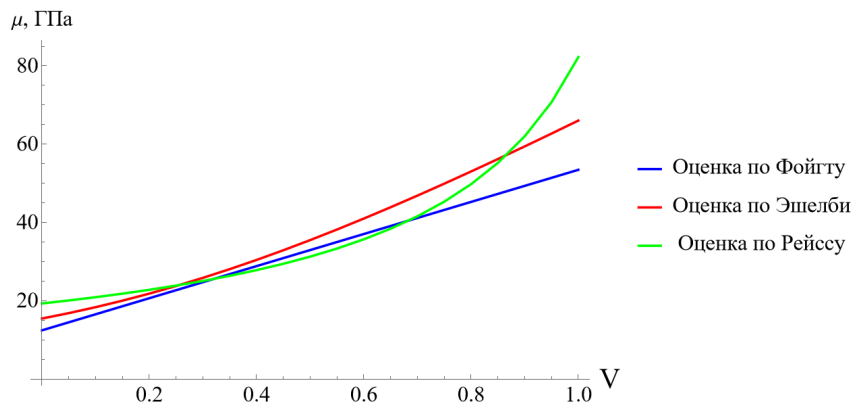


Рис. 16. Оценки модуля упругости пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.2$

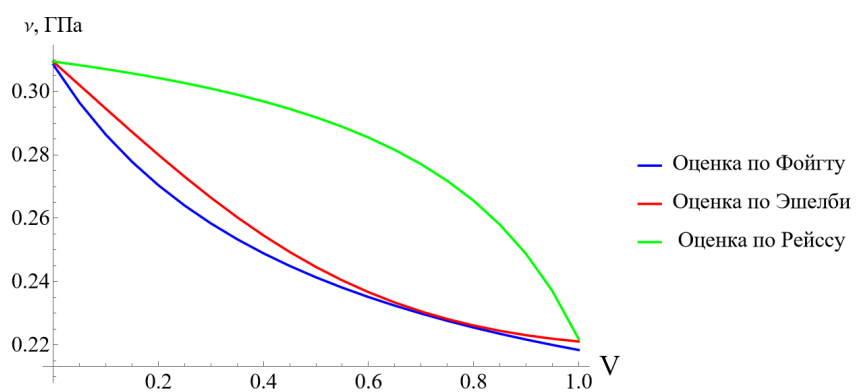


Рис. 17. Оценки коэффициента Пуассона пористого двухфазного сплава-смеси при $V_3 = 0.2$

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) определены 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 найдены оценки по Фойгту и Рейссу коэффициента Пуассона в предположении хаотической ориентации зерен;
- 6) для поликристаллов найдены оценки для случая статистически усредненной шаровой формы кристаллических зерен (задача Эшелби)
- 7) проведены аналогичные расчеты для пористого двухфазного сплава-смеси из заданных металлов при трех фиксированных значениях объемной пористости;
- 8) построены графики зависимостей коэффициента Пуассона от объемных долей металлов в сплаве.

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 термпрочности элементов конструкций. М.: Машиностроение, 1985. 296 с.
3. Зарубин В.С. Физические и математические модели микромеханики: учебное пособие. В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2020. 194 с.