Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Анисимов, Структурная модель напряженно-деформированного состояния твердых тел, учитывающая межмолекулярное взаимодействие, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2008, выпуск 1(), 167–170

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu593>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.137.237

26 апреля 2023 г., 15:31:39

УДК 539.376

В. Н. Анисимов

СТРУКТУРНАЯ МОДЕЛЬ НАПРЯЖЁННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ТВЁРДЫХ ТЕЛ, УЧИТЫВАЮЩАЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Предложена структурная модель для описания напряжённо-деформированного состояния твёрдых тел с позиции межмолекулярного взаимодействия. С помощью модели получены нелинейные соотношения между деформациями и напряжениями в упругой области.

Физические модели механики деформируемого твёрдого тела предполагают представление реального твёрдого тела как совокупность большого числа неделимых частиц, взаимодействующих между собой определённым образом, отождествляя их с реальными молекулами или атомами.

Считая, что силы взаимодействия между частицами направлены по прямой, соединяющей их центры (гипотеза центральных сил), и зависят только от расстояния, можно получить следующие уравнения равновесия, записанные в декартовой системе координат (x_1, x_2, x_3) :

$$\sum_{j \neq i} F(r_{ij}) \cdot n_{kij} = \Phi_{ki}, \quad (1)$$

где $k = 1, 2, 3$; $i, j = 1, 2, \dots, M$; M — число частиц; $r_{ij} = \sqrt{(x_{1j} - x_{1i})^2 + (x_{2j} - x_{2i})^2 + (x_{3j} - x_{3i})^2}$ — расстояние между i -той и j -той частицами; x_{1i}, x_{2i}, x_{3i} — координаты центра i -той частицы; $n_{kij} = \frac{x_{kj} - x_{ki}}{r_{ij}}$ — направляющие косинусы вектора, соединяющего центры i -той и j -той неделимых частиц; $F(r)$ — сила взаимодействия между частицами, находящимися на расстоянии r ; $\Phi_{1i}, \Phi_{2i}, \Phi_{3i}$ — компоненты внешней силы, действующей на частицу. Систему (1) необходимо разрешить относительно координат центров неделимых частиц, т.е. относительно x_{1i}, x_{2i}, x_{3i} .

Даже если ограничиться суммированием только в ближайшей к i -той частице области (силы взаимодействия быстро убывают с увеличением расстояния), то всё равно решение системы затруднительно, т.к. число уравнений очень велико. Система (1) может быть полезна только для описания среды в узкоограниченном объёме, например, в пределах нескольких кристаллов.

В данной работе предложена интегральная модель для описания взаимодействия частиц. Предлагается выделить одну неделимую частицу (структурный элемент) — шар радиуса r_0 с центром в точке $M(x_1, x_2, x_3)$, а остальные частицы интегрально распределить вокруг неё, заменив их сплошной средой с объёмной концентрацией частиц N . При этом, в окружающей частицу среде можно ввести понятия деформаций и напряжений. Схема структурной модели представлена на рисунке.

Если считать силы взаимодействия между частицами радиальными, то уравнения равновесия в точке $M(x_1, x_2, x_3)$ будут иметь вид:

$$V_0 \Phi_i(x_1, x_2, x_3) = \iiint_V F(r + \Delta r) \cdot N \cdot \frac{\xi_i + \Delta u_i}{r + \Delta r} dV, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Здесь $dV = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3$ — элемент объёма; V_0 — объём неделимой частицы; $\Phi_i(x_1, x_2, x_3)$ — проекция на ось x_i объёмной силы; $N F(r + \Delta r) dV$ — радиальная сила взаимодействия между частицей и объёмом dV ; $u_i(x_1, x_2, x_3)$ — перемещение точек среды в результате деформирования; $\Delta u_i = u(x_1 + \xi_1, x_2 + \xi_2, x_3 + \xi_3) - u(x_1, x_2, x_3)$; $r = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2}$ — расстояние между частицей и объёмом dV в недеформированном состоянии; $\Delta r = (\sqrt{(\xi_1 + \Delta u_1)^2 + (\xi_2 + \Delta u_2)^2 + (\xi_3 + \Delta u_3)^2} - r)$ — изменение

Схема структурной модели

r в результате деформации; $n_i = \frac{\xi_i}{r}$; $n_i^* = \frac{\xi_i + \Delta u_i}{r + \Delta r}$ — направляющие косинусы вектора, соединяющего центры частицы и объёма dV , до и после деформации. Тело V представляет собой внешность сферы радиуса r_0 , равного радиусу структурного элемента (закрашенная область на рисунке).

Введём функцию $F_0(r) = \frac{F(r)}{r}$ и разложим подынтегральное выражение в ряд относительно Δu_i в точке $\Delta u_i = 0$ с точностью до членов второго порядка:

$$F_0 \sqrt{(\xi_i + \Delta u_i)(\xi_i + \Delta u_i)} \cdot (\xi_s + \Delta u_s) = r F_0(r) n_s + (r F_0'(r) n_k n_s + F_0(r) \delta_{sk}) \Delta u_k + \\ + 0,5((r F_0''(r) - F_0'(r)) n_l n_k n_s + F_0'(r) (\delta_{kl} n_s + \delta_{sl} n_k + \delta_{sk} n_l) \Delta u_k \Delta u_l,$$

где δ_{ij} — тензор Кронекера. Здесь и далее используется свёртывание по повторяющимся индексам.

Функцию Δu_i также разложим в ряд:

$$\Delta u_i = u(x_1 + \xi_1, x_2 + \xi_2, x_3 + \xi_3) - u(x_1, x_2, x_3) \approx r u_{i,j} n_j + 0,5 r^2 u_{i,jk} n_j n_k.$$

Тройной интеграл (2) удобно проинтегрировать в сферических координатах. Более подробно процесс интегрирования рассмотрен в работе [1]. После интегрирования получим уравнения равновесия с точностью до членов 2-го порядка относительно перемещения u и его производных:

$$\Phi_3(x_1, x_2, x_3) = 5A_1^*(u_{3,11} + u_{3,22} + u_{3,33}) + B_1^*(3u_{3,33} + u_{3,11} + u_{3,22} + 2u_{1,13} + 2u_{2,23}) + \\ + \frac{C_1^* - B_1^*}{7} \left[u_{3,3}(15u_{3,33} + 3u_{3,11} + 3u_{3,22} + 6u_{1,13} + 6u_{2,23}) + u_{1,1}(3u_{3,33} + 3u_{3,11} + u_{3,22} + 6u_{1,13} + 2u_{2,23}) + \right. \\ + u_{2,2}(3u_{3,33} + 3u_{3,22} + u_{3,11} + 6u_{2,23} + 2u_{1,13}) + (u_{1,3} + u_{3,1})(3u_{1,33} + 3u_{1,11} + u_{1,22} + 6u_{3,13} + 2u_{2,12}) + \\ + (u_{2,3} + u_{3,2})(3u_{2,33} + 3u_{2,22} + u_{2,11} + 6u_{3,23} + 2u_{1,12}) + (u_{1,2} + u_{2,1})(2u_{1,23} + 2u_{2,13} + 2u_{3,12}) \left. \right] + \\ + B_1^* \left[u_{3,3}(9u_{3,33} + 3u_{3,11} + 3u_{3,22} + 2u_{1,13} + 2u_{2,23}) + u_{2,2}(2u_{2,23} + 3u_{3,22} + u_{3,11} + u_{3,33}) + \right. \\ + u_{1,1}(2u_{1,13} + 3u_{3,11} + u_{3,22} + u_{3,33}) + u_{3,1}(6u_{3,13} + 3u_{1,11} + u_{1,22} + u_{1,33} + 2u_{2,12}) + \\ + u_{1,3}(u_{1,11} + u_{1,22} + 3u_{1,33} + 2u_{3,13}) + u_{3,2}(6u_{3,23} + 2u_{1,12} + 3u_{2,22} + u_{2,11} + u_{2,33}) + \\ \left. + u_{2,3}(u_{2,11} + u_{2,22} + 3u_{2,33} + 2u_{3,23}) + u_{1,2}(2u_{1,23} + 2u_{3,12}) + u_{2,1}(2u_{2,13} + 2u_{3,12}) \right], \quad (3)$$

где

$$A_1^* = \frac{2\pi N}{15V_0} \int_{r_0}^{\infty} F_0(r) r^4 dr; \quad B_1^* = \frac{2\pi N}{15V_0} \int_{r_0}^{\infty} F_0'(r) r^5 dr; \quad C_1^* = \frac{2\pi N}{15V_0} \int_{r_0}^{\infty} F_0''(r) r^6 dr.$$

Уравнения равновесия в проекции на оси x_1 и x_2 получаются заменой индексов $1 \leftrightarrow 3$, $2 \leftrightarrow 3$.

Разлагая силы, действующие по поверхности структурного элемента, по трем взаимно перпендикулярным плоскостям, получим выражения для напряжений:

$$\frac{S_0}{N} \sigma_{st}^* = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \left(\int_{r_0}^{\infty} r F_0(r) n_s + F_0(r) r u_{s,i} n_i + r^2 F_0'(r) (u_{k,i} n_i n_k) n_s + \right. \\ \left. + 0,5(r F_0''(r) - F_0'(r)) (r u_{k,i} n_i n_k)^2 n_s + 0,5 F_0'(r) (\delta_{kl} n_s + \delta_{sl} n_k + \delta_{sk} n_l) r^2 (u_{k,i} n_i) (u_{l,i} n_i) r^2 dr \right) n_t \sin \theta d\theta,$$

где S_0 — площадь сечения, приходящаяся на структурный элемент.

После интегрирования получим:

$$\sigma_{33}^* = 5A_2^* + 5A_2^* u_{3,3} + B_2^* (3u_{3,3} + u_{1,1} + u_{2,2}) + 0,5 B_2^* (9u_{3,3}^2 + u_{1,1}^2 + u_{2,2}^2 + 2u_{1,1} u_{3,3} + 2u_{2,2} u_{3,3} + 3u_{1,3}^2 + \\ + 3u_{2,3}^2 + 3u_{3,2}^2 + u_{1,2}^2 + u_{2,1}^2 + 2u_{3,1} u_{1,3} + 2u_{3,2} u_{2,3}) + \\ + \frac{1}{14} (C_2^* - B_2^*) \left(15u_{3,3}^2 + 3u_{1,1}^2 + 3u_{2,2}^2 + 6u_{1,1} u_{3,3} + 6u_{2,2} u_{3,3} + 2u_{1,1} u_{2,2} + \right. \\ \left. + 3(u_{1,3} + u_{3,1})^2 + 3(u_{2,3} + u_{3,2})^2 + (u_{1,2} + u_{2,1})^2 \right); \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{31}^* = & 5A_2^*u_{3,1} + B_2^*(u_{1,3} + u_{3,1}) + 0,5B_2^*[(u_{1,1} + u_{3,3})(2u_{1,3} + 6u_{3,1}) + 2u_{2,2}u_{3,1} + \\ & + 2u_{1,2}u_{3,2} + 2u_{2,1}u_{3,2} + 2u_{2,1}u_{2,3}] + \\ & + \frac{1}{7}(C_2^* - B_2^*)[(3u_{1,1} + 3u_{3,3} + u_{2,2})(u_{1,3} + u_{3,1}) + (u_{1,2} + u_{2,1})(u_{2,3} + u_{3,2})], \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$A_2^* = \frac{2\pi N}{15S_0} \int_{r_0}^{\infty} F_0(r)r^3 dr; \quad B_2^* = \frac{2\pi N}{15S_0} \int_{r_0}^{\infty} F_0'(r)r^4 dr; \quad C_2^* = \frac{2\pi N}{15S_0} \int_{r_0}^{\infty} F_0''(r)r^5 dr. \quad (6)$$

Остальные компоненты тензора напряжения получаются заменой индексов $1 \leftrightarrow 3$, $2 \leftrightarrow 3$.

В дальнейшем будем считать, что тензор деформации симметричен, т.е. $u_{i,j} = u_{j,i}$. Заметим, что при отсутствии деформации напряжения не равны нулю, т.е. находятся с точностью до напряжений всестороннего напряжённого состояния.

Подставляя в выражения для напряжений (4) и (5) значения деформаций:

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(u_{j,i} + u_{i,j}); \quad e = e_{11} + e_{22} + e_{33}; \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^* - 5A^*\delta_{ij},$$

получим следующие соотношения между деформациями и напряжениями:

$$\begin{aligned} \sigma_{33} = & (3A + 2B)e_{33} + (B - A)e + \frac{B-A}{7}(9e_{33}^2 - e_{11}^2 - e_{22}^2 - 2e_{11}e_{33} - 2e_{22}e_{33} - 3e_{11}e_{22} + 10e_{13}^2 + 10e_{23}^2 + e_{12}^2) + \\ & + \frac{c}{14}(15e_{33}^2 + 3e_{11}^2 + 3e_{22}^2 + 6e_{22}e_{33} + 6e_{11}e_{33} + 2e_{11}e_{22} + 12e_{23}^2 + 12e_{13}^2 + 4e_{12}^2); \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{13} = & (3A + 2B)e_{13} + \frac{B-A}{7}(10e_{11}e_{13} + 10e_{33}e_{13} + e_{22}e_{13} + 9e_{12}e_{23}) + \\ & + \frac{2C}{7}(3e_{11}e_{13} + 3e_{33}e_{13} + e_{22}e_{13} + 2e_{12}e_{13}). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь A , B , C определяются следующими равенствами:

$$A = \frac{2\pi N}{15S_0} \int_{r_0}^{\infty} F(r) \cdot r^2 dr; \quad B = \frac{2\pi N}{15S_0} \int_{r_0}^{\infty} F'(r) \cdot r^3 dr; \quad C = \frac{2\pi N}{15S_0} \int_{r_0}^{\infty} F''(r) \cdot r^4 dr.$$

Прежние параметры A_2^* , B_2^* , C_2^* выражаются через A , B , C следующим образом:

$$A_2^* = A; \quad B_2^* = B - A; \quad C_2^* = C - 2B + 2A.$$

Данные соотношения получаются из (6) подстановкой $F_0(r) = \frac{F(r)}{r}$.

Линейные части выражений для напряжений совпадают с классическими и имеют вид

$$\sigma_{ij} = \lambda e \delta_{ij} + 2\mu e_{ij},$$

где $2\mu = 3A + 2B$, $\lambda = B - A$. Коэффициенты λ и μ , через модуль упругости E и коэффициент Пуассона ν , выражаются следующим образом:

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu) \cdot (1 - 2\nu)}; \quad 2\mu = \frac{E}{1 + \nu}.$$

Выразим A и B через E и ν :

$$B = \frac{E}{5(1 - 2\nu)}; \quad A = \frac{E(1 - 4\nu)}{5(1 + \nu)(1 - 2\nu)}. \quad (9)$$

Для идентификации параметра C найдём энергию сублимации, т.е. работу, которую необходимо совершить при неограниченном расширении твёрдого тела. Для нахождения работы примем $e_{11} = e_{22} = 0$, а e_{33} , определяемое выражением (7), будем увеличивать до тех пор, пока σ_{33} не станет равна нулю. Работа при такой деформации (энергия сублимации) будет равна:

$$W = \frac{3,63(2A + 3B)^3}{(6B - 6A + 5C)^2}. \quad (10)$$

Использование формул (9), (10) позволяет идентифицировать параметры A , B , C . В табл. приведены значения A , B , C для металлов. Значения E , ν , W взяты из [2]. Формула (7) при больших значениях ϵ_{33} может иметь значительную погрешность, поэтому приведённые в табл. значения C_0 значимы только в рамках модели (7), (8).

Идентификация параметров A , B , C

Материал	E , Н/м ²	ν	W , Дж/м ³	B , Н/м ²	A/B	C/B
Железо	$150 \cdot 10^9$	0,27	$56 \cdot 10^9$	$65 \cdot 10^9$	-0,06	-3,28
Никель	$204 \cdot 10^9$	0,28	$65 \cdot 10^9$	$93 \cdot 10^9$	-0,09	-3,56
Алюминий	$67 \cdot 10^9$	0,33	$32 \cdot 10^9$	$39 \cdot 10^9$	-0,24	-3,17
Свинец	$16 \cdot 10^9$	0,4	$11 \cdot 10^9$	$16 \cdot 10^9$	-0,45	-3,26

Достоверность полученной модели подтверждается совпадением в линейной части уравнений равновесия (3) и выражений для напряжений (7), (8) с классическими.

Нелинейные части выражений (3), (7), (8) в настоящее время не могут быть сопоставлены с экспериментами из-за отсутствия таковых. Нелинейности проявляются при деформациях порядка 0,1. У реальных материалов максимальное значение упругих деформаций не превышает 0,01, а при больших деформациях наблюдается пластичность.

Описанная в данной статье структурная модель опирается на реальное строение вещества. Полученные из неё следствия хорошо согласуются с классической теорией. Модель может быть использована для описания напряжённо-деформированного состояния твёрдых тел при больших деформациях. Также она может быть полезна в физике твёрдого тела, например, при определении сил межмолекулярного взаимодействия.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Анисимов, В. Н. Описание напряжённо-деформированного состояния твёрдых тел с позиции межмолекулярного взаимодействия [Текст] / В. Н. Анисимов // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер.: Физ.-мат. науки. — 2006. — № 42. — С. 197–200. — ISBN 5-7964-0815-1.
2. Смитлз, К. Д. Металлы [Текст] / К. Д. Смитлз. — М.: Металлургия, 1980. — 447 с.

Сызранский филиал Самарского государственного
технического университета, г. Сызрань
anisimov170159@mail.ru

Поступила 16.10.2007

V. N. Anisimov

THE STRUCTURAL MODEL OF TENSE DEFORMED CONDITION OF SOLIDS WHICH TAKE INTO ACCOUNT INTERMOLECULAR INTERACTION

The structural model to describe tense deformed condition of solids from the position of intermolecular interaction is offered. Nonlinear correlations between strains and tensions in the elastic sphere with the help of this model are received.

Samara State Technical University, Syzran Branch; Syzran, Russia
anisimov170159@mail.ru

Received 16.10.2007