

# DEFORMATION OF 12X12X36 NICKEL NANOWIRE AT DIFFERENT TEMPERATURES

M.M. Aish - аспирант

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

The mechanical properties of Nickel nanowire have been studied at different temperatures using molecular dynamics simulations. Morse potential is employed to carry out three dimensional molecular dynamics simulations. The stress–time relation of nanowire under extension is obtained. Temperature effect on the mechanical property of metal nanowire is discussed in detail. At high temperature a wide range of plastic region takes place. The simulation results at nanoscale play an important role on the mechanical behaviors of nanostructures.

## Computer Simulation Model

The object of investigation is taken alloy Ni. Alloy structure is presented in the form of a face-centered cubic cell. In this paper for calculating the dynamics of the atomic structure of the molecular dynamics method using paired Morse potential function [1]. Morse pair potential is written as:

$$\varphi_{KL}(r) = D_{KL}\beta_{KL}e^{-\alpha_{KL}r} \left[ \beta_{KL}e^{-\alpha_{KL}r} - 2 \right] \quad (1)$$

Where  $\alpha_{KL}$ ,  $\beta_{KL}$ ,  $D_{KL}$  - parameters defining the interaction of pairs of atoms of type K and L;  $r$  - the distance between the atoms. The potential energy of a system of  $N$  atoms is represented as:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1, i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \varphi_{KL}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (2)$$

Where  $\mathbf{r}_i$  - radius vectors of  $i$ -th atom.

When considering a closed system, the force acting on the  $i$ -th atom, will be:

$$F_i = - \sum_{i=1, i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{d\varphi_{KL}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{d(r_i - r_j)} \quad (3)$$

Mathematical model of the molecular dynamics method [2] describes a system of ordinary differential equations of motion of Newton. The equation of motion in the classical form is represented by:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_i \frac{dr_i}{dt} = v_i, i = 1, 2, \dots, N \quad (4)$$

Where  $m_i$  and  $v_i$  - mass and velocity of  $i$ -th atom - time.

To solve the system of ordinary differential equations by numerical Euler method with half-step. Temperature of the atoms in a perfect crystal, calculated using the formula:

$$T = \frac{2k}{3Nk_b} = \frac{1}{3Nk_b} \sum_I^N m_i v_i^2 \quad (5)$$

Where  $k_b$ , Boltzmann constant and  $K$ , is the total Kinetic energy.

Computer simulation using Morse potential is employed to carry out three dimensional molecular dynamics simulations of the mechanical properties of Nickel nanowire. We studied the extension properties of Nickel nanowires at different temperatures from 10K to 1500K, which is adjusted every  $10^{-13}$  seconds. The estimated size of the crystal unit was for this experiments of **2592** atoms (12 atoms along the edges and 36 atoms in height).

## Results and discussion, Temperature effect

Table.1. gives the measured (from MD simulation) tensile strength and strain to fracture of the 12x12x36 Nickel nanowire at different temperature. It is observed that the first yield stress decreases as the temperature increases. the first yield strain ( $\epsilon$ ) decreases when the temperature increases. From 0 to 1500 K, an abrupt decrease is identified and the first yield strains are 0.25 (10 K) and 0.05 (1500 K) with Ni alloy 12x12x36. It is observed that the first yield strain decreases as the temperature increases (Table.1). When the plastic deformation of the nanowire begins, the drop of the first yield stress also decreases.

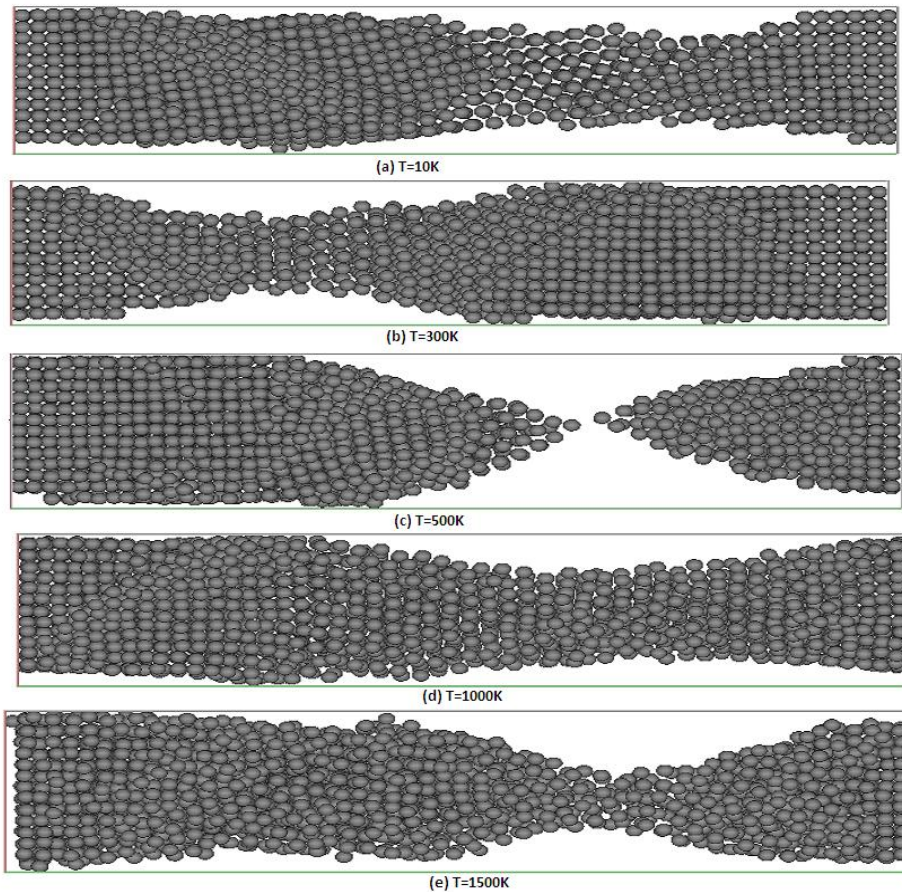


Fig. 1. Atomic configurations of 12x12x36 nanowire Nickel under extension loading at time 175 ps at different temperatures (a) T=10 K, plastic deformation occur (b) T=300K , plastic deformation occur (c)T =500K, break-up occur(d) T=1000K , plastic deformation occur (e) T=1500K , plastic deformation occur .

Table.1. Results of MD simulation of uniaxial tensile loading with 12x12x36 Nickel nanowire. Number of atoms=2592.

Temperature	Ultimate strength (GPa)	Strain at max. stress	Strain to failure
10	25	0.25	0.76
300	21	0.222	0.7
500	19	0.61	0.58
1000	12	0.1	0.86
1500	8	0.05	0.61

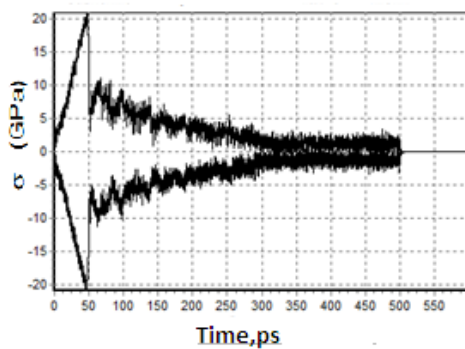


Figure.2. the stress–time relationships of the 12x12x36 nanowires subjected to uniaxial tension at temperatures 300 K.

With the increasing time, stress increases linearly at different temperatures. This process corresponds to the elastic deformation of the nanowire. With the increasing time, stress decrease as shown in the stress–time response of the nanowire, indicating the beginning of the plastic deformation of the nanowire. the stress–time curves are smooth at low temperatures, whereas, some “minipeaks” exhibit at high temperatures.

### **Conclusion**

The new concept of using nanowires as building blocks for logic and memory circuits makes it very necessary to fully understand the mechanical behaviors of these nanowires. Molecular dynamics simulations have been carried out to investigate the mechanical behaviors of Nickel nanowire. The effect of temperature on mechanical properties was investigated by MD simulations. The temperature effect on the extension properties is discussed in detail. Temperature exhibited a great effect on the mechanical properties of nanowires. Study on the mechanical properties of metal nanowires can give us more fundamental understanding of nanoscale machines from atomistic motions. The deformations of the nanowires were observed at low, middle, and high temperatures, respectively.

### **References**

[1] Gorlov NV Computer modeling of planar defects in ordered alloys of A3B and A3B (C), PhD thesis / NV Gorlov. - Tomsk 1987.

[2] Poletaev GM Atomic mechanisms of diffusion in metallic systems with fcc lattice, D.Sc. thesis. / GM Poletaev. - Barnaul 2006.

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В ДВУХСТУПЕНЧАТОМ УСТРОЙСТВЕ ДЛЯ НАПЫЛЕНИЯ**

Макарова Н.А. – аспирант, Яковлев В.И. – к.т.н., Ситников А.А. – д.т.н., профессор  
Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Технологии модификации поверхности служат для восстановления поверхности детали или придания ей особых свойств путем нанесения дополнительного покрытия [6]. Поверхностные покрытия занимают все более важную роль в промышленности. Это обусловлено повышением энергоэффективности и увеличением срока службы конструкций с напыленными покрытиями. Газотермическое напыление занимает уникальное положение в спектре технологий модификации поверхности по сравнению с другими технологиями нанесения покрытий, такими как гальванопластика [3]. Методом газотермического напыления можно наносить металлы, сплавы, керамические материалы, пластики и композиты [4].

Газотермическое напыление (ГТН) – это процесс нагрева, диспергирования и переноса конденсированных частиц распыляемого материала газовым потоком и формирование на подложке компактного слоя материала [6].

Существует несколько методов ГТН, хорошо зарекомендовавших себя в решении различных задач напыления. На рисунке 1 представлена сравнительная диаграмма наиболее распространенных методов ГТН в зависимости от скорости, до которой разгоняются напыляемые частицы и температуры их нагрева [5].

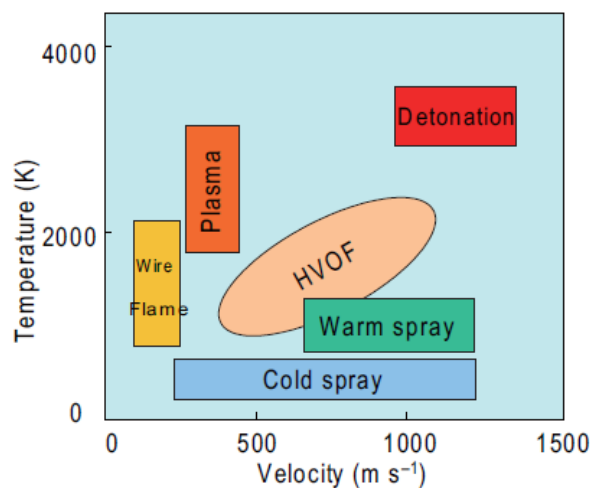


Рис.1. Диаграмма методов ГТН в зависимости от скорости (Velocity) и температуры (Temperature) частиц, где wire flame – газопламенное напыление, plasma – плазменное напыление, detonation – детонационное напыление, HVOF – высокоскоростное напыление, cold spray – холодное напыление, warm spray – «теплое» напыление.

Каждый из существующих методов хорошо зарекомендовал себя применительно к определенным типам задач. При этом потребности производства диктуют необходимость разрабатывать новые способы нанесения покрытий [4].

Так, японские ученые Сэйдзи Курода, Дзин Кавакита, Макото Ватанабэ (Национальный институт материаловедения) и Хироси Катанода из г. Кагошима успешно применили [3] подход к нанесению покрытий, заключающийся в разгоне частицы до скоростей, достаточных для достижения уровня кинетической энергии, достаточного для пластичного взаимодействия с подложкой. Warm spraying («теплое» напыление) – метод напыления, идея которого основана на смешении инертного газа (азота) и реагирующей смеси для контроля над температурой частиц [2].

Исследователями продемонстрированы возможности данного метода при напылении титана [1,2,3]. При этом отмечаются значительные недостатки метода, такие как значительное количество паров воды, непрореагировавшего топлива и кислорода [3].

Авторами была разработана методика проведения виртуального эксперимента по процессу распространения детонационной волны в камере и стволе устройства для детонационного напыления и проведено исследование скорости распространения потока в двухступенчатой детонационной камере. Исследование проводилось конечно-элементной методикой Вычисляемая жидкостная динамика (Computational Fluid Dynamics - CFD) в среде Ansys Workbench.

Конструкция установки преследует две цели: добиться максимальной скорости продуктов реакции и снизить температурное влияние на частицы напыляемого порошка.

Для увеличения скорости продуктов реакции используется прием профилирования канала, т.е. добавления в схему устройства турбулизирующих камер. На рисунке 3 показаны результаты виртуального эксперимента над моделями устройства с одной турбулизирующей камерой. Как было показано в [7] использование более двух камер нецелесообразно.

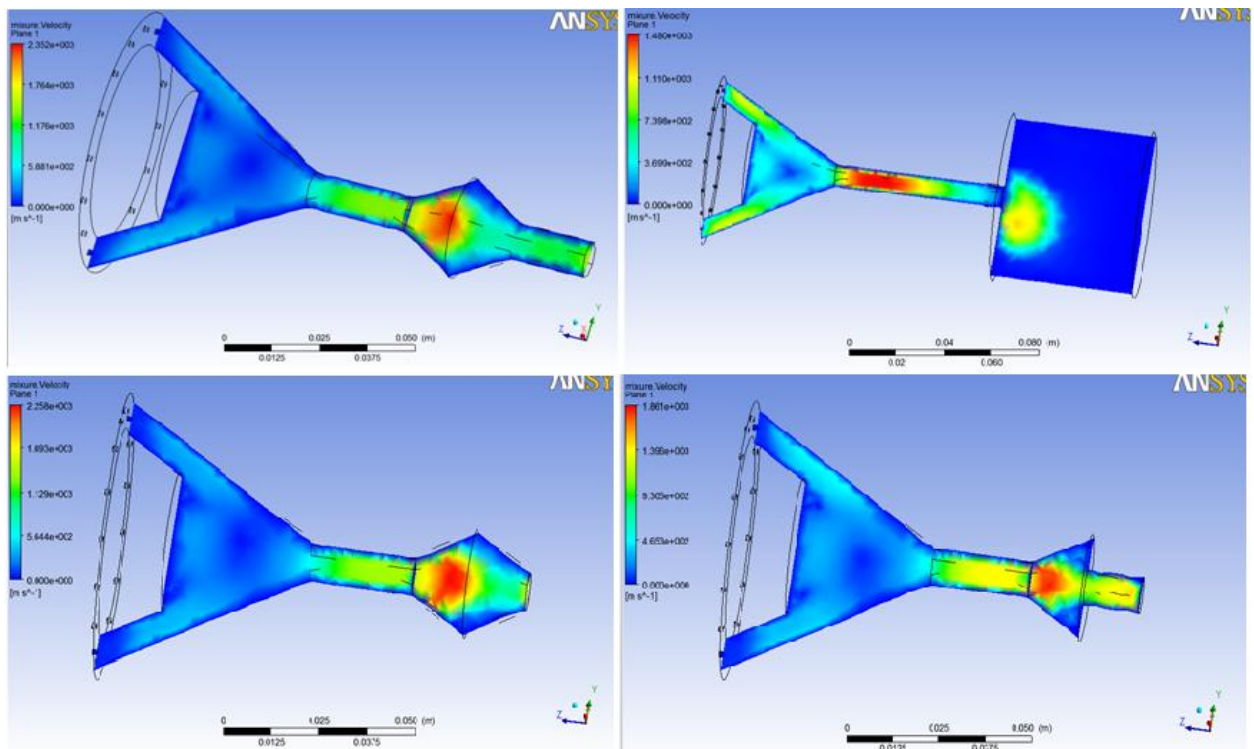


Рисунок 3 – конструкции устройства для детонационного напыления покрытий: а) с двумя стабилизирующими участками и конусно-обратноконусной насадкой; б) с одним длинным стабилизирующим участком и цилиндрической камерой; в) с одним стабилизирующим участком и конусно-обратноконусной насадкой; г) с двумя стабилизирующими участками и конусной насадкой

Наилучшие результаты скорости газовой смеси наблюдаются в камере с двумя стабилизирующими участками (по 30 мм.) и турбулизирующей камерой с конусной и обратно-конусной частями (рисунок 3 а). При такой конструкции поток газа достигает скорости порядка 2000 м/с.

Для дальнейшей оптимизации на выходном участке ствола устройства используется сопло по аналогии с соплами, используемыми в технологии холодного напыления [6].

Газодинамический конечно-элементный анализ (рисунок 4) показывает значительное увеличение скорости продуктов детонации (выше 2500 м/с).

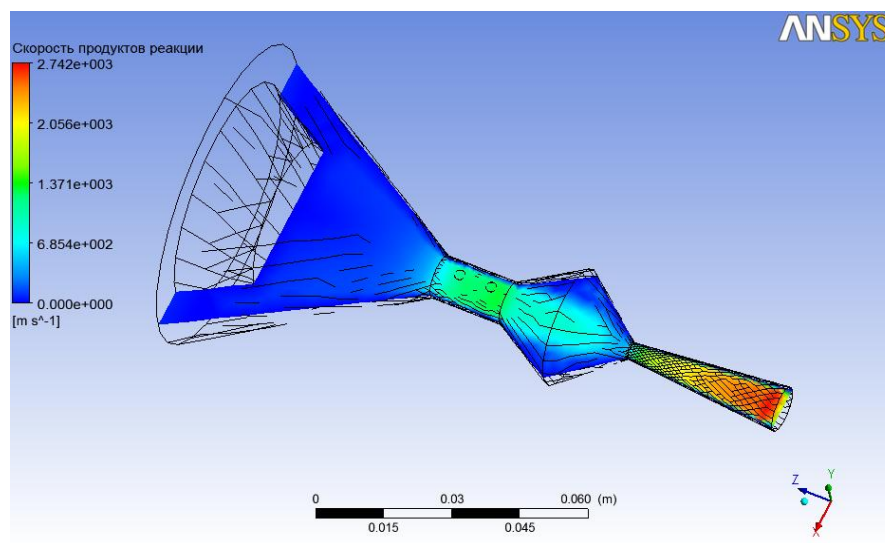


Рисунок 4 – Диаграмма распределения скоростей в двухфазном (продукты детонации – инертный газ) потоке в модели устройства для детонационного напыления

Таким образом, методом компьютерного моделирования была проведена оптимизация геометрии устройства для детонационного моделирования для достижения максимальных показателей скорости потока. Результаты моделирования свидетельствуют о возможности достижения скорости продуктов детонации порядка 2500 м/с при конструкции устройства со стабилизирующим участком, одной турбулизирующей насадкой с конусной и обратно-конусной частями и сверхзвуковым соплом на выходном участке.

Литература:

1. Kim K., Kuroda S., Watanabe M/ Microstructural Development and Deposition Behavior of Titanium Powder Particles in Warm Spraying Process: From Single Splat to Coating / *Jornal of Thermal Spray Technology*, 2010 vol. 19 (6), pp. 1254-1264.
2. Kim K., Kuroda S., Watanabe M., Huang R., Fukanuma H., Katanoda H. Comparison of Oxidation and Microstructure of Warm-Sprayed and Cold-Sprayed Titanium Coatings / *Jornal of Thermal Spray Technology*, 2012 vol. 21 (3-4), pp. 550-560.
3. Kuroda S., Kawakita J., Watanabe M., Katoda H. Warm spraying—a novel coating process based on high-velocity impact of solid particles / *Sci. Technol. Adv. Mater.*, 2008, 9(3), p 033002 (17 pp).
4. Pawlowski L. *The Science and Technology of Thermal Spray Coatings* / L. Pawlowski. – New York: Wiley, 2006 – 644 p.
5. Yokoyama K., Watanabe M., Kuroda S., Gotoh Y., Schmidt T., Gertner F. / *Simulation of Solid Particle Impact Behavior for Spray Processes.* / *Materials Transactions*, Vol. 47, No. 7 (2006) pp. 1697-1702.
6. Газотермическое напыление: учебное пособие / кол. авторов; под общей ред. Л.Х. Балдаева. – М: Маркет ДС, 2007. – 344 с.
7. Смирнов Н.Н., Никитин В.Ф. Влияние геометрии канала и температуры смеси на переход горения в детонацию в газах / *Физика горения и взрыва*, 2004. – Т.40 (№2), с. 68-83.

## ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ДИФФУЗИОННУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В МЕТАЛЛАХ

Дмитриенко Д.В. - аспирант, Дябденков В.В. - аспирант,

Полетаев Г.М. – д.ф.-м.н., профессор

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Тройной стык зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три различно ориентированных зерна или три зернограницных поверхности. В некоторых работах указывается на различие свойств тройных стыков и составляющих их границ зерен. Принято считать, что диффузия в области тройных стыков протекает более интенсивно, чем вдоль границ зерен [1, 2]. Однако в сравнительно недавних работах [3-5], выполненных с помощью компьютерного моделирования, говорится, что диффузионные проницаемости границ зерен и тройных стыков могут иметь один и тот же порядок. Вместе с тем, в упомянутых работах моделирование проводилось без учета взаимодействия границ зерен и тройных стыков с другими дефектами кристаллической структуры (например, точечными дефектами, решеточными дислокациями и др.), которые, как известно, в реальных поликристаллах сорбируются границами и способны оказывать влияние на их диффузионную проницаемость.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики влияния точечных дефектов на интенсивность самодиффузии вдоль тройных стыков большеугловых границ наклона и границ смешанного типа на примере никеля.

Тройной стык границ зерен в молекулярно-динамической модели создавался в центре расчетного блока, содержащего около 40000 атомов. Межатомные взаимодействия описывались с помощью многочастичного потенциала Клери-Розато [6], построенного в

рамках модели сильной связи. В работе рассматривались тройные стыки, образованные мало- и большеугловыми границами наклона  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$ , и тройные стыки, образованные границами смешанного типа. Для приведения структуры расчетного блока в равновесное состояние (в данных условиях) проводилась динамическая релаксация структуры при температуре 1500 К с последующим охлаждением до 0 К.

Точечные дефекты вводились в область тройного стыка путем удаления атомов (в случае вакансий) или их добавления (в случае междоузельных атомов). Количество вводимых дефектов варьировалось от 1 до 10. После введения точечных дефектов также проводилась релаксация структуры с последующим охлаждением. Полученные таким образом расчетные блоки являлись стартовыми при моделировании самодиффузии.

Для исследования влияния точечных дефектов на интенсивность самодиффузии в области тройного стыка моделировался процесс продолжительностью 300 пс при температуре 1500 К ( $0.86 \cdot T_m$ , где  $T_m$  – температура плавления никеля). По окончании эксперимента расчетные блоки охлаждались до 0 К во избежание влияния тепловых колебаний атомов на расчет коэффициента диффузии.

На рис.1 приведены типичные картины атомных смещений вблизи тройного стыка границ наклона  $\langle 111 \rangle$  и границ смешанного типа, образующиеся в процессе компьютерного эксперимента в течение 300 пс при температуре 1500 К. Для тройного стыка границ наклона  $\langle 100 \rangle$  картина атомных смещений качественно аналогична картине, полученной для границ  $\langle 111 \rangle$ .

Несмотря на относительно высокую температуру, диффузионные смещения атомов происходили в сравнительно узких каналах вдоль границ зерен, имеющих, согласно [5], ширину диффузионного канала около 5 Å. При сравнении интенсивности атомных смещений вдоль границ зерен и тройных стыков преобладания диффузии вдоль стыков не наблюдалось. Согласно полученным картинам сравниваемые интенсивности были примерно одного порядка. В работе [5] было получено, что диффузионный радиус тройных стыков, то есть эффективный радиус диффузионного канала, колеблется в пределах 3–5 Å в зависимости от типа образующих стык границ зерен.

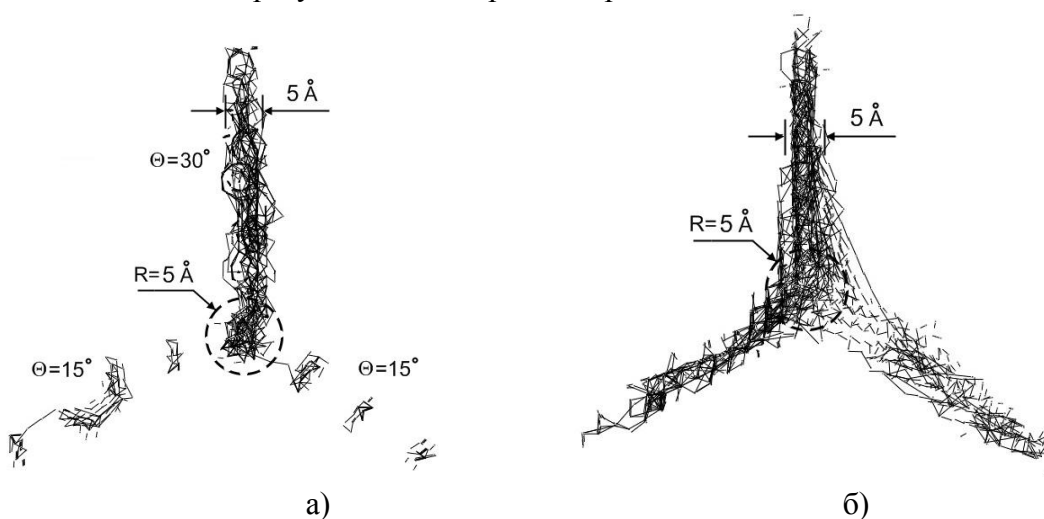


Рис.1. Атомные смещения в проекции на плоскость XY (изображены отрезками) вблизи тройного стыка границ наклона  $\langle 111 \rangle$  с углами разориентации 15°, 15° и 30° (а) и тройного стыка границ смешанного типа (б) в процессе компьютерного эксперимента в течение 300 пс при температуре 1500 К. Смещения менее 0.7 Å не показаны.

Тройной стык в модели был ориентирован вдоль оси цилиндрического расчетного блока, поэтому оценка интенсивности самодиффузии производилась по коэффициенту диффузии вдоль оси Z:

$$D_{TJ} = \frac{\sum_{i=1}^N (z_{0i} - z_i)^2}{2Nt} \quad (2)$$

Здесь  $z_{0i}$  и  $z_i$  – начальные и конечные координаты  $i$ -го атома по оси  $Z$ ;  $N$  – число атомов в расчетной области;  $t$  – время компьютерного эксперимента.

Расчетная область при определении коэффициента диффузии вдоль тройного стыка имела форму цилиндра радиусом  $5 \text{ \AA}$  и длиной в расчетный блок. В компьютерной программе имелась возможность совмещать центр расчетной области с линией тройного стыка, опираясь на полученную в процессе моделирования картину атомных смещений (рис.1). На рис.2 приведены зависимости коэффициента самодиффузии вдоль трех рассматриваемых тройных стыков при температуре  $1500 \text{ K}$  от числа введенных точечных дефектов.

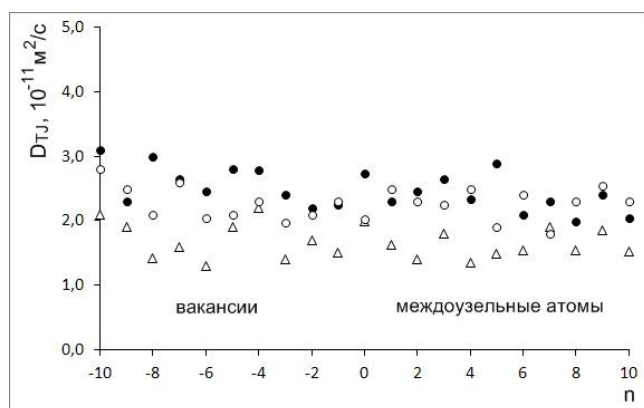


Рис.2. Зависимость коэффициента самодиффузии вдоль тройного стыка (радиус стыка принимался равным  $5 \text{ \AA}$ ) от числа введенных точечных дефектов. Отрицательные значения  $n$  – вакансии, положительные – междоузельные атомы. Черные круглые маркеры – для тройного стыка границ наклона  $\langle 111 \rangle$ ; белые круглые – для тройного стыка границ наклона  $\langle 100 \rangle$ ; треугольные – для тройного стыка границ смешанного типа.

Известно, что точечные дефекты существенно влияют на интенсивность диффузии в чистом кристалле. Однако в данной работе заметного влияния на интенсивность самодиффузии вдоль тройного стыка обнаружено не было: коэффициент диффузии при различном числе введенных дефектов оставался тем же в пределах погрешности вычислений ( $1-3 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ ). В первую очередь это было связано с тем, что часть введенных в область тройного стыка дефектов в процессе моделирования мигрировали в границы зерен. Это наблюдалось для обоих типов дефектов. Диффузионная проницаемость стыков для всех трех типов образующих стык границ зерен (большеугловых наклона  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$  и смешанного типа) была примерно одинаковой, что уже отмечалось в работе [5]. Стыки, образованные малоугловыми или специальными границами, ввиду их относительно более упорядоченной структуры, по всей видимости, должны иметь относительно меньшую проницаемость.

Таким образом, как показало молекулярно-динамическое моделирование, интенсивность самодиффузии вдоль тройного стыка практически не зависит от числа введенных точечных дефектов обоих знаков (при введении до 10 точечных дефектов на  $75 \text{ \AA}$  длины тройного стыка). Это объясняется тем, что часть дефектов в процессе компьютерного эксперимента мигрирует в образующие стык границы зерен и распределяется в них.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов №13-02-00301\_a, №12-08-98046-p\_сибирь\_a, №12-02-98000-p\_сибирь\_a.*

#### Литература

1. Palumbo G. and Aust K.T. A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials // Scripta Metallurgica et Materialia, V.24, (1990) p.1771-1776.



2. Протасова С.Г., Сурсаева В.Г., Швиндлерман Л.С. Исследование движения индивидуальных тройных стыков в алюминии // Физика твердого тела. 2003. Т.45. №8. С. 1402-1405.

3. Frolov T., Mishin Y. Molecular dynamics modeling of self-diffusion along a triple junction // Physical Review B. 2009. V.79. P. 174110 (5).

4. Lipnitskii A.G., Nelasov I.V., Kolobov Yu.R. Self-Diffusion Parameters of Grain Boundaries and Triple Junctions in Nanocrystalline Materials // Defect and Diffusion Forum. 2011. V. 309-310. P. 45-50.

5. Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Дябденков В.В., Микрюков В.Р., Старостенков М.Д. Исследование диффузионной проницаемости тройных стыков границ зерен в никеле методом молекулярной динамики / В кн.: Влияние высокоэнергетических воздействий на структуру и свойства конструкционных материалов. В 2-х т. / Под ред. В.Е. Громова. - Новокузнецк: Изд-во «СибГИУ». Т. 1. 2013. - С. 252-259.

6. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V.48., №1. P. 22-33.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ДИФфуЗИОННОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ Ni-Al

Санников А.В. - аспирант, Полетаев Г.М. – д.ф.-м.н., профессор

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

На границе фаз может возникнуть ситуация, качественно аналогичная той, которая имеет место на границе кристаллов одной фазы, то есть на границах зерен: в определенных условиях возможно ускорение диффузионного переноса вещества вдоль межфазных границ, что имеет подтверждение в экспериментальной практике [1, 2]. Дислокации, характерные для межфазных границ, образуются не только в результате разориентации контактирующих кристаллов (как в случае границ зерен), но и вследствие несоответствия параметров решеток фаз (так называемые дислокации несоответствия) [2]. В работах [1, 2] отмечается, что из-за несовершенства структуры границы фаз могут обнаруживать высокую диффузионную проницаемость, в некоторых случаях даже более высокую, чем границы зерен. Ранее, в работе [3], при исследовании диффузии по межфазной границе Ni-Al в двухмерной модели было выяснено, что дислокации несоответствия играют ключевую роль в миграции атомов вблизи границы.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики атомной структуры межфазной границы Ni-Al (в трехмерной модели) и механизма диффузии вдоль нее в условиях твердофазного контакта. В работе рассматривались ориентации межфазной границы в плоскостях (100) и (111). В качестве металлической системы была взята система, состоящая из двух ГЦК металлов Ni и Al с параметрами решеток 3,52 и 4,05 Å соответственно.

Межфазная граница создавалась в центре расчетного блока (рис.1). Плоскость границы имела ориентацию (100) или (111). Размеры блока подбирались таким образом, чтобы вдоль межфазной границы можно было использовать периодические граничные условия. То есть вдоль осей X и Y на рис.1 имитировалось бесконечное повторение расчетного блока. Вдоль оси Z были наложены жесткие условия, - атомам вблизи поверхностей расчетного блока, параллельных плоскости границы, в процессе компьютерного эксперимента не позволялось двигаться (на рис.1 жестко закрепленные атомы показаны темно-серым цветом). Количество атомов в расчетном блоке составляло от 15000 до 20000. Для приведения структуры расчетного блока в равновесное состояние (в данных условиях) проводилась структурная релаксация методом молекулярной динамики. При описании межатомных взаимодействий использовались парные потенциалы Морзе, параметры которых были взяты из работы [4].

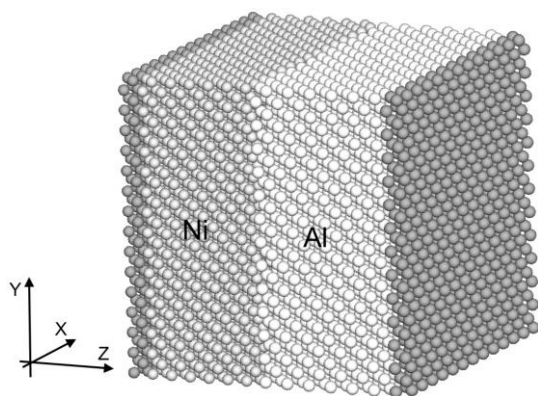


Рис.1. Расчетный блок с межфазной границей Ni-Al (100). Вдоль осей X и Y наложены периодические граничные условия. Атомам, окрашенным в темно-серый цвет, в процессе компьютерного эксперимента двигаться запрещалось (жесткие граничные условия вдоль оси Z).

В процессе структурной релаксации, в ходе которой происходило сопряжение фаз Ni и Al, на межфазной границе образовывались дислокации несоответствия. Они возникали в результате несоответствия параметров решеток контактирующих фаз. На рис.2 изображены распределения свободного объема в плоскости межфазной границы. Визуализация свободного объема осуществлялась путем расчета среднего расстояния от каждого атома до ближайших атомов. Если среднее расстояние незначительно отличалось от расстояния, соответствующего идеальному кристаллу, атом не изображался. В противном случае атом закрашивался в тот или иной оттенок серого цвета. Черный цвет соответствует наличию вблизи данного атома свободного объема, примерно равного объему вакансии, то есть, как если бы вблизи рассматриваемого атома находилась вакансия. На рис.2 отчетливо видны ядра краевых дислокаций несоответствия, которые в случае границы (100) образуют сетку с квадратными ячейками, состоящую из двух систем дислокаций, а в случае границы (111) – сетку с треугольными ячейками, состоящую из трех систем дислокаций.

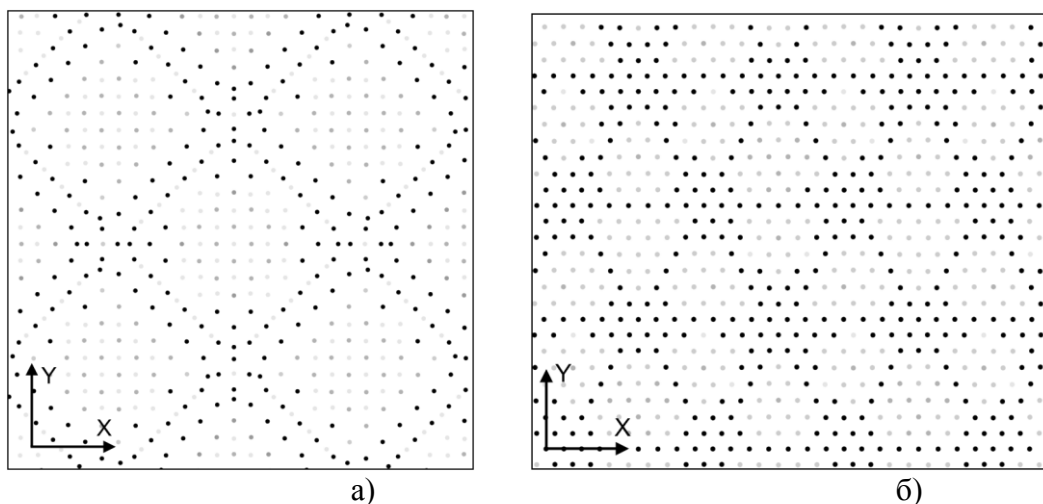


Рис.2. Изображение дислокаций несоответствия на границах Ni-Al (100) (а) и (111) (б) с помощью визуализатора свободного объема (чем темнее атом, тем больше вокруг него свободного объема).

При исследовании диффузии вдоль межфазной границы для каждой заданной температуры в конце молекулярно-динамического эксперимента рассчитывался коэффициент диффузии отдельно для атомов Ni и Al. Температура в процессе эксперимента удерживалась постоянной. Коэффициент диффузии вдоль плоскости XY (плоскости границы) рассчитывался как среднее арифметическое коэффициентов диффузии вдоль осей X и Y. На рис.3 приведены графики зависимостей  $\ln(D)$  от  $T^{-1}$ . Как видно, атомы Al диффундируют вдоль межфазной границы интенсивнее, чем атомы Ni. Это связано с тем, что связи Ni-Ni и Ni-Al значительно крепче связи Al-Al, вследствие чего дефектные области (в виде ядер дислокаций несоответствия) содержат преимущественно атомы Al.

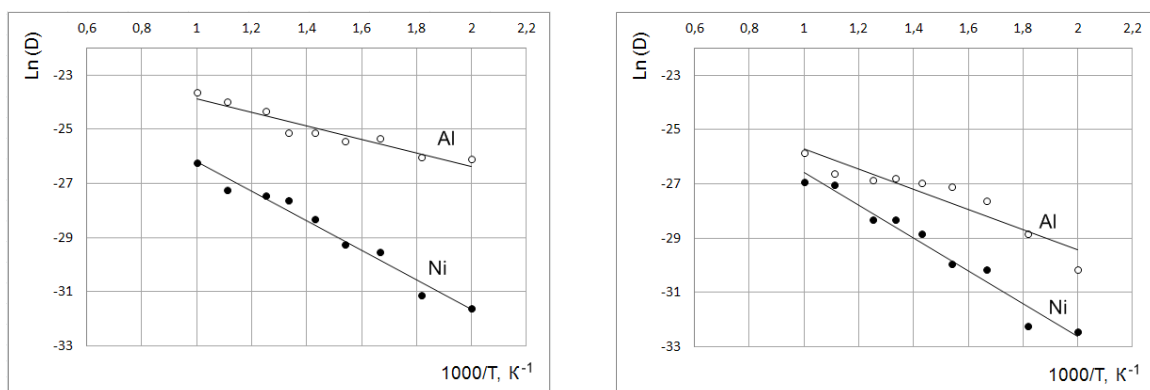


Рис.3. Зависимости  $\ln(D)$  от  $T^{-1}$  для диффузии атомов Al и Ni вдоль межфазных границ (100) (а) и (111) (б) в условиях твердофазного контакта и плоской границы.

По наклону зависимостей  $\ln(D)$  от  $T^{-1}$  были найдены энергии активации диффузии вдоль межфазной границы атомов Al и Ni: для границы (100) 0,22 и 0,48 эВ, для границы (111) 0,32 и 0,52 эВ соответственно. Диффузия вдоль границы (111) протекала менее интенсивно, чем вдоль границы (100).

Атомный механизм диффузии исследовался с помощью визуализатора атомных смещений относительно начальных положений. Смещения атомов визуализировались программой непосредственно в процессе компьютерного эксперимента, что позволяло наблюдать смещения атомов в динамике. На рис.4 изображены примеры картин атомных смещений вдоль межфазной границы в процессе компьютерного эксперимента. Как видно, смещения атомов происходят преимущественно вдоль ядер дислокаций несоответствия. Более отчетливо это видно на примере границы (100) (рис.4 а), где плотность дислокаций не такая высокая, как в случае границы (111).

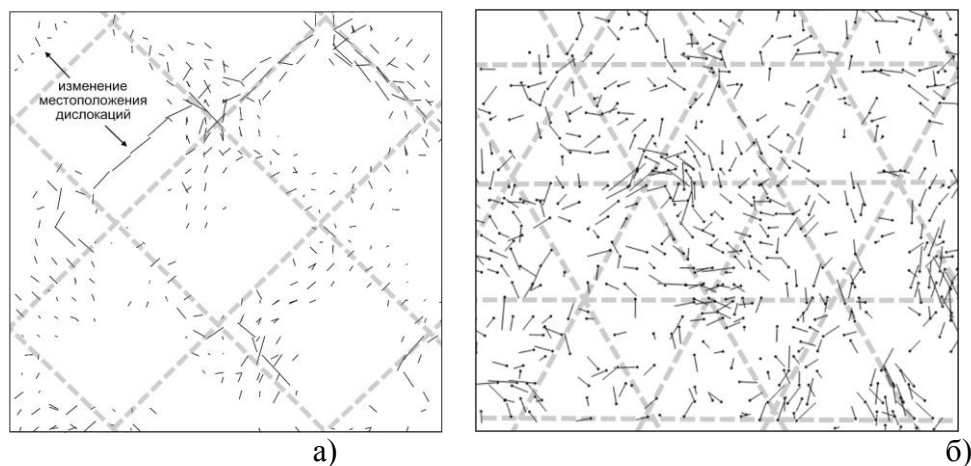


Рис.4. Миграции атомов в плоскости межфазной границы Ni-Al: а) (100) при температуре 700 К в течение 40 пс; б) (111) при температуре 900 К в течение 150 пс. Смещения атомов изображены черными отрезками. Серыми жирными прерывистыми линиями показаны примерные положения дислокаций несоответствия.

Таким образом, с помощью метода молекулярной динамики в настоящей работе показано, что на межфазной границе Ni-Al формируется сетка краевых дислокаций несоответствия (квадратная из двух систем дислокаций для границы (100) и треугольная из трех систем для границы (111)), играющих ключевую роль в диффузии вблизи межфазной границы при твердофазном контакте. Атомы мигрируют преимущественно вдоль ядер дислокаций. Кроме того, было выяснено, что атомы Al диффундируют вдоль границы интенсивнее, чем атомы Ni.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов №13-02-00301\_а, №12-08-98046-р\_сибирь\_а, №12-02-98000-р\_сибирь\_а.*

## Литература

1. Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах. М.: Металлургия, 1978. 248 с.
2. Бокштейн С.З., Болберова Е.В., Игнатова И.А., Кишкин С.Т., Разумовский И.М. Влияние величины несоответствия параметров решеток фаз на диффузионную проницаемость межфазных границ // Физика металлов и металловедение. 1985. Т.59. №5. С. 938-942.
3. Полетаев Г.М., Кобзарь Л.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование механизмов диффузии вблизи границы раздела Ni и Al в условиях твердофазного контакта // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2009. - №4. - С. 111-115.
4. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  // ФММ. - 1984. - Т.58, №2. - С. 336-343.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В МЕДИ

Богданов А.С. – студент, Демьянов Б.Ф. – д.ф.-м.н., профессор

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

В настоящее время подавляющее большинство конструкционных металлических материалов используется в промышленности в виде поликристаллов, и границы зерен (ГЗ) являются их неотъемлемой частью.

Формирование поликристаллической структуры происходит при кристаллизации, рекристаллизационном отжиге, в процессе деформации [1].

Исследованию ГЗ в последние годы уделяется большое внимание. Это связано и с большим влиянием ГЗ на многие важные свойства поликристаллов (предел текучести, вязкость, пластичность, рекристаллизация, диффузия, ползучесть и др.).

Одной из наиболее важных характеристик зернограничного ансамбля является зависимость энергии границ зерен от угла разориентации зерен  $E=E(\theta)$ . Несмотря на большое количество экспериментальных данных и теоретических расчетов, исследование вида этой зависимости и ее особенностей все еще находится на начальной стадии. Это связано с большой трудоемкостью экспериментального определения спектров разориентировок в поликристаллах.

Целью данной работы является определение энергии ГЗ в меди, используя двойниковые границы.

Имеется два основных экспериментальных метода определения абсолютных значений энергии границ зерен: метод Херринга (по структурно-энергетическим особенностям границ зерен, сходящихся в тройном стыке) и метод Маллинза [1, 2] (по двугранному углу, образованному склонами канавки термического травления границы). Эти методы аналогичны, так как основаны на исследовании равновесия системы трех границ раздела [2, 3].

Образец металла Cu был подвергнут длительному отжигу в вакууме, который привел к формированию равновесной структуры (рис. 1). Зерна имеют равноосный характер. Увеличился размер зерен, что привело к понижению суммарной энергии межзеренной поверхности. Среднее значение размера зерен составляет 48 мкм. Отдельные зерна достигают 95 мкм.

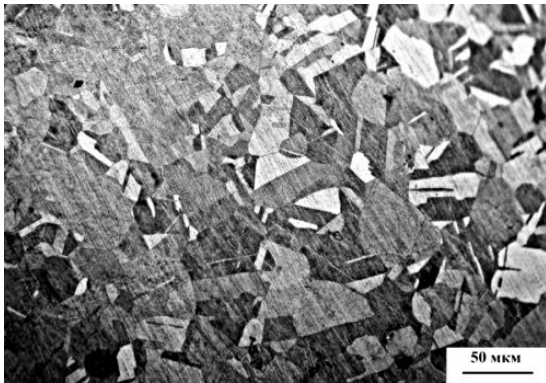


Рис. 1. Микроструктура металла Cu после отжига.

Основной задачей отжига является формирование равновесной структуры тройных стыков. Под действием сил поверхностного натяжения при высоких температурах происходит миграция ГЗ и в тройном стыке должно наблюдаться равновесие сил поверхностного натяжения. Это позволяет определить энергию ГЗ образующих тройной стык по методу предложенному Херрингом.

Экспериментальные методы определения энергии ГЗ, такие как тройной стык и канавки травления дают лишь приближенные значения зернограничной энергии. Например, для определения энергии в тройном стыке границ необходимо знать энергию хотя бы одной из них.

На рис. 2 показана конфигурация соответствующего тройного стыка, содержащая двойниковую границу. Поскольку энергия двойниковой границы почти на порядок ниже энергии ГЗ, в тройном стыке должен присутствовать тупой угол. Линия стыка здесь также перпендикулярна к плоскости рисунка.



Рис. 2. Схема тройного стыка ГЗ металла Cu, содержащего двойниковую границу.

В меди присутствует большое количество двойников отжига (рис.1). Высокая частота появления двойниковых границ связана с тем, что она имеет атомную структуру обладающую существенно меньшей энергией по сравнению с энергией ГЗ как общего так и специального типов. В модели решетки совпадающих узлов (PCY) двойниковая граница обозначается как ГЗ Σ3. Плоскость двойниковой границы совпадает с кристаллографической плоскостью (111). Теория дает величину энергии двойниковой границы равной удвоенному значению энергии дефекта упаковки (ДУ) [6]. Энергия ДУ достаточно точно и просто определяется по величине расщепления полной дислокации на частичные. Измерения в электронном микроскопе дают значения энергии ДУ в меди 40 мДж/м<sup>2</sup>. Следовательно энергия двойниковой границы может быть принята E<sub>Дв</sub>=80 мДж/м<sup>2</sup> [1, 5-7].

Двойниковая граница изменяет плоскость ГЗ на небольшой угол, поэтому можем предположить, что ГЗ являются границами общего типа с одинаковой энергией E<sub>ГЗ</sub>. В соответствии со схемой (рис. 2) можем записать условие равновесия тройного стыка, содержащего двойник:

$$E_{ГЗ} = E_{ГЗ} \cos\alpha + E_{Дв} \cos\beta$$

$$E_{ГЗ} = \frac{E_{Дс} \cos\beta}{1 - \cos\alpha} \quad (2)$$

Значения энергии ГЗ меди приведены в таблице 1. На рис. 3 а-г приведена микроструктура двойников в поликристалле меди.

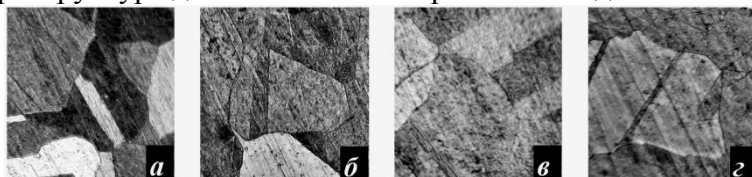


Рис. 3 а-г. Микроструктура двойников в поликристалле меди

Таблица 1. Значения энергии ГЗ меди.

Тройной стык	$\alpha$ , град.	$\beta$ , град.	$E_{ГЗ}$ , мДж/м <sup>2</sup>
рисунок 3 а	20	61	643
рисунок 3 б	19	65	620
рисунок 3 в	17	70	626
рисунок 3 г	23	50	647

Анализ полученных значений энергии ГЗ меди показал, что результаты хорошо согласуются со значениями, полученными в работах [4, 6, 8].

### Список литературы

1. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М: Атомиздат, 1972. - 600 с.
2. Копецкий Ч.В., Орлов А.Н., Фионова Л.К. Границы зерен в чистых материалах. - М.: Наука, 1987. - 160 с.
3. Brent L. Adams, Mapping the Grain-Boundary Character-(Free) Energy Linkage in Polycrystalline Materials, Textures and Microstructures, vol. 26, pp. 5–10, 1996
4. Мак Лин Д. Границы зерен в металлах.- М.: Metallurgizdat, 1960.- 322 с.
5. Коновалова Е.В., Конева Н.А., Перевалова О.Б., Козлов Э.В. Структура зернограничного ансамбля ГЦК однофазных поликристаллов /Физическая мезомеханика Т.3, №3, с. 15-22.
6. Вишняков Я.Д. Дефекты упаковки в кристаллической структуре. М., Metallurgiya, 1970. - 216 с.
7. G. J. L. van der Wegen, Bronsveld P. M., De Hosson J. T. M., On the determination of the stacking fault energy from extended nodes in Cu<sub>2</sub>NiZn, Metallurgical Transactions, Vol. 11A, 1980. - 1125.
8. Чувильдеев В.Н., Нохрин А.В., Пирожникова О.Э., Грязнов М.Ю., Лопатин Ю.Г., Смирнова Е.С. Физика новых материалов: Учебное пособие. - Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2010. - 105 с.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН

Лаптева О.М.– студент, Попов В.А. – д.ф.-м.н., профессор

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Интерференция-это взаимодействие волн, в результате которого устойчивая интерференционная картина, то есть не зависящее от времени распределение амплитуд результирующих колебаний в точке области, где волны накладываются друг на друга. При интерференции света интенсивность в области перекрытия световых волн имеет характер чередующихся светлых и темных полос.

Для моделирования распределения интенсивности будем использовать прикладную программу MATLAB.

Для описания поведения электромагнитной волны в вакууме воспользуемся уравнениями Максвелла:

$$\operatorname{div} \mathbf{H} = 0; \operatorname{div} \mathbf{E} = 0; \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}; \operatorname{rot} \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}.$$

Применим операцию вычисления ротора к обеим частям третьего уравнения. Полученное уравнение  $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \mathbf{H}$  преобразуем к виду  $\Delta \mathbf{E} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$  с использованием четвертого уравнения Максвелла и тождества  $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{E} - \Delta \mathbf{E}$  в котором в соответствие со вторым уравнением Максвелла  $\operatorname{div} \mathbf{E} = 0$ .

Чтобы получить волновое уравнение для напряженности магнитной составляющей электромагнитной волны, применим операцию вычисления ротора к обеим частям четвертого уравнения Максвелла. Полученное уравнение  $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \mathbf{E}$  преобразуем к виду  $\Delta \mathbf{H} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2}$  с использованием третьего уравнения Максвелла и тождества  $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{H} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{H} - \Delta \mathbf{H}$  в котором в соответствии с первым уравнением Максвелла  $\operatorname{div} \mathbf{H} = 0$ . Полученные волновые уравнения представим в виде:

$$\Delta \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}; \quad \Delta \mathbf{H} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2};$$

Здесь  $c = (\varepsilon_0 \mu_0)^{1/2}$  имеет значение равное скорости света в вакууме.

Для простоты рассмотрим волну, распространяющуюся вдоль оси  $x$ . Под  $f$  будем понимать компоненты векторов  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  в декартовой системе координат. Непосредственной подстановкой нетрудно убедиться в том, что решением волнового уравнения

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$$

являются произвольные функции аргумента  $(x \pm ct)$ :

$$(x, t) = f_1(x - ct) + f_2(x + ct).$$

$f_1(x - ct)$  описывает волну, распространяющуюся в направлении положительных значений оси  $x$ ,  $f_2(x + ct)$  - в обратном направлении. Таким образом, произвольные по форме волны с векторами  $\mathbf{E} = E x \pm ct$ ,  $\mathbf{H} = H x \pm ct$  должны удовлетворять волновому уравнению. Выберем для простоты волны синусоидальной формы. Пусть напряженность электрического поля  $E(r, t)$ , в точке, удаленной от источника на расстояние  $r$ , определяется следующим выражением:

$$E(r, t) = \frac{A}{r} \cos \left( \frac{2\pi}{\lambda} r + \frac{2\pi}{T} t + \varphi \right),$$

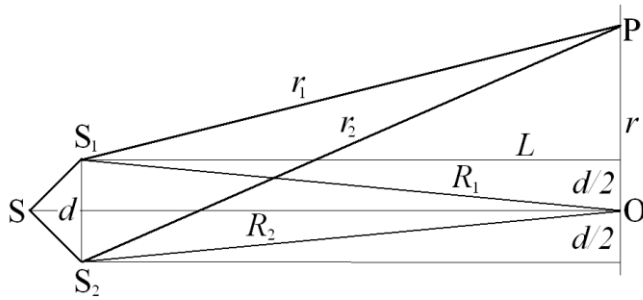
где  $A$  - амплитуда волны,  $\varphi$  - начальная фаза волны, которую далее будем полагать равной нулю. Заметим, что напряженность электрического поля световой волны убывает обратно пропорционально расстоянию  $r$  между источником и точкой наблюдения.

Классическим примером интерференции световых волн является опыт Юнга с двойной щелью.

Пусть источник света  $S$ , излучающий свет только одной частоты, помещен на одинаковом расстоянии от двух одинаковых отверстий  $S_1$  и  $S_2$ , расстояние между которыми равно  $d$ .

При этом размеры отверстий таковы, что их можно считать точечными источниками света, излучающими волны с одинаковой частотой и фазой.

На расстоянии  $L$  от отверстий  $S_1$  и  $S_2$  расположен экран, на котором наблюдается распределение интенсивности волны, являющейся результатом интерференции волн, исходящих от отверстий  $S_1$  и  $S_2$ .



Электромагнитная волна, излучаемая монохроматическим источником света, является сферической волной. В соответствии с принципом суперпозиции полное электрическое поле, создаваемое двумя источниками  $S_1$  и  $S_2$  в точке  $P$ , равно

$$E = E_1 + E_2 = \frac{A}{r_1} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} r_1 + \frac{2\pi}{T} t\right) + \frac{A}{r_2} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} r_2 + \frac{2\pi}{T} t\right).$$

Для вычисления интенсивности  $I$  волны в точке  $P$  выполним усреднение квадрата напряженности по времени за период колебания

$$I \sim \langle E^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T E^2 dt$$

Введем безразмерную переменную  $\xi = t/T$ . Тогда результат вычисления этого интеграла

$$\langle E^2 \rangle = \int_0^1 \left( \frac{A}{r_1} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} r_1 - 2\pi\xi\right) + \frac{A}{r_2} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} r_2 - 2\pi\xi\right) \right)^2 d\xi$$

можно представить в следующем виде:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{A^2}{2r_1^2} + \frac{A^2}{2r_2^2} + \frac{A^2}{r_1 r_2} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} r_1 - \frac{2\pi}{\lambda} r_2\right).$$

Пусть  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор, указывающий положение точки  $P$  на экране относительно точки наблюдения  $O$ , выбранной, например, в центре экрана. Тогда

$$r_1 = r - R_1, \quad r_2 = r - R_2$$

Здесь  $R_1$  и  $R_2$  – вектора, указывающие положение источников  $S_1$  и  $S_2$

относительно этой же выбранной точки наблюдения  $O$ . В соответствии с теоремой Пифагора

$$r_1^2 = L^2 + \left(r - \frac{d}{2}\right)^2, \quad r_2^2 = L^2 + \left(r + \frac{d}{2}\right)^2.$$

Построим график полученной зависимости  $\langle E^2 \rangle$  от  $r$ .

Пусть  $L=5$  м,  $d=0.003$  м,  $\lambda = 0.3 \cdot 10^{-5}$  м. В качестве амплитуды напряженности выберем значение  $A=1$  В/м.

Построим график полученной зависимости:

$A=1$ ;

$L=5$ ;

$d=0.003$ ;

$\lambda=0.3 \cdot 10^{-5}$ ;

$r_m=0.05$ ;

$m=2001$ ;

$dr=r_m/(m-1)$ ;

$w=2 \cdot \pi / \lambda$ ;

for  $i=1:m$

$r(i)=dr \cdot (i-1)$ ;

$r_1=\sqrt{L^2+(r(i)+d/2)^2}$ ;

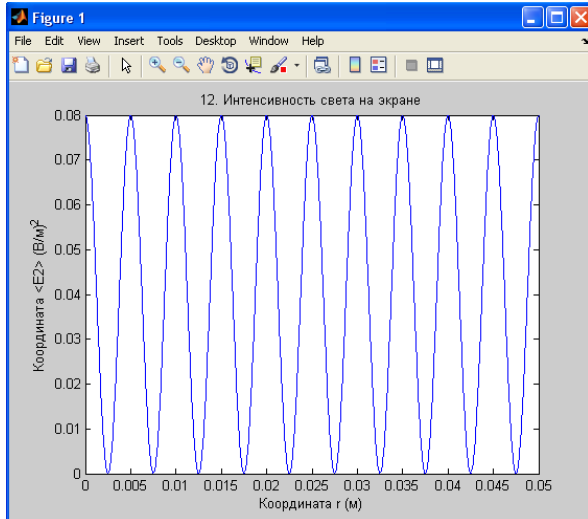
$r_2=\sqrt{L^2+(r(i)-d/2)^2}$ ;



```

E2(i)=A^2*(0.5/r1^2+0.5/r2^2+cos(w*(r1-r2))/r1/r2);
end;
plot(r,E2);
title(['12. Интенсивность света на экране']);
xlabel('Координата r (м)');
ylabel('Координата <E2> (В/м)^2');

```



### Список используемой литературы:

1. Попов В.А. Математические методы моделирования физических процессов: Учебно-практическое пособие /Алт. госуд. технич. ун-т им. И.И. Ползунова. Барнаул, 2011. – 195 с.
2. Савельев И.В. Курс физики. Т.2. Электричество. Колебания и волны. Волновая оптика: Учебное пособие. - СПб.: Лань, 2006. - 480 с.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ГВОЗДЯ, ВБИВАЕМОГО В ДЕРЕВО .

Нояк Д.В – студент.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Гвоздь – это крепежное изделие заостренное с одного конца и имеющее на втором конце “шляпку”. Гвозди предназначены для получения неразъемных соединений различных материалов (обычно деревянных) между собой. Путём забивания молотком осуществляется внедрение гвоздя в тела соединяемых деталей, в которых гвоздь удерживается силой трения.

Рассмотрим задачу о свободных продольных колебаний гвоздя, имеющий форму стержня, со свободными концами, получившего в начальный момент времени продольный импульс  $I$  в один из концов. На каждый участок стержня единичной массы действуют силы сухого трения, равные  $m$ .

Для решения данной задачи воспользуемся дифференциальным уравнением свободных колебаний стержня, испытывающего воздействие сил сухого трения  $m$

$$\frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial t^2} = m + a^2 \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0$$

$$\text{с начальными условиями } U(x, 0) = j(x), \quad \frac{\partial U(x, 0)}{\partial t} = y(x), \quad 0 \leq x \leq l$$

$$\text{и при краевыми условиями } U(0, t) = 0, \quad \frac{\partial U(l, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0.$$

Здесь  $m$ - сила трения-скольжения, действующая на каждый участок стержня единичной массы. Эта сила направлена в сторону, противоположную скорости движения

рассматриваемого участка стержня, когда силы трения-скольжения не превосходят сил упругости стержня; в противном случае эта сила равна силе трения-покоя.

Выполним замену  $v(x,t) = U(x,t) - \mu t^2 / 2$ . Тогда исходная краевая задача может быть сформулирована в форме:

$$\frac{\partial^2 v(x,t)}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 v(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0$$

$$\text{с начальными условиями } v(x,0) = \phi(x), \quad \frac{\partial v(x,0)}{\partial t} = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l$$

$$\text{и при краевыми условиями } v(0,t) = 0, \quad \frac{\partial v(l,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0.$$

Для решения данного уравнения применим метод Фурье (метод разделения переменных). Метод Фурье состоит в том, что мы находим частные решения уравнения удовлетворяющие краевым условиям, вида

$$v(x,t) = X(x) \cdot T(t)$$

Подставляя это произведение в уравнение свободных колебаний стержня, получим  $X(x) \cdot T''(t) = a^2 \cdot X''(x) \cdot T(t)$ , которое после деления на  $a^2 \cdot T(t) \cdot X(x)$  примет вид

$$\frac{1}{a^2} \cdot \frac{T''(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda$$

Так как правая часть этого равенства зависит только от  $X$ , а левая – только от  $t$ , то при изменении своих аргументов, они сохраняют постоянное значение. Обозначим это постоянное значение через  $-\lambda$ . Тогда получим два дифференциальных уравнений

$$X''(x) + \lambda \cdot X(x) = 0 \quad \text{и} \quad T''(t) + \lambda \cdot a^2 \cdot T(t) = 0.$$

Нетривиальное решение первого уравнения  $X''(x) + \lambda \cdot X(x) = 0$  удовлетворяющее граничным условиям  $X'(0) = X'(l) = 0$  можно представить в виде:  $X(x) \equiv X_k(x) = \cos(\sqrt{\lambda}x)$

$$\text{при } \lambda_k = \left(\frac{k\pi}{l}\right)^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Общее решение второго уравнения  $T''(t) + \lambda \cdot a^2 \cdot T(t) = 0$  при  $\lambda \equiv \lambda_k$  имеет вид

$$T(t) = a_k \cdot \cos\left(\frac{k\pi a t}{l}\right) + b_k \cdot \sin\left(\frac{k\pi a t}{l}\right), \text{ где } a_k \text{ и } b_k \text{ – произвольные постоянные. Решение}$$

исходной задачи представляет собой сходящийся ряд

$$U(x,t) = \frac{\mu t^2}{2} + \frac{1}{l} \int_0^l (\phi(x) + t\psi(x)) dx + \sum_{k=1}^{\infty} \left( a_k \cdot \cos\left(\frac{k\pi a t}{l}\right) + b_k \cdot \sin\left(\frac{k\pi a t}{l}\right) + \mu \cdot \sin\left(\frac{l}{k\pi a t}\right)^2 \right) \cdot \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right)$$

$$\text{Коэффициенты разложения } a_k = \frac{2}{l} \int_0^l \phi(x) \cdot \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$b_k = \frac{2}{k\pi a} \int_0^l \psi(x) \cdot \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

определяются начальными условиями, которые запишем в виде  $\phi(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq l$ ;

$$\psi(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq l - \delta; \quad \psi(x) = -\frac{1}{\rho \delta}, \quad l - \delta < x \leq l;$$

Здесь, из определения импульса стержня единичной длины  $p = \rho \frac{\partial U}{\partial t}$  имеем  $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{p}{\rho}$

В начальный момент времени  $t = 0$  импульсом  $|$  обладал участок стержня  $l - \delta < x \leq l$ ,

где знак минус указывает на направление распространения импульса, противоположное направлению оси, в начальный момент времени.

Теперь, зная  $\psi(x)$  и  $\varphi(x)$ , получи коэффициенты разложения  $a_0 = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) dx = 0$ ;

$$a_k = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \cdot \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right) dx = 0, \quad k = 1, 2, \dots; \quad b_0 = -\frac{t}{l} \int_{l-\delta}^l \left(\frac{I}{\rho\delta}\right) dx = -\frac{It}{\rho l},$$

$$b_k = -\frac{2I}{k\pi\rho\delta} \cdot \frac{l}{k\pi} \cdot 2 \sin\left(\frac{k\pi\delta}{2l}\right) \cdot \cos\left(\frac{k\pi(2l-\delta)}{2l}\right), \quad k = 1, 2, \dots.$$

Решение исходного волнового уравнения можно представить в виде

$$U(x,t) = \frac{\mu t^2}{2} - \frac{It}{\rho l} - \frac{2I}{\pi\rho} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \cdot \sin\left(\frac{k\pi at}{l}\right) \cdot \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right)$$

Для наглядности, построим график этой функции. Вычисления выполним в системе MATLAB:

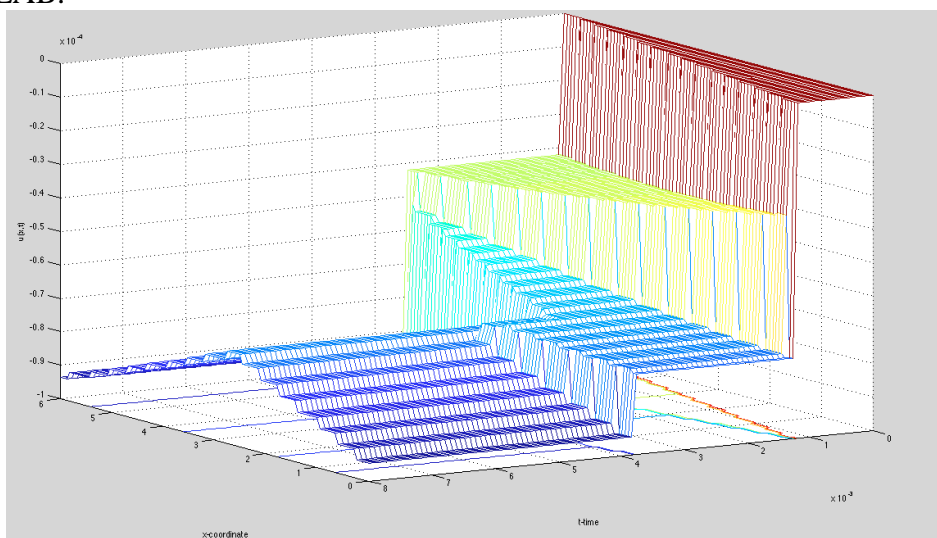


Рис. Зависимость распространения волны от времени.

Список использованной литературы:

1. Араманович И.Г., Левин В.И. Уравнения математической физики. - М.: Наука, гл.ред.физ.-мат. лит.-ры, 1969. – 288с.

2. Попов В.А. Математические методы моделирования физических процессов: Учебно-практическое пособие /Алт. госуд. технич. ун-т им. И.И. Ползунова. Барнаул, 2011. – 195 с.

3. Поршнев С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. - М: Горячая линия – Телеком. 2003. - 592 с.

## ДВИГАТЕЛЬ СТИРЛИНГА

Фризен И.П. – студент

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Двигатель, предложенный самим Робертом Стирлингом, имел значительные массогабаритные характеристики и низкий КПД. Из-за сложности процессов в таком двигателе, связанных с непрерывным движением поршней, первый упрощенный математический аппарат разработан только в 1871 году пражским профессором Г. Шмидтом. Предложенный им метод расчета основывался на идеальной модели цикла Стирлинга и позволял создавать двигатели с КПД не превышающем 15%. Лишь к 1953 году голландской фирмой «Филипс» разработаны первые высокоэффективные двигатели Стирлинга, превосходящие по характеристикам двигатели внутреннего сгорания.

Мировой интерес к этому типу двигателей с того времени продвинулся из области теоретических построений в плоскость практической реализации в самых разных сферах. За рубежом уже начато производство двигателей Стирлинга, технические характеристики которых уже сейчас превосходят ДВС и газотурбинные установки. Так, двигатели Стирлинга фирм Philips, STM Inc., Daimler Benz, Solo, United Stirling мощностью от 5 до 1 200 кВт имеют эффективный КПД более 42 %, ресурс - более 40 тыс. ч, удельную массу - от 1,2 до 3,8 кг/кВт.

В США стартовал проект создания солнечной электростанции с использованием двигателя Стирлинга в качестве прямого преобразователя тепловой энергии в механическую. На фото Чак Андрака (Chuck Andraka, слева) и глава Stirling Energy Systems Боб Лиден (Bob Liden) на фоне первой установки в испытательном центре Сандия (фото с сайта sandia.gov). Теоретически КПД Стирлинга может совпадать с физическим пределом, определяемым разностью температур нагревателя и холодильника, да и на практике можно получить от стирлингов КПД порядка 70%. По расчётам авторов проекта, в теории одна ферма солнечных стирлингов, под которую отвели бы территорию 160 x 160 километров на юге США, полностью покрыла бы всю потребность страны в электроэнергии. На сегодняшний день прототипы успешно проходят испытания, но стоимость каждого еще слишком высока (более 150 тысяч долларов США), что тормозит массовое внедрение.

Подобными разработками интересуются и в Швеции. На сайте компании "Cleanergy" вниманию посетителей представлен новый концепт солнечной миниэлектростанции для получения электроэнергии. Создан как полномасштабный образец с гелиоконцентратором на подвижной с закрепленным в фокусе стирлингом, так и отдельный когенерационный агрегат для получения электроэнергии и тепла общей мощностью 9 кВт (однако, стоит отметить, что из 9 кВт только 2кВт - электроэнергия, остальные 7кВт - тепло для обогрева помещений).

Наиболее бурное развитие двигателей Стирлинга происходит в сфере военных технологий.

Быстрыми темпами создаются опытные и серийные образцы Стирлинг-установок для неатомных подводных лодок. Вот выдержка из статьи заслуженного изобретателя Российской Федерации, академика Академии военных наук, д.т.н. Кириллова Н.Г., посвященной

данному

вопросу:

«...наибольших результатов в разработке анаэробных установок достиг шведский концерн Kockums Submarin Systems, построивший три ПЛ класса "Gotland" типа A19 на основе двигателей Стирлинга. На ПЛ устанавливается два двигателя V4-275R по мощностью по 75 кВт. Три подводные лодки типа «Gotland» были построены фирмой Kockums в 1992 – 1996 годах. Длина субмарин – 60,4 метра, подводное водоизмещение – 1599 тонн. Экипаж – 27 человек, в том числе 5 офицеров. Вооружение: 4 X 533-мм и 2 X 400-мм торпедных аппарата. Скорость полного подводного хода – 20 узлов. При использовании двигателя Стирлинга лодки могут находиться под водой без подзарядки аккумуляторных батарей до 20 суток!

Самый многообещающий проект шведов связан с перспективной подводной лодкой «Викинг». Это название выбрано не случайно. В реализации проекта должны участвовать еще две скандинавские страны - Норвегия и Дания. «Кокумс», норвежская компания «Конгсберг» и датская «Оденсе столшипсваерфт» образовали консорциум для практической работы над проектом. Всего планировалось построить 12 субмарин нового поколения. По мнению ведущих специалистов, эта была бы лучшая подводная лодка XXI века. На ней планировалось установить единый двигатель Стирлинга большой мощности (ориентировочно 800 кВт).

Первыми, после шведов, перспективность анаэробных установок на основе двигателей Стирлинга поняли японцы... Для отработки технологии применения двигателей Стирлинга в 2000-2001 годах на кораблестроительной верфи «Кобе» фирмой «Мицубиси дзюкоге» были проведены работы по оснащению ПЛ «Асасио» энергетической установкой замкнутого цикла с двигателем Стирлинга.... Ходовые испытания прошли на «отлично». Поэтому уже с

2003 года японские ПЛ типа «Оясио» начали строиться с анаэробными установками на основе двигателей Стирлинга.

Японцы ввели новое словосочетание «стирлинг-подводные лодки»... Именно для новой ПЛ с единым двигателем фирмой “Mitsubishi” создан и прошел успешные стендовые испытания двигатель Стирлинга мощностью более 600 кВт. В качестве рабочего тела двигателя используется азот.

И наконец, последними из мировых держав, окончательный выбор по типу анаэробной установки сделали американцы. Их решение однозначное – двигатели Стирлинга. Для этого в 2005 году ВМС США взяли в лизинг шведскую подводную лодку типа «Gotland», оснащенную вспомогательной воздухонезависимой установкой Стирлинга...» Как можно видеть все развитые страны ударными темпами разрабатывают и внедряют Стирлинги в серийное производство. И не удивительно, при сопоставимой с ДВС мощности Стирлинг-двигатели имеют высокий крутящий момент почти на всех режимах работы, малошумны, «всеядны» в плане топлива и могут работать в любых условиях.

Специалистами NASA (Национального Аэрокосмического Агентства США) были проделаны предварительные проработки проекта создания обитаемой базы на Луне. В качестве основного источника энергии для работы в условиях лунной поверхности был выбран атомный реактор SP-100 с тепловой мощностью 2500 кВт и 8 электрических генераторов, работающих от двигателей Стирлинга. В проекте приводится подробное техническое описание реакторной установки, конструкции и теплового подсоединения двигателей Стирлинга, систем отвода тепла и распределения мощности. К Стирлингам интерес проявляли и в России. В 1996 году на ОАО “Машиностроительный завод “АРСЕНАЛ”, в рамках договора с ГП ГОКБ “Прожектор” были начаты работы по теме “Исследование и разработка электроагрегатов на базе многотопливных двигателей Стирлинга”. Но, к сожалению, работы в данном направлении были приостановлены из-за отсутствия дальнейшего финансирования проекта.

В настоящее время в России накоплен достаточный научный потенциал для создания высокоэффективных двигателей Стирлинга. Значительные результаты были достигнуты в ООО «Инновационно-исследовательский центр «Стирлинг-технологии». Специалистами были проведены теоретико-экспериментальные исследования для разработки новых методов расчета высокоэффективных двигателей Стирлинга. Основные направления работ связаны с применением двигателей Стирлинга в когенерационных установках и системах использования теплоты отработанных газов, например в мини-ТЭЦ. В результате были созданы методики разработки и опытные образцы двигателей мощностью 3 кВт.

Не менее мощное развитие получили Стирлинг-машины в области криогенной техники. Поскольку Стирлинги обратимы, на их базе создано множество холодильных машин без фреона – газа, используемого в обычных холодильных компрессорах. Данное преимущество позволило уменьшить габариты системы охлаждения и повысить ее производительность.

Холодильные машины, работающие по обратному циклу Стирлинга, наиболее эффективны в диапазоне криогенных температур (очень низкие температуры), в более высоком диапазоне температур (низкие температуры, используемые в промышленности и в быту) в настоящее время главным образом работают фреоновые пароконденционные холодильные машины.

Криогенные стирлинг-машины находят все большее применение в радиоэлектронных системах, где требуется мощное охлаждение, но отсутствуют условия для применения стандартных способов охлаждения (например термодарами). Некоторые фирмы, в том числе такие, как «Малакер и Хьюз эйркрафт», США (Malakar Labs Inc., Hughes Aircraft Co.) выпускают для продажи небольшие (или даже миниатюрные) криогенные машины. Эти компании совместно с Северо-Американским отделением фирмы Филипс (North American Philips Inc.), специализирующиеся на производстве миниатюрных охладителей, считают своей основной целью производство небольших криогенных машин для электронной

промышленности, где они используются в основном для мощного охлаждения инфракрасных детекторов, применяемых в различных военных и гражданских целях.

[По материалам статьи д.т.н. Кириллова Н.Г. и книги Г. Уокера "Машины, работающие по циклу Стирлинга"]

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЛЬТРАЦИИ РАСТВОРОВ СОЛЕЙ ЧЕРЕЗ ПЕСОК И ТОРФ

Семихин В. И., Малюгин Р. В.

Тюменский государственный университет (г. Тюмень)

Фильтрационные явления широко распространены как в природе, так и на производственных этапах жизнедеятельности человека[1]. Особый интерес представляет процесс адсорбции солей из растворов, поскольку существенный ущерб экологии может быть причинен вследствие вымывания водорастворимых солей из разного рода отстойных емкостей, например на территории буровых [2; 3], и их попадание в подземные и грунтовые воды. Степень загрязнения зависит от типа почвы, через которую проходят солевые растворы, и концентрации солей. В связи с этим были проведены эксперименты по изучению фильтрации растворов соли через песок и торф. Посредством измерения электропроводности можно судить какая часть солей поглощается в адсорбентом. На установке, описанной в работах [4; 5], было смоделировано движение солевых растворов через пористые несцементированные системы адсорбентов.

В качестве образца жидкой фазы использовались растворы  $NaCl$ ,  $KCl$ ,  $CaCl_2$ ,  $K_2SO_4$  полученные путём смешивания с дистиллированной водой, после чего фильтровались через адсорбенты: торф Велижанской торфоразработки, массой 24 гр. в сухом виде и песок, массой 94 гр. Хлориды использовались с целью проанализировать влияния массы положительных ионов на процесс адсорбции.  $K_2SO_4$  чтобы посмотреть влияние массы кислотного остатка.

Для измерения электропроводности растворов использовался кондуктометр Анион-7020. Давление в системе поддерживалось в интервале  $0,2 \div 0,4$  мПа. Раствор прогонялся порционно, размер порции 50 мл.

Были исследованы процессы фильтрации растворов с 1%, 3%, 5%, 7%, и 10% содержанием солей. Массу соли адсорбированной в процессе фильтрации можно оценить сравнивая значения электропроводности с изначальным, зависимость электропроводности от концентрации имеет линейный характер. Использование неорганических солей объясняется тем, что в воде они полностью растворяются и имеют достаточно высокие значения электропроводности. Наибольший интерес для нас представляют именно соли, которые способны растворятся в воде и могут в процессе миграции попасть в водозаборные сооружения.

Массу соли адсорбированной песком можно будет найти, соотнеся значения электропроводности начального раствора и уже отфильтрованного.

Из полученных значений электропроводности по формуле представленной ниже можно рассчитать массу соли, поглощенной в процессе фильтрации:

$$m = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i * m_0}{(\sigma_0 * n)},$$

где  $\sigma_i$  – значение электропроводности  $i$ -ой порции раствора, пропущенной через образец адсорбента;  $m_0$  - масса соли растворенной в дистиллированной воде для получения необходимой концентрации;  $\sigma_0$  - значение электропроводности раствора, подготовленного для фильтрации;  $n$  - количество порций раствора, пропущенных через образец адсорбента. Полученная величина служит для оценки интенсивности процесса адсорбции соли из раствора образцом твердой фазы.

### Выводы:

1. С увеличением концентрации масса соли, поглощенная из раствора, увеличивается.

2. Вся масса соли поглощается в первых 3-4 порциях, после чего значение электропроводности приближается к первоначальному. Это объясняется тем, что вдоль линий тока происходит интенсивное поглощение соли из раствора и постепенное насыщение поверхности адсорбента, после чего образец ведет себя менее активно.

3. Величины первоначального уменьшения электропроводности раствора, пропущенного через адсорбент, зависит от массы иона и его заряда.

4. Происходящий адсорбционный процесс имеет физическую природу, т. к. вымывание всей поглощенной соли происходит при пропуске 150-200 мл.

5. Зависимость массы поглощенной соли на единицу массы адсорбента для песка располагаются положе чем для торфа, что объясняется меньшей удельной поверхностью и большей ее активностью.

6. При адсорбции  $Ca^{++}$  на торфе по сравнению с  $K^+$  первоначальный скачок электропроводности увеличивается, а при адсорбции песком наоборот уменьшается. Таким образом можно сделать вывод, что активные центры на поверхности адсорбентов заметно отличаются по своей природе.

Список литературы:

1. Леонтьев Н.Е. Основы теории фильтрации: учебное пособие. М.: Изд-во Центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2009. – 88 с.

2. Передерший М.А. Адсорбционные методы защиты окружающей среды от загрязнений нефтью и нефтепродуктами // Сб.: Проблемы, способы и средства защиты окружающей среды от загрязнений нефтью и нефтепродуктами. М. 1999. С. 15-17.

3. Балаба В.И. Механизм разупрочнения глинистых пород буровыми технологическими жидкостями // Инженер-нефтяник. 2008. №2. С. 19-22.

4. Семихин В.И., Могильный Е.А., Малюгин Р.В., Исследование фильтрационно-емкостных свойств торфа. М.: Современная наука: Актуальные проблемы теории и практики, серия Естественные и технические науки, №6-7, 2012. С. 50-54.

5. Семихин В.И., Могильный Е.А., Малюгин Р.В., Сравнение фильтрационных свойств песка и торфа. Современные проблемы и пути их решения в науке, транспорте, производстве и образовании: Сб. трудов Sworld междунар. науч.-практич. конф., Одесса, 18-27 декабря 2012г. / отв. ред. С.В.Куприенко. Одесса: Изд-во КУПРИЕНКО, 2012. Вып. 4. Т. 4. С. 39-44.