

Наибольшей энергией связи межкластерного взаимодействия обладает карбид вольфрама, поэтому твердость у него наибольшая.

Разброс по твердости в каждом кластере вызван тем, что измерения микротвердости выполняются на разных кристаллографических поверхностях, для которых реализуется разная поверхностная плотность атомов данного элемента. Это и обуславливает разброс по твердости.

Таким образом, статистические методы анализа микротвердости позволяют выявить не только фазовый состав кластерных образований, но и установить порядок формирования разных кластерных структур в процессе остывания ванны расплава сложной композиционной смеси.

Л и т е р а т у р а

1. Гречихин Л.И., Иващенко С.А. Кластерный механизм упрочнения и восстановления конструкционных материалов. – М.: Машиностроение, 2003. – 19 с.

2. Гречихин Л.И., Тимошевич В.Б. Прогнозирование времени разрушения отдельных конструкционных деталей сложной механической системы. – М.: Машиностроение, 2003. – С. 19. 25.

3. Кардаполова М.А. Улучшение качества газотермических покрытий дополнительным легированием и лазерной обработкой. – Мн.: БПИ, 1988. – 120 с.

4. А.с. 1668903. Способ оценки фазового состава металлических и металлоподобных сплавов / О.Г. Девойно, М.А. Кардаполова, Г.Г. Панич. – Бюл. № 21. – 1987.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НАДЕЖНОСТИ И ДОЛГОВЕЧНОСТИ СЛОЖНЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Студент В.А. Комар

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Л.И. Гречихин

В современных условиях широко используются сложные механические системы, отдельные элементы которых работают при высоких и низких температурах, высоких и низких давлениях, а также при сложном нагружении. Такие условия эксплуатации требуют не только оптимального управления работой данных систем, но возник-

кает и настоятельная необходимость постоянно осуществлять прогноз надежности и долговечности работы как отдельных элементов конструкции, так и системы в целом.

В машиностроении все конструкционные детали изготавливаются из композиционных материалов. Композиционные материалы бывают трех типов: аморфные, смесевые и эвтектические. Аморфные композиционные материалы представляют собой хаотическое распределение решеточных кластерных структур разных веществ относительно друг друга. Взаимодействие между такими кластерными структурами осуществляется только ковалентной связью. При разогреве такого материала энергия тратится только на возбуждение колебаний и разрыв связей для каждого вещества в отдельности. На разрыв связей между разнородными кластерами энергия практически не потребляется.

Смесевые композиционные материалы представляют собой систему независимых кластерных решеточных структур, которые вставлены друг в друга, а взаимодействие между ними осуществляется путем ковалентной связи между кластерами разных веществ и адгезионным взаимодействием между атомами контактирующих поверхностей разнородных кластеров. Ярким представителем такого композиционного материала является никелид титана. Вследствие взаимодействия разных кластерных решеточных структур возникает их деформация. В никелиде титана кластерная решеточная структура никеля сильно деформирована, и эта деформация, в свою очередь, оказывает влияние на решеточную структуру титана.

Эвтектические композиционные материалы – это единая кристаллическая структура, формируемая кластерами, состоящими из атомов разнородных веществ, которые образуют общую кластерную кристаллическую структуру с ковалентной и обменной энергиями связи.

Расчетные значения энергии связи атомов внутри кластера и межкластерного взаимодействия для ряда элементов и их смесей приведены в таблице.

Энергия бинарной связи атомов внутри кластера и межкластерного взаимодействия для никеля, титана, железа и их смесей в ЭВ, а также их теплоемкостей в кал/град моль

Пара- метры	Вещество									
	никель		титан		железо		никелид титана		никелид железа	
	0 K	298 K	0 K	298 K	0 K	298 K	0 K	298 K	0 K	298 K
$E_{св.,1}$	0,277	0,276	0,307	0,306	0,367	0,366	0,148	–	0,575	0,574
$E_{св.,2}$	0,149	0,148	0,169	0,168	0,156	0,156	0,066	–	0,274	0,274
$E_{св.,3}$	0,062	0,056	0,044	0,032	0,102	0,101	0,044	–	0,065	0,060
$E_{св.,кл}$	0,059	0,054	0,109	0,108	0,013	0,003	0,096	–	0,070	0,069
C_{γ}	–	0,699	–	1,207	–	0,288	–	2,298	–	1,540
$E_{св.,\text{рез}}$	5,050	4,376	6,090	4,857	4,299	4,189	–	2,879	7,033	6,102

Из таблицы следует, что никелид титана не может быть сформирован путем образования единой кластерной решеточной структуры. В разогретой жидкости титана с никелем в равной пропорции по мере ее остывания вначале начнет формироваться кристаллическая структура титана, а затем никеля. Только после соединения кластеров титана и никеля со второй координационной сферой начнут образовываться бинарные структуры титана с никелем. Преимущественно это будет происходить в местах спайности между кластерами никеля и титана, т.е. начнет формироваться третья координационная сфера, обеспечивая взаимную связь между этими кластерами. Решеточная структура никеля будет деформирована до размеров решеточной структуры титана.

В случае расплава Ti и Ni максимальная энергия связи частиц основного кластера у титана. Поэтому вначале по мере снижения температуры расплава начинается рост основного кластера Ti . Основные кластеры Ti вытесняют атомы никеля, которые прекращают доступ атомам Ti для дальнейшего роста кластера с образованием второй и третьей координационных сфер. Избыток атомов никеля в межкластерном объеме Ti приводит к росту основного кластера Ni . В дальнейшем последовательно формируется вокруг основного кластера второй координационный слой у Ti , затем у Ni второй и третий координационные слои и только в последнюю очередь третий координационный слой у основного кластера Ti . В результате происходит послойное образование решеточной структуры класте-

ров титана и никеля последовательно слой за слоем, и они как бы встроены друг в друга. Проникновение одной решетки кластера в другую происходит на один монослой атомов никеля. Поэтому межкластерные пустоты титана являются свободными, и это обстоятельство не является препятствием для осуществления обменного взаимодействия между кластерами.

Энергия ковалентной связи между кластерами решеток титана и никеля с учетом ближайшего окружения составляет не более $4 \cdot 10^{-4}$ эВ. Следовательно, взаимодействие валентных электронов с их распределением по энергиям в первой зоне Бриллюэна можно не учитывать. При непосредственном расположении разнородных кластеров следует учитывать возникновение связи, обусловленной обменной энергией между энергетическими уровнями второй, третьей и т.д. степенями ионизации соприкасающихся атомов. В никелиде титана в непосредственном соприкосновении находятся три пары атомов.

При скольжении по местам спайности кластеров титана и никеля, без затраты работы на их смещение, деформация может составлять 29%. При деформациях менее 29% следует рассматривать только растяжение или сжатие кластерных решеток никеля и титана. Так как кластеры никеля находятся в межкластерных объемах титана, то расстояние между ними составляет три диаметра титана. На таком удалении кластеры никеля взаимодействуют друг с другом с энергией 0,0592 эВ. Это несколько больше, чем для кластеров титана. Упругая деформация для кластерной решетки никеля в смеси *Ti* и *Ni* возникает в пределах деформаций до 11,8%. Получается, что кластерные решетки титана и никеля обладают разными деформационными свойствами. Полученные результаты подтверждаются опытными данными работы [1].

При циклическом нагружении некоторые композиционные материалы обладают гистерезисом [2, 3]. Обычно это материалы с памятью формы. При растяжении в межкластерных объемах в направлении действия силы увеличивается число атомов, обеспечивающих обменное взаимодействие между кластерами. По мере сжатия число свободных частиц остается постоянным, а расстояние уменьшается. Энергия связи возрастает. При сжатии до начального равновесного значения образца напряжение не возвращается к исходному значению, равному нулю. Необходимо совершить дополнительную работу по преодолению нако-

пленной энергии при растяжении образца. При импульсных нагрузках большинство материалов должны обладать гистерезисом.

Таким образом, механические свойства твердых тел определяются межкластерным взаимодействием, которое обусловлено ковалентной связью между кластерами и энергией, возникающей при обмене свободными атомами, находящимися внутри межкластерного объема.

Упругие свойства твердого тела реализуются до момента, когда при некоторой деформации возникает равенство энергии межкластерной связи и энергии поступательного движения свободных частиц внутри межкластерного объема при заданной температуре.

Пластические свойства проявляются резко, а именно, когда энергия межкластерного взаимодействия равна энергии поступательного движения свободных частиц внутри межкластерного объема. В ряде случаев некоторое возрастание напряжения с ростом пластической деформации обусловлено возникновением упрочненного слоя вблизи поверхности образца и увеличением количества свободных частиц внутри межкластерного объема.

В композиционных материалах возникают решеточные кластерные структуры, встроенные друг в друга. Механические свойства обусловлены совместным влиянием всех решеточных кластерных структур. Упругие свойства композиционных материалов реализуются в достаточно большой области деформаций. Такие материалы обладают памятью формы и гистерезисом диаграммы «напряжение-деформация».

Рассмотрим механизм разрушения на примере эвтектической смеси Fe-Ni и смесевом композиционном материале никелида титана. Никелид железа обладает некоторой долей ионной связи. Эта доля составляет 0,5 %.

Для эвтектического никелида железа точка плавления соответствует 1490 К. Это точка эвтектики. При этой температуре энергия межкластерного взаимодействия скачком уменьшается и становится меньше энергии поступательного движения свободных атомов железа в межкластерном объеме. При столкновении таких частиц с кластером происходит разрыв кластерной решеточной структуры. Энергия связи на один атом для эвтектической смеси составляет 4,746 эВ, тогда как для чистого железа при этой температуре энергия связи всего лишь 3,178 эВ. Для эвтектического состояния характерно, что основной кластер формируется атомами никеля вокруг атома железа, а остальные координацион-

ные слои формируются атомами железа. Зная точку эвтектики, можно получить зависимость межкластерного расстояния от температуры.

Смесь титана с никелем не образует эвтектическую смесь, так как оба вещества обладают сходной кристаллической структурой. Модельное представление деформации кластерных решеток для различных материалов приведено на рис. 1.

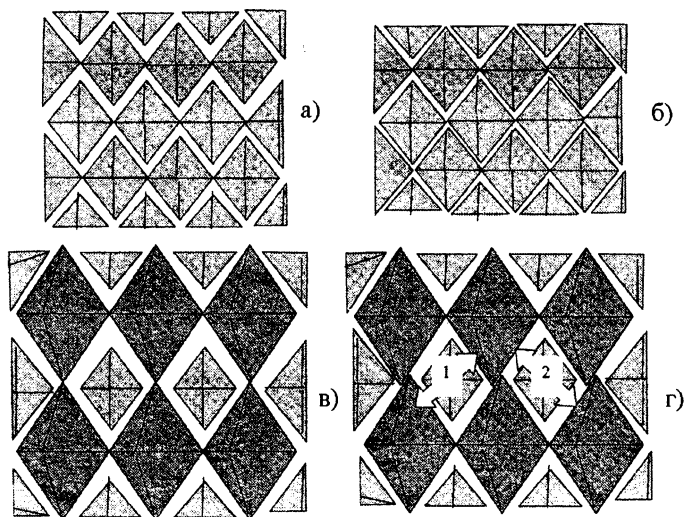


Рис. 1. Общий вид модели кластерной решеточной структуры:
 а – монокристаллов и эвтектической смеси в точке эвтектики; б – композиционных материалов смесевых и эвтектических вдали от точки эвтектики, общий вид деформированной решеточной структуры; в – монокристаллов и эвтектической смеси в точке эвтектики; г – композиционных материалов смесевых и эвтектических вдали от точки эвтектики

Деформация твердых тел определяется в основном изменением кластерной решеточной структуры под влиянием внешнего воздействия начиная с поверхности. При растяжении композиционного материала смесевого и эвтектического вдали от точки эвтектики будет происходить смещение кластеров вдоль плоскостей таким образом, что произойдет сжатие вдоль стрелки, отмеченной цифрой 1 (рис.1, г). При сжатии в том же направлении скольжение кластеров будет происходить по другим плоскостям так, что вызовет сме-

щение кластеров по стрелке, отмеченной цифрой 2. В первоначальную точку такой композиционный материал не возвратится путем сжатия. Возникнет гистерезис.

Если композиционный материал, обладающий памятью формы, растянуть в одном направлении, а затем сжать в перпендикулярном направлении, то первоначальная форма должна восстановиться. Если такой материал разогреть, то колебания кластеров малого размера будут способствовать ликвидации напряженного состояния, возникающего по стрелке 1 или по стрелке 2 (рис. 1, г). При этом может полностью восстановиться первоначальная форма тела, т.е. тело возвратится в исходное состояние. При циклическом сжатии-растяжении этого не произойдет.

Монокристаллы и эвтектические композиционные материалы в точке эвтектики ведут себя несколько иначе. При растяжении происходит сжатие поверхностного слоя, а при сжатии тот же поверхностный слой по-прежнему сжимается. Циклическое повторение этого процесса даже при малых нагрузках после определенного цикла приведет к разрушению ранее упрочненного поверхностного слоя. Исходя из потенциала взаимодействия кластеров разрушение приповерхностного слоя будет носить взрывной характер, аналогично тому, как это имеет место вследствие превращения белого олова в серое. Конструкционный материал должен постепенно рассыпаться в образовавшейся «шейке».

Интересно отметить следующий факт. Механические свойства кластерных решеток большинства веществ определяются обменным взаимодействием свободных атомов в межкластерном объеме. Если такой конструкционный материал поместить в вакуум, то вследствие газификации количество свободных атомов в межкластерном объеме резко уменьшится и, естественно, уменьшится энергия связи между кластерами. В результате механические свойства резко снизятся, и это может привести к взрывному разрушению при сравнительно малых внешних нагрузках и внешне неизменной форме конструкционного материала.

Двухчастичная квантовая модель твердого тела позволяет проводить компьютерное моделирование с прогнозом возможных последствий при известном составе конструкционного материала и условии его эксплуатации. Со временем такие прогнозы следует повсеместно реализовать, особенно в строительстве и транспорте.

Если какой-то элемент сложной конструкции обладает резонансными свойствами, то такой элемент способен возбуждаться на любой частоте. Резонансная частота колебаний определяется по формуле

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}},$$

где k – коэффициент упругости и m – масса элемента конструкции.

Коэффициент упругости определяется из вида потенциала взаимодействия. Тогда

$$k = \frac{E(R_0) - E(R)}{|R - R_0|^2}.$$

Здесь R_0 – равновесное межкластерное расстояние.

Коэффициент упругости резко уменьшается как с повышением температуры, так и с ростом внешних механических нагрузок. В области упругой линейной деформации частота возбужденных колебаний не изменяется, а при нелинейной упругой деформации частота уменьшается.

Если деталь изготовлена из композиционного материала, то ситуация может оказаться обратной. С повышением механических и тепловых нагрузок частота колебаний для таких деталей может возрасти за счет упрочнения приповерхностных слоев при внешнем нагружении. С ростом температуры происходит упрочнение конструкционного материала по всему объему, так как возрастает обменное взаимодействие между кластерами. Это обусловлено увеличением частоты обмена свободными атомами в межкластерных пустотах. Смещение частоты упругих колебаний в область высоких частот накануне разрушения образца было замечено в [4]. Такое явление возникает при наличии в системе положительной обратной связи.

Итак, резкое изменение частоты возбуждаемых колебаний свидетельствует о том, что сложная механическая система находится в условиях нарушения синергетических связей, а это недопустимо.

Л и т е р а т у р а

1. Эффекты памяти формы в никелиде титана после предварительного динамического деформирования/С.П. Беляев, А.Е. Волков, Н.Ф. Морозов и др.// Современные проблемы прочности: Научные труды V Международного семинара им. В.А. Лихачева, 17 – 21 сентября 2001 г. – Т.2. – Старая Русса – Великий Новгород: ЗАО «Новгородский технопарк», 2001. – С. 76-82.

2. Малинин Г.В. Исследование деформации мартенситной неупругости объектов различного фазового состава в условиях симметричного одноосного растяжения-сжатия // Современные проблемы прочности: Научные труды V Международного семинара им. В. А. Лихачева, Старая Русса, 17 – 21 сентября 2001 г. – Т. 1. – Великий Новгород: НГУ им. Ярослава Мудрого, 2001. – С. 33-43.

3. Малинина Н. А., Малинин В. Г., Малинин Г.В. Особенности знакопеременной деформации материалов с эффектом памяти формы при многозвенных траекториях нагружения в пространстве напряжений. 1. Аустенитное состояние. 2. Мартенситное состояние. Двухфазное состояние // Современные проблемы прочности: Научные труды V Международного семинара им. В. А. Лихачева, Старая Русса, 17 – 21 сентября 2001 г. – Т. 1. – Великий Новгород: НГУ им. Ярослава Мудрого, 2001. – С. 43-61.

4. Мерсон Д.Л., Разуваев А.А. К вопросу идентификации механизмов пластической деформации и разрушения на основе спектрального анализа сигналов акустической эмиссии // XIV Петербургские чтения по проблемам прочности: Сб. тезисов, СПб., 12–14 марта 2003 г. – СПб., 2003. – С. 164.

О ВЛИЯНИИ ХАРАКТЕРИСТИК ВИБРАЦИОННОГО РЕЗАНИЯ НА ДИНАМИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ОБРАБОТКИ

Студенты Н.В. Сечко, А.А. Федоров, Д.В. Ясюкевич,
Научный руководитель – канд. техн. наук, доц. В.И. Молочко

Резание с наложением колебаний инструмента, параллельных подаче (вибрационное резание), применяют при непрерывном характере обработки сталей и других пластичных материалов, что имеет место, напри-