Российская Академия Естествознания
Издательский дом Академии Естествознания

И. Х. Бадамшин

**ОТ ЧЕТЫРЕХ К ОДНОМУ.
СИЛЫ ВНУТРИАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
И ПРОЧНОСТЬ МАТЕРИАЛОВ**

Монография

Издание второе, переработанное и дополненное

Москва
2016

УДК 621.438-226.2:539.3

ББК 30.3-1

Б15

Рецензент

Белоусов А. И. — доктор технических наук, профессор кафедры конструкции и прочности двигателей летательных аппаратов ФГБОУ ВО СГАУ (НИУ)

Бадамшин И.Х.

Б15

От четырех к одному. Силы внутриатомного взаимодействия и прочность материалов: монография. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Издательский дом Академии Естествознания, 2016. — 134 с.

ISBN 978-5-91327-405-2

Применительно к прочностным задачам выполнен переход в модели поведения материала от гипотезы сплошности среды к учету сил межатомного взаимодействия в кристаллах. Это позволило теоретически определять его упругие, прочностные, теплофизические и физические характеристики, и заложить основу для конструирования материалов. В области механики разрушения смоделированы такие характеристики, как ползучесть, коэффициент интенсивности напряжения, ударная вязкость, малоцикловая усталость.

В качестве дальнейшего развития предлагаемого подхода приведена единая модель сил внутри- и межатомного взаимодействия и механических макросистем, объединяющая в одно четыре фундаментальных взаимодействия: гравитационное, электромагнитное, ядерное и слабое. Сравнительный анализ показывает, что результаты расчетов удовлетворительно сходятся с экспериментальными данными, приведенными в справочниках.

УДК 621.438-226.2:539.3

ББК 30.3-1

ISBN 978-5-91327-405-2

© Бадамшин И.Х., 2014

© Бадамшин И.Х., 2016

© ИД «Академия Естествознания»

© МОО «Академия Естествознания»

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
1. ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ УПРУГОСТИ	6
1.1. Зависимость периода кристаллической решетки от температуры	6
1.2. Модуль упругости	10
1.2.1. Модуль упругости поликристаллов	12
1.2.2. Зависимость модуля упругости от температуры	13
1.2.3. Результаты моделирования упругих свойств наноструктур на основе углерода и кремния	27
1.3. Предел упругости	30
1.4. Коэффициент Пуассона.....	34
1.5. Предел текучести	37
1.6. Теплофизические и физические характеристики	39
1.6.1. Коэффициент теплового расширения.....	39
1.6.2. Модель распространения колебаний и коэффициент теплопроводности	41
1.6.3. Плотность кристаллических структур	45
1.7. Коэффициент интенсивности напряжений. Ударная вязкость	48
1.7.1 Краткие сведения о существующих характеристиках и моделях разрушения.....	48
1.7.2. Обоснование расчетной модели коэффициента интенсивности напряжений	48
1.7.3. Ударная вязкость	50
1.8. Термические напряжения.....	51
1.9. Ползучесть	55
1.10. Остаточные напряжения. Релаксация напряжений	60
1.11. Малоцикловая (термическая) усталость	62
1.12. Моделирование кристаллической структуры и конструирование материалов.....	65
1.12.1. Моделирование кристаллической структуры	67
1.12.2. Конструирование материалов.....	70
2. ВИХРЕВАЯ МОДЕЛЬ АТОМА И ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ	75
2.1. Механическая модель взаимодействия сил на вращающемся роторе.....	75
2.1.1. Физическая сущность механической модели	75
2.1.2. Модель нагружения вращающегося ротора	77
2.1.3. Модель опыта Г. Кавендиша	86
2.1.4. Самоцентрирование ротора	90

2.2. Силы межатомного взаимодействия в материалах	92
2.2.1. Вихревая модель атома.....	92
2.2.2. Расчетные формулы вихревой модели	94
2.2.3. Сравнительный анализ результатов расчета взаимодействия электронной оболочки с ядром атома	95
2.2.4. Электронная плотность.....	100
2.2.5. Модель химической связи.....	101
2.2.6. Сравнительный анализ.....	103
2.2.7. Модуль упругости двойных соединений	105
2.2.8. Теплоемкость материалов	108
2.2.9. Предел текучести жаропрочных сплавов	109
2.3. Силы внутриатомного взаимодействия	111
2.3.1. Допущения модели внутриатомного взаимодействия.....	111
2.3.2. Расчетные формулы	113
2.3.3. Сравнительный анализ результатов расчета со справочными данными.....	113
3. ЕДИНСТВО ФИЗИЧЕСКИХ ЗАКОНОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МАКРОТЕЛ И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ	120
3.1. От четырех к одному. Сокращение числа экспериментов.....	120
3.2. Обобщение аналогий. Единая модель материи	120
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	123
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	128

ВВЕДЕНИЕ

Существующие методы расчета на прочность элементов конструкций основаны на теории упругости механики деформируемого твердого тела, которая, в свою очередь, базируется на гипотезе сплошности среды и эмпирических исходных данных.

Исследованиями в области физики твердого тела показано, что в основе прочности твердых тел лежит равновесие межатомных сил притяжения и отталкивания между зарядами кристаллической решетки. Иначе говоря, прочность определяется электростатическим взаимодействием электронных оболочек и ядер атомов кристаллической решетки, в основе которого лежит закон Кулона.

Применение этого фундаментального свойства материалов позволяет развить методы расчета на прочность конструкций и перейти в модели поведения материалов от гипотезы сплошности среды к учету сил межатомного взаимодействия на уровне элементарной атомной ячейки. Такой подход открывает новые возможности теоретически рассчитывать прочностные, упругие и теплофизические характеристики элементов конструкций, в которые входят: модуль упругости, коэффициент Пуассона, предел упругости, предел текучести, коэффициент теплового расширения, коэффициент теплопроводности, являющиеся исходными данными в расчете напряженно-деформированного состояния деталей. Кроме того, одним из направлений развития нанотехнологий является полное трехмерное управление структурой материалов на атомном уровне с целью размещения каждого атома на своем месте. В этих условиях важно заранее знать упругие и прочностные свойства нанообъемов монокристаллов с бездефектной структурой. При этом существенно сокращается объем дорогостоящих экспериментов, в некоторых случаях на уникальном оборудовании.

Применительно к элементам авиационных двигателей использование предлагаемого подхода в моделировании поведения материала, как составной части расчета на прочность, открываются новые методы конструирования материалов лопаток турбин. Основой анализа при этом является межатомное взаимодействие в модели поведения материалов и ее влияние на конструкционную прочность деталей.

Учет сил межатомного и внутриатомного взаимодействия на основе разработанной вихревой модели атома открывает возможности расширить область применения предлагаемого подхода на различные разделы физики, в частности, перейти от четырех фундаментальных взаимодействий к одному.

---

1. ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ УПРУГОСТИ

Рост температуры газа перед турбиной является одним из определяющих факторов развития авиационных газотурбинных двигателей (ГТД). Однако он сдерживается свойствами материалов в первую очередь для рабочих лопаток турбин.

Для новых материалов характерна весьма ограниченная информация об упругих и прочностных характеристиках, необходимая в расчетах напряженно-деформированного состояния лопаток. В этих условиях возникает потребность в теоретических методах расчета упругих, прочностных характеристик, основанных на учете сил межатомного взаимодействия, так как классические методы расчета механики деформируемого твердого тела, основанные на гипотезе сплошности среды, не позволяют этого сделать.

1.1. Зависимость периода кристаллической решетки от температуры

Зависимость периода кристаллической решетки от температуры определяет физическую сущность коэффициента теплового расширения и температурные зависимости модуля упругости, коэффициента Пуассона, предела упругости, предела текучести, коэффициента теплового расширения, коэффициента теплопроводности, плотности.

Допущения расчетной модели

1. Рассматривается элементарная атомная ячейка кристаллической решетки монокристалла (кристаллита в поликристалле).
2. Кристаллическая решетка находится в равновесном состоянии (кулоновские силы притяжения уравновешены силами отталкивания).
3. Потенциальная энергия взаимодействия зарядов U_0 — величина постоянная, то есть решается статическая задача.
4. Расчет изменения периода кристаллической решетки вследствие повышения температуры основан на учете изменения энергии связи двух разноименных зарядов в атомной ячейке кристаллической решетки, т.е. между узлом решетки и электронным облаком в межузловом пространстве.

Энергия электростатической связи двух разноименных зарядов атома в кристаллической решетке в соответствии с законом Кулона определяется по формуле

$$U_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2}a_0},$$

где $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл — элементарный заряд, равный по модулю заряду электрона; $\pi = 3,14$; $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Кл²/Н·м² — электрическая постоянная; a_0 — период кристаллической решетки; $a_0/2$ — расстояние между разноименными зарядами (узлом кристаллической решетки и электронной оболочкой).

Тепловая энергия атома при нагреве ячейки монокристалла на величину ΔT определяется как

$$U_T = c_v^1 \Delta T,$$

где c_v^1 — теплоемкость атома при постоянном объеме. В соответствии с законом Дюлонга и Пти

$$c_v^1 = c_v / N_A = 3k = 4,1421 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К},$$

где N_A — число Авогадро.

Энергия связи двух разноименных зарядов атома в ячейке кристаллической решетки вследствие нагрева уменьшается на величину

$$\Delta U = U_0 - U_T$$

Изменение среднего расстояния между зарядами вследствие нагрева кристаллической решетки

$$\Delta x = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2} \Delta U}.$$

Изменение периода кристаллической решетки вследствие нагрева

$$\Delta a_0 = \Delta x - a_0/2.$$

После преобразований зависимость изменения периода кристаллической решетки от температуры примет следующий вид [1]

$$\Delta a_0 = 0,5 \left(\frac{e^2}{\frac{e^2}{a_0} - c_v^1 \Delta T 2\pi\epsilon_0} - a_0 \right).$$

Результаты расчета a_0 в зависимости от температуры для некоторых металлов приведены в табл. 1.1.

Графическая зависимость периода кристаллической решетки от температуры, в частности, для хрома приведена на рис. 1.1.

Из табл. 1.1 и рис. 1.1 видно, что результаты расчета a_0 в зависимости от температуры удовлетворительно сходятся (с расхождением до 3,3 %) с экспериментальными данными работы [2]. На рис. 1.2 приведены экспериментальные зависимости [2].

Результаты расчета периода кристаллической решетки a_0 в зависимости от температуры в дальнейшем используются для определения:

- коэффициента теплового расширения;
- модуля упругости;
- предела упругости и др. характеристик.

Выводы

1. Полученная формула позволяет определять теоретическую зависимость периода кристаллической решетки от температуры и сократить объем экспериментов.

2. Результаты расчета периода кристаллической решетки от температуры определяют физическую сущность коэффициента теплового расширения и температурные зависимости модуля упругости, коэффициента Пуассона, предела упругости, предела текучести, коэффициента теплового расширения, коэффициента теплопроводности, плотности.

Таблица 1.1

T , °C	a_0 для W	$a_{\text{эксп}}$ для W	Расхож- дение, %	a_0 для Mo	$a_{\text{эксп}}$ для Mo	Расхож- дение, %	a_0 для Cr	$a_{\text{эксп}}$ для Cr	Расхож- дение, %	a_0 для Nb	$a_{\text{эксп}}$ для Nb	Расхож- дение, %	a_0 для V	$a_{\text{эксп}}$ для V	Расхож- дение, %
20	3,165	3,165	0,00	3,147	3,147	0,00	2,884	2,884	0,00	3,3	3,3	0,00	3,027	3,027	0,00
100	3,174	3,166	0,25	3,156	3,149	0,22	2,891	2,885	0,21	3,31	3,303	0,21	3,035	3,032	0,10
200	3,183	3,167	0,51	3,165	3,151	0,44	2,899	2,887	0,42	3,32	3,305	0,45	3,044	3,034	0,33
300	3,192	3,17	0,69	3,174	3,153	0,67	2,907	2,891	0,55	3,33	3,307	0,70	3,052	3,036	0,53
400	3,202	3,171	0,98	3,183	3,155	0,89	2,914	2,894	0,69	3,34	3,310	0,91	3,06	3,039	0,69
500	3,211	3,172	1,23	3,192	3,157	1,11	2,922	2,897	0,86	3,35	3,313	1,12	3,069	3,042	0,89
600	3,22	3,174	1,45	3,201	3,16	1,30	2,93	2,9	1,03	3,36	3,315	1,36	3,077	3,045	1,05
700	3,229	3,175	1,70	3,21	3,162	1,52	2,937	2,904	1,14	3,37	3,318	1,57	3,086	3,048	1,25
800	3,239	3,177	1,95	3,22	3,165	1,74	2,945	2,907	1,31	3,38	3,323	1,72	3,094	3,053	1,34
900	3,248	3,178	2,20	3,229	3,167	1,96	2,953	2,91	1,48	3,391	3,325	1,98	3,103	3,057	1,50
1000	3,258	3,18	2,45	3,238	3,169	2,18	2,961	2,915	1,58	3,401	3,327	2,22	3,112	3,060	1,70
1100	3,267	3,181	2,70	3,248	3,171	2,43	2,969	2,92	1,68	3,411	3,330	2,43	3,12	3,065	1,79
1200	3,277	3,183	2,95	3,257	3,174	2,61	2,976	2,922	1,85	3,422	3,333	2,67	3,129	3,070	1,92
1300	3,287	3,185	3,20	3,267	3,176	2,87	2,984	2,927	1,95	3,432	3,336	2,88	3,138	3,075	2,05
1400	3,296	3,188	3,39	3,277	3,178	3,12	2,992	2,934	1,98	3,443	3,340	3,08	3,147	3,079	2,21
1500	3,306	3,19	3,64	3,286	3,182	3,27	3,001	2,94	2,07	3,454	3,343	3,32	3,156	3,084	2,33
1600	—	3,192	—	—	3,185	—	—	2,948	—	—	3,347	—	—	—	—
2000	—	3,2	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Примечание. Величина периода кристаллической решетки a_0 приведена в ангстремах. Экспериментальные значения $a_{\text{эксп}}$ взяты из работы [2].

Рис. 1.1. Графическая зависимость периода кристаллической решетки (в ангстремах) от температуры для хрома:
1 – эксперимент [2]; 2 – расчет

Рис. 1.2. Экспериментальные зависимости [2]:
а – W; б – Mo; в – Cr; г – Nb; д – V

1.2. Модуль упругости

Модуль упругости определяется на основе учета сил межатомного взаимодействия в соответствии со следующей моделью.

Допущения

1. Рассматривается элементарная атомная ячейка.
2. В атомной ячейке выделяется плотноупакованная плоскость.
3. В плоскости выбирается кристаллографическое направление.
4. В направлении рассматривается взаимодействие двух элементарных зарядов, на которое распространяется закон Кулона.
5. Решается статическая задача в условиях равновесия сил притяжения и отталкивания в кристаллической решетке.

Формула расчета модуля упругости выводится на основе моделей кристаллографии, закона Гука и закона Кулона.

Известно, что закон Кулона имеет следующий вид

$$F_{\text{Кул}} = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2},$$

где Q_1, Q_2 – взаимодействующие заряды, Кл; $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Кл²/Н·м² – электрическая постоянная; r – расстояние между взаимодействующими зарядами.

Закон Гука

$$\frac{F_{\text{упр}}}{A} = \frac{E \Delta r}{r},$$

где A – площадь рассматриваемого сечения, м²; $\Delta r/r$ – относительное удлинение рассматриваемого объема тела; E – модуль упругости.

Известно также, что силы упругости в твердом теле обусловлены кулоновскими силами межатомного взаимодействия, поэтому

$$F_{\text{упр}} = F_{\text{Кул}},$$

где $F_{\text{упр}}$ – сила упругости; $F_{\text{Кул}}$ – кулоновская сила взаимодействия зарядов. По определению модуля упругости $\Delta r = r$, отсюда следует, что

$$E = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2 A},$$

или для двух взаимодействующих элементарных зарядов [3–6]

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2 a_0^2},$$

где r – расстояние между ближайшими соседями-атомами.

Схема расчета: в элементарной атомной ячейке рассматривается плотноупакованная плоскость; в свою очередь, в плоскости – кристаллографическое направление; затем, вдоль этого направления рассматривается два взаимодействующих заряда.

Например, для монокристалла железа Fe $a_0 = 2,8665 \cdot 10^{-10}$ м; расстояние между ближайшими соседями-атомами в объемно-центрированной решетке (ОЦК)

$r = a_0 \sqrt{3}/2$. Расстояние между ближайшими разноименными зарядами в кристаллографическом направлении $\langle 100 \rangle$ $0,5a_0$.

Тогда

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2 a_0^2} = \frac{(1,60910^{-19})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} (0,5 \cdot 2,8665 \cdot 10^{-10})^2 (2,8665 \cdot 10^{-10})^2} = 137,6 \cdot 10^9 \text{ Па.}$$

Расстояние между ближайшими разноименными зарядами в кристаллографическом направлении $\langle 110 \rangle$ $0,5a_0 \sqrt{3}/2$. Тогда

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2 a_0^2} = \frac{(1,609 \cdot 10^{-19})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} (0,5 \cdot 2,8665 \cdot 10^{-10} \cdot 0,5\sqrt{3})^2 (2,8665 \cdot 10^{-10})^2} = 183,5 \cdot 10^9 \text{ Па.}$$

Результаты расчета модуля упругости E для бездефектной кристаллической решетки меди и железа сведены в табл. 1.2.

Таблица 1.2

Результаты расчета и экспериментальные значения
модуля упругости нитевидных монокристаллов (усов)

Обозначение элемента и кристаллографическое направление	Величина модуля упругости, ГПа		Расхождение, %
	расчетная	экспериментальная	
Cu (ГЦК) $\langle 100 \rangle$	54,2	67 [7]	19
	108,4	194 [7]	44
Fe (ОЦК) $\langle 100 \rangle$	137,6	132 [7]	4
	183,5	222 [7]	17

Из табл. 1.2 видно, в частности, что для меди в направлении $\langle 111 \rangle$ расчетный модуль упругости по базовой формуле равен 108,4 ГПа.

В соответствии со схемой расчета, переходя от взаимодействия двух зарядов к группе зарядов в плотноупакованной плоскости, необходимо учитывать ее ретикулярную плотность.

В данном случае коэффициент ретикулярной плотности для плоскости (111) равен

$$k_r = (1/8) \cdot 3 + (1/2) \cdot 3 = 1,875.$$

Тогда с учетом ретикулярной плотности $k_r = 1,875$ для плоскости $(11\bar{1})$ модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$ будет равен

$$E = 108,4 \cdot 1,875 = 203,2 \text{ ГПа.}$$

Экспериментальное значение — 194 ГПа. Расхождение с результатом эксперимента в этом случае снижается с 44 % (табл. 1.2) до 4,7 %.

1.2.1. Модуль упругости поликристаллов

Известно [8], что технические металлы являются поликристаллами, т.е. состоят из большого числа анизотропных кристаллитов (или монокристаллов). Известно также [8], что упругие характеристики поликристаллов по существу являются усредненными значениями упругих свойств монокристаллов. Однако сведения о возможности определения среднего значения модуля упругости поликристаллов, приведенные в [8], являются лишь теоретическим положением, но не рекомендациями к инженерным расчетам. Какие именно величины усредняются и сколько их, в источнике не указано.

Зная значения модуля упругости монокристалла с учетом анизотропии, можно определить величину модуля упругости для поликристалла этого же металла или его соединения следующим образом.

Вначале рассчитывается модуль упругости для наиболее плотноупакованных плоскостей (100), (110), (111) элементарной атомной ячейки монокристалла. Затем рассчитывается модуль упругости поликристалла $E_{\text{ПКР}}$ по формуле [9, 10]:

$$E_{\text{ПКР}} = (E_{100} + E_{110} + E_{111})/3,$$

где E_{100} , E_{110} , E_{111} – соответственно модули упругости для плоскостей (100), (110), (111).

Результаты расчета приведены в табл. 1.3.

Таблица 1.3

Наименование элемента	Величина модуля упругости поликристалла, ГПа		Погрешность, %	Источник
	расчетная	экспериментальная		
Fe	213,8	211 (отожжен.) 223,2	1,3 4,2	[7]
Ni	197,4	196	0,7	[7]
Cr	283,1	288	1,7	[7]
Ta	203,3	186	9,3	[7]
Nb	121,6	118,9	2,3	[7]
Mo	298,6	317,8	6	[7]
W	407,9	393,8	3,5	[7]
ZrO ₂	436,7	—	—	—
NbC	440,4	497, 504, 518, 550	—	[11]
TaC	547,2	515, 550, 730	—	[11]
TiN	440,7	440	—	[11]
Ni ₃ Al	188,1	—	—	—

Из табл. 1.3 видно, что результаты расчета модуля упругости для металлов удовлетворительно сходятся с результатами эксперимента с погрешностью от 0,7 до 9,3 %.

Что касается соединений, то экспериментальные данные различных авторов не совпадают. Это, с одной стороны, может быть объяснено недостаточно хорошей аттестацией образцов, а с другой – методическими недочетами [11, 12]. Поэтому погрешность для соединений не рассчитывалась.

1.2.2. Зависимость модуля упругости от температуры

Приведенные в данном разделе таблицы (табл. 1.4–1.21) и графики (рис. 1.3–1.16) позволяют восполнить недостающие экспериментальные данные результатами расчетов. Здесь E_{100} , E_{110} , E_{111} – расчетные значения модуля упругости монокристалла в соответствующих кристаллографических направлениях $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. Экспериментальные значения из справочников обозначены индексами «ЭКСП». Расхождение в процентах – ΔE , %.

Медь Cu

Таблица 1.4

Температура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100\text{эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110\text{эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111\text{эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли.эксп}}$, ГПа	ΔE , %
20	90,8	66,7	36,1	136,2	131	3,9	185,2	194	4,5	128,6	129 [7]	0,31
100	89,1	—	—	133,7	—	—	181,8	—	—	127,4	—	—
200	86,9	—	—	130,3	—	—	177,2	—	—	125,7	—	—
300	84,1	—	—	126,2	—	—	171,6	—	—	123,5	—	—
400	80,9	—	—	121,3	—	—	165,0	—	—	120,9	111 [7]	8,9
500	77,2	—	—	115,8	—	—	157,5	—	—	117,8	—	—
600	73,2	—	—	109,8	—	—	149,3	—	—	114,3	95 [7]	20,3
700	68,8	—	—	103,2	—	—	140,4	—	—	110,4	—	—
800	64,2	—	—	96,3	—	—	130,9	—	—	106,1	—	—
900	59,4	—	—	89,1	—	—	121,1	—	—	101,4	—	—
1000	54,4	—	—	81,6	—	—	111,0	—	—	96,4	65 [7]	48,3

Рис. 1.3. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла меди Cu:
 1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
 3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 – модуль упругости поликристалла

Рис. 1.4. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла меди Cu:
1 – расчетные значения; 2 – экспериментальные значения [7]

Из табл. 1.4 и рис. 1.3, 1.4 видно, что значительный объем недостающих экспериментальных данных восполняется расчетными данными, имеющими удовлетворительную сходимость.

Необходимо отметить, что с увеличением температуры расхождение возрастает. Это связано с тем, что в элементах, имеющих невысокую температуру плавления (Cu, Al и др.), начинаются процессы разрушения кристаллической решетки под воздействием температуры, близкой к температуре плавления, что не учитывается данной моделью.

Алюминий Al

Таблица 1.5

Температура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп}}$, ГПа	ΔE , %
20	47,7	62,5	23,7	71,5	71,4	0,1	97,3	75,1	29,6	72,2	70,8 [7]	2,0
100	47,1	—	—	70,6	—	—	96,0	—	—	71,3	—	—
200	46,2	—	—	69,4	—	—	94,3	—	—	70,0	63,8 [7]	9,7
300	45,2	—	—	67,8	—	—	92,1	—	—	68,4	—	—
400	43,9	—	—	65,8	—	—	89,5	—	—	66,4	54,9 [7]	20,9
500	42,3	—	—	63,5	—	—	86,4	—	—	64,1	—	—
600	40,6	—	—	60,9	—	—	82,8	—	—	61,4	49,2 [7]	24,8
700	38,7	—	—	58,0	—	—	78,9	—	—	58,5	—	—
800	36,6	—	—	54,9	—	—	74,6	—	—	55,3	—	—
900	34,3	—	—	51,4	—	—	70,0	—	—	51,9	—	—
1000	31,9	—	—	47,8	—	—	65,0	—	—	48,3	—	—

Рис. 1.5. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла алюминия Al:
 1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
 3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 – модуль упругости поликристалла

Рис. 1.6. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла алюминия Al:
 1 – расчетные значения; 2 – экспериментальные значения [7]

Никель Ni

Таблица 1.6

Температура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп}}$, ГПа	ΔE , %
20	140,6	138,0	1,8	210,9	215,0	1,9	286,7	262,0	9,4	212,7	196[7]	8,5
100	138,0	—	—	207,0	—	—	281,5	—	—	208,8	—	—
200	134,6	—	—	201,9	—	—	274,6	—	—	203,7	—	—
300	130,5	—	—	195,7	—	—	266,1	—	—	197,4	—	—
360	—	—	—	—	—	—	—	—	—	194	187[7]	3,7
400	125,6	—	—	188,3	—	—	256,1	—	—	190,0	—	—
500	120,0	—	—	180,0	—	—	244,8	—	—	181,6	—	—
600	113,9	—	—	170,9	—	—	232,3	—	—	172,4	—	—
700	107,3	—	—	160,9	—	—	218,8	—	—	162,3	—	—
800	100,3	—	—	150,4	—	—	204,5	—	—	151,7	—	—
900	92,9	—	—	139,4	—	—	189,5	—	—	140,6	—	—
1000	85,386	—	—	128,1	—	—	174,1	—	—	129,2	—	—
1100	77,7	—	—	116,6	—	—	158,5	—	—	117,6	—	—
1200	70,0	—	—	105,1	—	—	142,8	—	—	106,0	—	—
1300	62,4	—	—	93,7	—	—	127,4	—	—	94,5	—	—
1400	55,0	—	—	82,5	—	—	112,2	—	—	83,3	—	—
1500	47,9	—	—	71,8	—	—	97,7	—	—	72,5	—	—

Рис. 1.7. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла никеля Ni:
 1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
 3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 – модуль упругости поликристалла

Рис. 1.8. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла никеля Ni:
1 – расчетные значения; 2 – экспериментальные значения [7]

Ниобий Nb

Таблица 1.7

Темпе- ратура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп'}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп'}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп'}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп'}}$, ГПа	ΔE , %
20	51,9	—	—	134,7	—	—	155,1	—	—	113,9	119[7]	4,3
100	51,5	—	—	133,9	—	—	154,2	—	—	113,2	—	—
200	51,0	—	—	132,6	—	—	152,7	—	—	121,1	—	—
300	51,4	—	—	131	—	—	150,8	—	—	110,7	—	—
400	49,6	—	—	129	—	—	148,5	—	—	109	108[7]	0,9
500	48,7	—	—	126,6	—	—	145,7	—	—	107	—	—
600	47,7	—	—	123,8	—	—	142,5	—	—	104,7	—	—
700	46,5	—	—	120,7	—	—	139	—	—	102	—	—
800	45,1	—	—	117,2	—	—	135	—	—	99,1	—	—
900	43,7	—	—	113,4	—	—	130,6	—	—	95,9	—	—
1000	42,1	—	—	109,3	—	—	125,9	—	—	92,5	—	—
1100	40,4	—	—	105	—	—	120,9	—	—	88,7	—	—
1200	38,6	—	—	100,3	—	—	115,5	—	—	84,8	73,5[7]	15,4
1300	36,7	—	—	95,4	—	—	109,9	—	—	80,7	—	—
1400	34,8	—	—	90,3	—	—	104	—	—	76,4	—	—

Рис. 1.9. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла ниобия Nb:
1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 – модуль упругости поликристалла

Рис. 1.10. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла ниобия Nb:
1 – расчетные значения; 2 – экспериментальные значения [7]

Вольфрам W

Таблица 1.8

Тем- пера- тура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп}}$, ГПа	ΔE , %
20	323,8	389	16,8	420,6	389	8,1	484,3	389	24,5	409,6	393,8[7]	4
100	323,1	—	—	419,6	—	—	483,2	—	—	408,6	—	—
200	322	—	—	418,2	—	—	481,5	—	—	407,2	—	—
300	320,5	—	—	416,3	—	—	479,4	—	—	405,4	—	—
400	318,7	—	—	414	—	—	476,7	—	—	403,2	—	—
500	316,6	—	—	411,3	—	—	473,5	—	—	400,5	—	—
600	314,1	—	—	408,1	—	—	469,8	—	—	397,3	—	—
700	311,3	—	—	404,4	—	—	465,6	—	—	393,8	—	—
800	308,2	—	—	400,4	—	—	461	—	—	389,8	371 [7]	5,1
900	304,8	—	—	395,5	—	—	455,8	—	—	385,5	—	—
1000	301	—	—	391	—	—	450,2	—	—	380,7	—	—
1100	296,6	—	—	385,7	—	—	444	—	—	375,5	—	—
1200	292,5	—	—	380	—	—	437,5	—	—	370	—	—
1300	287,8	—	—	373,9	—	—	430,5	—	—	364	—	—
1400	282,8	—	—	367,4	—	—	423	—	—	357,7	—	—
1500	277,6	—	—	360,5	—	—	415,1	—	—	351,1	—	—

Рис. 1.11. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла вольфрама W:
 1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
 3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 – модуль упругости поликристалла

График температурной зависимости модуля упругости поликристалла вольфрама W приведен на рис. 1.12.

Рис. 1.12. Теоретическая зависимость модуля упругости поликристаллического W от температуры: ..... – экспериментальные значения [7]

График температурной зависимости модуля упругости поликристалла хрома Cr приведен на рис. 1.13.

Рис. 1.13. Теоретическая зависимость модуля упругости поликристаллического Cr от температуры: ..... – экспериментальные значения [7]

Двойные соединения

Карбид ниобия NbC

Таблица 1.9

Температура, °С	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп}}$, ГПа	ΔE , %
20	621,5	—	—	466,2	—	—	485,9	—	—	524,5	540[11]	3
100	619,3	—	—	464,8	—	—	484,5	—	—	522,9	—	—
200	616,4	—	—	462,9	—	—	482,6	—	—	520,6	—	—
300	612,7	—	—	460,5	—	—	480	—	—	517,7	—	—
400	608,3	—	—	457,5	—	—	476,9	—	—	514,2	—	—
500	603,2	—	—	454	—	—	473,2	—	—	510,1	—	—
600	597,3	—	—	449,9	—	—	469	—	—	505,4	—	—
700	590,8	—	—	445,3	—	—	464,2	—	—	500,1	—	—
730		—	—		—	—		—	—		500[11]	—
800	583,6	—	—	440,2	—	—	458,8	—	—	494,2	—	—
900	575,7	—	—	434,5	—	—	453	—	—	487,7	—	—
1000	567,1	—	—	428,4	—	—	446,6	—	—	480,7	—	—
1100	557,9	—	—	421,8	—	—	439,7	—	—	473,1	—	—
1200	548,1	—	—	414,7	—	—	432,3	—	—	465	—	—
1230		—	—		—	—		—	—		470[11]	—
1300	537,7	—	—	407,1	—	—	424,4	—	—	456,4	—	—
1400	526,7	—	—	399,1	—	—	416	—	—	447,3	—	—
1500	515,1	—	—	390,6	—	—	407,2	—	—	437,6	—	—

Рис. 1.14. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла карбида ниобия NbC:
 1 — модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 — модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
 3 — модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 — модуль упругости поликристалла

Рис. 1.15. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла карбида ниобия NbC:
1 — расчетные значения; 2 — экспериментальные значения [11, 12]

Силицид ниобия Nb_5Si_3

Таблица 1.10

Температура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп}}$, ГПа	ΔE , %
20	406,7	—	—	154,5	—	—	169,0	—	—	—	—	—
100	405,6	—	—	154,1	—	—	168,5	—	—	—	—	—
200	404,6	—	—	153,6	—	—	167,9	—	—	—	—	—
300	403,6	—	—	153,1	—	—	167,4	—	—	—	—	—
400	402,5	—	—	152,7	—	—	166,8	—	—	—	—	—
500	401,4	—	—	152,2	—	—	166,3	—	—	—	—	—
600	400,3	—	—	151,7	—	—	165,7	—	—	—	—	—
700	399,2	—	—	151,1	—	—	165,1	—	—	—	—	—
800	398,1	—	—	150,6	—	—	164,4	—	—	—	—	—
900	396,9	—	—	150,0	—	—	163,8	—	—	—	—	—
1000	395,7	—	—	149,4	—	—	163,1	—	—	—	—	—
1100	394,5	—	—	148,8	—	—	162,3	—	—	—	—	—
1200	393,2	—	—	148,1	—	—	161,5	—	—	—	—	—
1300	319,8	—	—	147,3	—	—	160,7	—	—	—	—	—
1400	390,4	—	—	146,5	—	—	159,7	—	—	—	—	—

Рис. 1.16. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла пентаниобия трисилицида Nb_5Si_3 :
 1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
 3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 – модуль упругости поликристалла

Алюминид никеля Ni_3Al

Таблица 1.11

Температура, °C	Величина параметра в зависимости от температуры											
	E_{100} , ГПа	$E_{100 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{110} , ГПа	$E_{110 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	E_{111} , ГПа	$E_{111 \text{ эксп}}$, ГПа	ΔE , %	$E_{\text{поли}}$, ГПа	$E_{\text{поли эксп}}$, ГПа	ΔE , %
0	114,2	—	—	171,3	—	—	232,9	230	1,3	172,8	178	3,3
100	113,3	—	—	170,0	—	—	234,1	—	—	171,5	—	—
200	112,1	—	—	168,1	—	—	228,6	—	—	169,6	—	—
300	110,5	—	—	165,7	—	—	225,3	—	—	167,2	—	—
400	108,6	—	—	162,8	—	—	221,4	—	—	164,3	—	—
500	106,3	—	—	159,4	—	—	216,7	—	—	160,8	—	—
600	103,7	—	—	155,5	—	—	211,4	—	—	156,9	—	—
700	100,7	—	—	151,1	—	—	205,5	—	—	152,4	—	—
800	97,5	—	—	146,3	—	—	198,9	215	7,5	147,6	—	—
900	94,0	—	—	141,0	—	—	191,7	210	8,7	142,2	—	—
1000	90,2	—	—	135,3	—	—	184,0	155	18,7	136,5	—	—
1100	86,2	—	—	129,3	—	—	175,8	120	46,5	130,4	—	—
1200	81,9	—	—	122,9	—	—	167,1	80	108,9	124,0	—	—
1300	77,5	—	—	116,2	—	—	158,0	—	—	117,2	—	—
1400	72,8	—	—	109,2	—	—	148,5	—	—	110,2	—	—
1500	68,0	—	—	102,0	—	—	138,7	—	—	102,9	—	—

Из табл. 1.11 видно, что величина расхождения при температурах 1100 и 1200°C возрастает с 46,5 до 108,9%. Это объясняется тем, что данная модель не учитывает растворение интерметаллидной фазы, которое начинается с температуры примерно

900°C (рис. 1.17). Например, для монокристалла интерметаллида Ni_3Al известны экспериментальные данные [13] в кристаллографическом направлении $\langle 111 \rangle$. Результаты расчета имеют удовлетворительную сходимость до температуры 900°C (рис. 1.17). Экспериментальные значения — из работы [13].

Рис. 1.17. Температурная зависимость модуля упругости интерметаллида Ni_3Al в направлении $\langle 111 \rangle$:
1 — расчетные значения; 2 — экспериментальные значения [13]

С учетом этих данных рассчитаны зависимости для направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и для поликристаллического состояния (рис. 1.18), что существенно дополняет недостающую экспериментальную информацию.

Рис. 1.18. Температурная зависимость модуля упругости монокристалла интерметаллида Ni_3Al :
1 — модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 — модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
3 — модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$; 4 — модуль упругости поликристалла

Рис. 1.19. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла NiAl:

— расчет; ..... — эксперимент

Модуль упругости монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов определяется матрицей монокристалла, т.е. γ — твердым раствором, основой которого является кристаллическая решетка никеля (табл. 1.12).

Таблица 1.12

Наименование сплава или элемента и направление действия нагрузки	Величина модуля упругости, ГПа		Расхождение, %
	расчетная	экспериментальная	
Ni (ГЦК) <100>	140,2	138,0	1,6
<110>	210,3	215,0 [7]	2,1
<111>	262,9	262,0	0,3
ЖС 6Ф моно <100>	140,2	139[14]	0,9
<110>	210,3	220	4,5
<111>	262,9	305	13,8
ЖС 32 <100>	140,2	135...140 [15]	3,8...0
<110>	210,3	—	—
<111>	262,9	280...300	6,0...12,3
ЖС 36 моно <100>	140,2	130[14]	7,8
<110>	210,3	215	2,3
<111>	262,9	305	13,8

Экспериментальные значения для ЖС 36 моно и ЖС 6Ф моно взяты из графика в [14].

Установлено, что расчетные значения модуля упругости монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов в кристаллографическом направлении <100> имеют удовлетворительную сходимость с экспериментом с расхождением от 0,9 до 7,8% (табл. 1.12). Полученные результаты позволяют обоснованно использовать модельную композицию

Ni – NbC для оценки прочности лопатки из материала типа ВКЛС с кристаллографическим направлением $\langle 100 \rangle$ в области упругих деформаций.

Необходимо отметить также, что для кристаллографических направлений $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ максимальное расхождение расчета для рассматриваемых материалов (табл. 1.12) составляет 13,8 % (в частности, для сплава ЖС 36 моно).

На рис. 1.21, 1.22 приведены расчетные температурные зависимости модуля упругости для сплавов ЖС6Ф $\langle 001 \rangle$ и ЖС36моно $\langle 111 \rangle$ [16] в сравнении с экспериментальными данными [14].

Рис. 1.20. Температурная зависимость модуля упругости сплава ЖС6Ф в направлении $\langle 001 \rangle$:
1 – расчет; 2 – эксперимент [14]

Рис. 1.21. Температурная зависимость модуля упругости сплава ЖС36моно в направлении $\langle 111 \rangle$:
1 – расчет; 2 – эксперимент [14]

Приведенные данные показывают, что:

1. Значительный объем недостающих экспериментальных данных восполняется расчетными данными, имеющими удовлетворительную сходимость.

2. Результаты расчетов модуля упругости применимы для оценки упругих характеристик поликристаллов, в том числе и для соединений, модули упругости которых редко или совсем не встречаются в справочной литературе.

3. Результаты расчетов модуля упругости применимы для проектирования композитных материалов, используемых в газотурбинных двигателях.

4. Дальнейшими исследованиями необходимо дополнить расчетную модель учтом процессов растворения фаз при высоких температурах (рис. 1.18).

1.2.3. Результаты моделирования упругих свойств наноструктур на основе углерода и кремния

Результаты расчета модуля упругости монокристаллов углерода, кремния и германия со структурой типа алмаз приведены в табл. 1.13 [17].

Таблица 1.13

Наименование элемента и направление действия нагрузки	Величина модуля упругости, ГПа		Расхождение, %
	расчетная	экспериментальная [7]	
C (алмаз) $\langle 100 \rangle$	912,2	1052	-13,3
$\langle 110 \rangle$	1596	1162	37,3
$\langle 111 \rangle$	1460	1202	21,5
поликристалл	1323	1141	16
Si $\langle 100 \rangle$	130,2	131	-0,6
$\langle 110 \rangle$	227,8	175	30,1
$\langle 111 \rangle$	208,4	199	4,7
поликристалл	188,8	162,7	16
Ge $\langle 100 \rangle$	81,0	102	-20,5
$\langle 110 \rangle$	141,8	137	3,5
$\langle 111 \rangle$	129,8	155	-16,3
поликристалл	117,5	132,3	-11,2

В частности, график изменения модуля упругости в зависимости от температуры для поликристалла германия приведен на рис. 1.22.

Рис. 1.22. Температурная зависимость модуля упругости поликристалла германия:

..... — эксперимент [7]; — расчет

Из табл. 1.13 и рис. 1.22 видно, что результаты расчета модуля упругости для C, Si, Ge имеют удовлетворительную сходимость с результатами экспериментов других авторов [7]. Это позволяет прогнозировать свойства наноструктур на основе C и Si.

Так, для графена (или углеродной нанотрубки УНТ) со структурой, приведенной на рис. 1.23 [18], определены упругие характеристики.

Рис. 1.23. Развертка углеродной нанотрубки [18]

В частности, теоретический график изменения модуля упругости в зависимости от температуры для УНТ или графена в направлении вектора r_1 (или r_2) приведен на рис. 1.24 [4].

Рис. 1.24. Расчетная температурная зависимость модуля упругости графена (УНТ)

Аналогично для силицена, имеющего структуру, показанную на рис. 1.25 [19], также определены упругие характеристики.

Рис. 1.25. Структура силицена [19]

Так, теоретический график изменения модуля упругости в зависимости от температуры для силицена в направлении вектора r_1 (или r_2) приведен на рис. 1.26.

Рис. 1.26. Расчетная температурная зависимость модуля упругости силицена

Выводы

1. Разработанный метод позволяет использовать его для компьютерного моделирования материалов в условиях отсутствия экспериментальных данных.
2. Разработанный метод позволяет рассчитывать упругие, прочностные, физические и теплофизические характеристики бездефектных монокристаллов.
3. Зная соответствующие характеристики нанобъема монокристаллов, можно прогнозировать свойства композитов. В частности, можно оценить упругие, прочностные, физические и теплофизические характеристики композиции, состоящей из атомных слоев графена и силицена и др.

1.3. Предел упругости

Рассматривается теоретический метод расчета предела упругости бездефектных монокристаллов. Нитевидные кристаллы — «усы», входящие в состав эвтектических композитов в виде армирующей фазы, представляют собой пример практической реализации бездефектных монокристаллов.

Типичная экспериментальная зависимость изменения напряжения от деформации для нитевидных кристаллов — «усов» имеет следующий вид, в частности, для кристалла меди Cu, (рис. 1.27). Характер кривой является типичным для идеальной кристаллической решетки [20].

Рис. 1.27. Диаграмма растяжения нитевидного кристалла меди [21, 22]

«На диаграмме «напряжение — деформация» имеется ярко выраженный зуб текучести (стадия I). По достижению максимального напряжения σ_{MAX} , соответствующего вершине зуба текучести, в кристалле начинается пластическая деформация: зарождаются и размножаются дислокации, образуются линии скольжения (Чернова—Людерса); увеличивается плотность дислокации, они выходят на поверхность и, как следствие всего этого, напряжение резко падает до значений σ_T . На стадии II происходит движение дислокации (распространение линий скольжения) при постоянном напряжении. Пики напряжений свидетельствуют о зарождении новых линий скольжения, а минимумы — об их выходе на поверхность. С увеличением степени деформации наступает стадия деформационного упрочнения (III). Разрушение происходит при напряжении, которое по величине соответствует пределу прочности массивных монокристаллов.

Из приведенного анализа диаграммы растяжения следует, что прочность нитевидного кристалла характеризует верхний предел текучести σ_{MAX} , а не предел прочности. Верхний предел текучести определяет максимальную прочность нитевидного бездислокационного кристалла, а образование в нем дислокации уменьшает его прочность до значений, характерных для обычных кристаллов. На основе полученных значений σ_{MAX} и зная кристаллографическую ориентировку оси нитевидного кристалла

(направление роста), можно рассчитать напряжение сдвига τ_{MAX} [22]. В механике деформируемого твердого тела для обозначения σ_{MAX} принят термин – предел упругости.

Однако существующие методы расчета определяют лишь порядок величины напряжения сдвига τ_{MAX} . Например, модель Я.И. Френкеля, где напряжение сдвига τ изменяется по закону [22]

$$\tau = \sin(x/a_0),$$

где a_0 – период кристаллической решетки. А также модель Маккензи [23], по которой, в частности, для объемно-центрированной (ОЦК) и гранецентрированной (ГЦК) кубических решеток τ_{max} определяется по формулам:

– для ОЦК решетки $\tau_{\text{max}} = G/8 - G/10 = (0,125 - 0,100)G \approx 0,110G$;

– для ГЦК решетки $\tau_{\text{max}} = G/22 - G/30 = (0,045 - 0,033)G \approx 0,039G$,

где G – модуль сдвига.

В работе решается задача определения предела упругости в следующей последовательности.

Допущения

Известно [24], что силы упругости в твердом теле обусловлены кулоновскими силами межатомного взаимодействия.

Формула расчета предела упругости выводится на основе моделей кристаллографии и закона Кулона. При этом в условиях равновесия сил притяжения и отталкивания в кристаллической решетке решается *статическая* задача.

1. Используется *геометрическая часть* модели Я.И. Френкеля [22]. В частности, на рис. 1.28 показан этап формирования дислокации и условие равновесия кулоновских сил притяжения и отталкивания, когда $\tau = 0$ при $b/2$.

Рис. 1.28. Иллюстрация модели Я.И. Френкеля, причем $b \equiv a_0$ [22]

2. Рассматривается элементарная атомная ячейка простой кубической, объемно-центрированной и гранецентрированной кристаллических решеток.

3. В условиях равновесия сил притяжения и отталкивания зарядов, а также отсутствия внешней силы в простой кубической решетке в кристаллографическом направлении $[100]$ кулоновская сила F_0 определяется по известной формуле

$$F_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2},$$

где r_0 , м – расстояние между зарядами при отсутствии внешней силы. В частности, для плоскости (100) простой кубической решетки $r_0 = a_0$.

Рис. 1.29. Схема смещения атомов в простой кубической решетке

Если прилагать внешнюю силу сдвига F в кристаллографическом направлении $[100]$ в пределах от 0 до некоторой величины приращения ΔF , то расстояние между атомами будет увеличиваться до значений $r = a_0 + \Delta r$, где r , м – расстояние между взаимодействующими зарядами в кристаллографической плоскости (100) . Атом переместится из положения 1 в положение 2 (рис. 1.29).

Тогда тангенциальное напряжение сдвига определяется как $\tau = F/A$, где A , м² – площадь сдвига.

Связь между нормальной и тангенциальной проекциями напряжения сдвига бездефектного монокристалла определяется по формуле [25]

$$\sigma_{\max} = \tau_{\max} / (\cos \alpha \cdot \cos \beta),$$

где α – угол между горизонтальной плоскостью и плоскостью сдвига; β – угол между плоскостью сдвига и направлением нормального напряжения.

В частности, для грани куба или плоскости (100) нормальная составляющая предела упругости равна тангенциальной $\sigma_{\max} = \tau_{\max}$.

Разрыв межатомной связи *при сдвиге* произойдет при $\Delta F_{\max} < F_0$, с соответствующими значениями межатомного расстояния $\Delta r = r - a_0$ и максимального угла сдвига

$\gamma/2 = \gamma_{\max}$ в соответствии с геометрической частью модели Я.И. Френкеля, тогда как разрыв межатомной связи *при отрыве* произойдет при $\Delta F_{\max} = F_0$.

Угол γ соответствует положению атома $b/2$, а угол $\gamma_{\max}$ соответствует положению атома $b/4$ (рис. 1.28).

В условиях сдвига происходит процесс, описанный в модели Френкеля, т.е. нарушение равновесия и передача связи другой паре атомов. При $F < \Delta F_{\max}$ нарушается только равновесие атомов. Межатомная связь не разрывается.

Таким образом, для вывода из равновесия атомов при сдвиге необходимо некоторое приращение силы ΔF , отличное от нуля. При этом величина предела упругости, в частности, будет определяться значением угла $\gamma_{\max}$.

Рис. 1.30. Схема смещения атомов в простой кубической решетке в плоскостях (100) и (110)

4. Для плотноупакованных кристаллографических плоскостей (100), (110) и (111) максимальный угол сдвига $\gamma_{\max}$ различается (рис. 1.30).

В частности, у простой кубической решетки для плоскости (100)

$$\gamma_{\max} = 0,5 \arctg(0,25) = 28^\circ/2 = 14^\circ,$$

а для плоскости (110)

$$\gamma_{\max} = 0,5 \arctg(0,25) = 38^\circ/2 = 19^\circ.$$

Результаты расчета геометрических параметров решетки при сдвиге приведены в табл. 1.14.

Таблица 1.14

Наименование	Величина параметра для решетки типа			
	ОЦК	ГЦК	прост. куб.	NaCl
$\gamma_{\max}$ (100)	10°	10°	14°	7°
$\gamma_{\max}$ (110)	12°	10°	19°	10°
$\gamma_{\max}$ (111)	6°	6°	11,5°	5,5°
r_0 (100)	$0,5a_0$	$0,5a_0$	$0,5a_0$	$0,5a_0$
r_0 (110)	$0,5a_0$	$0,5a_0$	$0,5a_0$	$0,5a_0$
r_0 (111)	$0,5a_0\sqrt{2}$	$0,5a_0\sqrt{2}$	$0,5a_0\sqrt{2}$	$0,5a_0\sqrt{2}$

5. Максимальная площадь сдвига не превышает a_0^2 , т.е.

$$A \leq a_0^2.$$

В частности, для плоскости (110) площадь $A = a_0 \cdot a_0\sqrt{2}$, но принимается $A = a_0^2$, т.к. в противном случае объем рассматриваемой элементарной ячейки составит

$$V = (a_0 \cdot a_0 \cdot a_0) > a_0^3,$$

и нарушаются размер и периодичность бездефектного монокристалла.

Таким образом, после подстановки значения кулоновской силы в соотношение $\tau = F/A$ при различных углах сдвига атома из положения 1 в положение 2 (рис. 1.29), в общем случае формула тангенциальной составляющей предела упругости имеет вид [26, 27]

$$\tau_{\max} = \frac{e^2}{a_0^2 \pi \epsilon_0 A} (1 - \cos^2 \gamma_{\max}) \cos \left(\frac{\pi}{2} - \gamma_{\max} \right). \quad (1.1)$$

Пример расчета предела упругости

Площадь сдвига S определяется для кристаллографических плоскостей (100), (110), (111) простой, гранецентрированной и объемно-центрированной кристаллических решеток из геометрических построений. В частности, для плоскости (100) $A = a_0^2$.

Максимальный угол сдвига определяется также из геометрических построений кристаллической решетки и составляет, в частности, для плоскости (100) гранецентрированной и объемно-центрированной кристаллических решеток $\gamma_{\max} = 10^\circ$ (табл. 1.14).

Результаты расчета тангенциальной составляющей предела упругости $\tau_{\max}$ по формуле (1.1) для монокристаллов некоторых металлов приведены в табл. 1.15. В частности, для железа Fe период кристаллической решетки $a_0 = 2,8665 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, а $\gamma_{\max} = 10^\circ$.

Таблица 1.15

Обозначение элемента	Величина $\sigma_{\max}$, МПа		Расхождение, %
	расчетная	экспериментальная	
Fe (ОЦК) (100)	711	600 [28]	18,5
Ag (ГЦК) (100)	172	160 [20]	7,5
Cu (ГЦК) (111)	701	640 [21]	9,5

Из табл. 1.15 видно, что результаты расчета дают удовлетворительную сходимость с результатами эксперимента. Так, расчетное значение тангенциальной составляющей предела упругости серебра Ag в плоскости (100) составляет 172 МПа, а экспериментальное – 160 МПа, расхождение расчета – 7,5 %.

Выводы

1. Выведена формула теоретического расчета тангенциальной составляющей предела упругости для монокристаллов. Получена удовлетворительная сходимость теоретических результатов расчета предела упругости с экспериментальными данными других авторов.
2. Выведенная теоретическая формула предела упругости позволяет получить исходные данные для оценки напряженно-деформированного состояния лопаток из эвтектических композитов (по одному из его компонентов), причем в условиях ограниченного объема экспериментальных данных.

1.4. Коэффициент Пуассона

Материал имеет множество параметров: модуль упругости, коэффициент Пуассона, предел текучести, предел временной прочности, плотность, коэффициент линейного теплового расширения, коэффициент теплопроводности и т.п. Каждая характеристика материала, в свою очередь, зависит от условий эксперимента, в частности, от температуры, формы и структуры образца. Поэтому результаты экспериментальных исследований, как правило, носят качественный характер и не в полной мере отражают свойства материала. В этом случае математическое моделирование и численный эксперимент могут дать развернутое представление о характеристиках материала (моно- и поликристаллического, композитного) при проектировании, в частности, рабочих лопаток газовой турбины.

Математическое моделирование и численный эксперимент позволяют существенно сократить объем дорогостоящих экспериментов. В частности, для экспериментов на нитевидных монокристаллах, входящих в состав эвтектических композитов, используется уникальное оборудование. Поэтому моделирование значительно снижает экономические и временные затраты в процессе проектирования элементов авиационных ГТД.

Рассматривается математическая модель расчета коэффициента поперечной деформации (коэффициента Пуассона) ν , основанная на электростатической природе упругости.

Коэффициент Пуассона определяется как отношение

$$\nu = \varepsilon_y / \varepsilon_x,$$

где ε_y — относительная деформация вдоль оси ОУ; ε_x — относительная деформация вдоль оси ОХ.

Математическая модель имеет следующие допущения.

1. Рассматривается бездефектная кристаллическая решетка.

2. По Коттреллу [25], разрушение кристаллической решетки происходит при $\varepsilon_x = 0,1$.

3. Рассматривается область упругой деформации, причем $V \neq \text{const}$.

4. Максимальное значение коэффициента Пуассона определяется на границе перехода от упругой к пластической области деформации при условии $\varepsilon_y = \varepsilon_z$ и сохранении постоянного объема (рис. 1.31).

Тогда в исходном состоянии (без нагрузки) при условии $x = 1, y = 1, z = 1$

$$V = xyz = 1.$$

В деформированном состоянии (с нагрузкой)

$$x_1 = x + \Delta x; \quad y_1 = y - \Delta y; \quad z_1 = z - \Delta z.$$

Так, при максимальном значении упругой продольной деформации по Коттреллу [25] $\varepsilon_x = 0,1$, максимальное значение коэффициента Пуассона будет равно $\nu_{\text{max}} = 0,47 \cong 0,5$.

При этом $y_1 = 0,953y, z_1 = 0,953z$, тогда

$$V = xyz = 1,1 \cdot 0,953 \cdot 0,953 = 0,999 \cong 1.$$

Последовательность расчета коэффициента Пуассона для элементарной атомной ячейки бездефектной кристаллической решетки следующая.

При $x = y = z = a_0$ кулоновская сила без нагрузки, т.е. при $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0$

$$F_{\text{кул1}} = c/a_0^2,$$

где $c = e^2/4\pi\varepsilon_0$ — коэффициент, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл — заряд электрона; $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Кл²/Нм² — электрическая постоянная; a_0 — период кристаллической решетки.

Кулоновская сила при поперечном сжатии, т.е. при $y_1 = 0,953y$ или $0,953a_0$ (рис. 1.32)

$$F_{\text{кул2}} = c/(0,953a_0)^2.$$

Рис. 1.31. Схема геометрического моделирования поперечной деформации при продольном растяжении твердого тела

Рис. 1.32. Схема геометрического моделирования поперечной деформации при продольном растяжении элементарной атомной ячейки

Изменение кулоновской силы при сжатии

$$\Delta F = F_{\text{кул2}} - F_{\text{кул1}}.$$

Период кристаллической решетки с учетом изменения кулоновской силы

$$a_0^* = \sqrt{\frac{c}{F_{\text{кул1}} + \Delta F}} < a_0.$$

Изменение периода кристаллической решетки с учетом изменения кулоновской силы

$$\Delta a_0 = a_0 - a_0^*.$$

Относительная поперечная деформация после несложных преобразований определяется по формуле [29, 30]

$$\varepsilon_y = \frac{\Delta a_0}{a_0} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{k^2} \left(\frac{1}{0,953^2} - 1 \right)}},$$

где $k = 1 + k_{\text{стр}} N_{\text{орб}}$; $k_{\text{стр}}$ – коэффициент, учитывающий тип структуры монокристалла; $N_{\text{орб}}$ – среднее число незаполненных орбиталей внешней электронной оболочки атома.

Тип кристаллической решетки можно определить по справочным данным.

Относительная поперечная деформация

$$\varepsilon_y = \Delta a_0 / a_0.$$

Коэффициент поперечной деформации (коэффициент Пуассона)

$$\nu = \varepsilon_y / \varepsilon_x = \varepsilon_y / 0,1.$$

Результаты расчетов для некоторых монокристаллических металлов приведены в табл. 1.16.

Таблица 1.16

Символ элемента	Величина коэффициента Пуассона		
	расчетная	справочная	погрешность, %
Al	0,33	0,36 [31]	8,3
Cu	0,377	0,35 [32]	7,7
Mo	0,328	0,335 [32]	2,0
W	0,257	0,26 [31]	1,2
Ta	0,237	0,24 [31]	1,3
Ni	0,404	0,342* [32]	18,1
Fe	0,308	0,3* [32]	2,7

Примечания: значения со звездочкой, приведенные в справочнике, определены расчетом.

Из табл. 1.16, в частности, видно, что расчетное значение коэффициента Пуассона железа Fe равно 0,308, а справочное значение – 0,3.

Выводы

1. Математическая модель расчета коэффициента Пуассона применима для оценки упругих характеристик моно- и поликристаллов, в том числе соединений, по которым редко или совсем не встречается справочная информация.
2. Математическая модель расчета коэффициента Пуассона применима для проектирования эвтектических композитных материалов, используемых в газотурбинных двигателях.
3. Одним из направлений развития нанотехнологий является полное трехмерное управление структурой материалов на атомном уровне с целью размещения каждого атома на своем месте. В этих условиях важно заранее знать упругие и прочностные характеристики нанообъемов монокристаллов с бездефектной структурой. Откуда следует необходимость наличия расчетных формул упругих характеристик, в частности, коэффициента Пуассона.

1.5. Предел текучести

В настоящее время предела текучести определяется, как правило, экспериментальными методами.

Экспериментальная зависимость изменения напряжения от деформации для нитевидных монокристаллов — «усов» — имеет вид (в частности, для монокристалла Cu), представленный на рис. 1.26.

В работе предлагается модель диаграммы «напряжение — деформация» нитевидных монокристаллов, основанная на электростатической природе упругости.

В основу расчета положены следующие **допущения**.

1. Рассматриваются бездефектные кристаллические решетки металлов, исследованные экспериментально в виде нитевидных кристаллов — «усов», которые деформируются пластически [20].
2. Используется геометрическая часть модели Френкеля [22].
3. Максимальное напряжение сдвига или предела упругости определяется по модели, приведенной в разделе 1.3.
4. Под пределом текучести понимается определение, общепринятое для металлов. Причем для нитевидных монокристаллов принимается среднее значение предела текучести по отклонениям на диаграмме «напряжение — деформация» (рис. 1.26).
5. Связь между нормальной и тангенциальной проекциями напряжения сдвига бездефектного монокристалла определяется по формуле [22]

$$\sigma_{\max} = \tau_{\max} / (\cos \alpha \cdot \cos \beta), \quad (1.2)$$

где α — угол между горизонтальной плоскостью и плоскостью сдвига; β — угол между плоскостью сдвига и направлением нормального напряжения.

6. Решается *статическая* задача на основе закона Кулона

$$F_{\text{кул}} = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}.$$

Теоретическая зависимость изменения напряжения от деформации для нитевидных кристаллов — «усов», предложенная автором, представлена на рис 1.33 и отличается от экспериментальной [21] участком 2–3.

Рис. 1.33. Теоретическая модель диаграммы растяжения нитевидного монокристалла

В основе сил упругости лежат межатомные взаимодействия электростатической природы [24, 33]. Поэтому участок 2–3 на рис. 1.33 моделируется с помощью закона Кулона и определяется степенной функцией с целым отрицательным показателем вида $y = c/x^2$, так как

$$F_{\text{Кул}} = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2},$$

где $F_{\text{Кул}}$ — кулоновская сила взаимодействия между зарядами Q_1 и Q_2 ; r — расстояние между взаимодействующими зарядами. Но напряжение пропорционально силе, т.е. σ (или τ) $\sim F_{\text{Кул}}$, следовательно, в окончательном виде [34, 35] участок 2–3

на рис. 1.33 определяется функцией

$$\tau = c/(x/a_0)^2, \quad (1.3)$$

где a_0 — период кристаллической решетки; x/a_0 — угловая деформация при сдвиге простой кубической решетки.

Из соотношения (1.2) определяется нормальная проекция напряжения сдвига — предела текучести.

В точке 2 напряжение $\sigma = \sigma_{\text{max}}$ (соответственно тангенциальное напряжение $\tau = \tau_{\text{max}}$) — это так называемый «зуб текучести». В точке 3 напряжение равно пределу текучести $\sigma = \sigma_{\text{т}}$ (соответственно $\tau = \tau_{\text{тек}}$), при котором монокристалл переходит в поликристалл за счет формирования дислокаций.

Таким образом, зная координаты точки 2 (значения τ_{max} и x/a_0 из раздела 1.3) и вид функции (1.3), вычисляется коэффициент c , а затем определяют координаты точки 3, т.е. значение $\tau_{\text{тек}}$ по величине деформации $x = 0,5a_0$, определяемой по Френкелю. В соответствии с моделью Френкеля в точке с координатой $x = 0,5a_0$ теоретическое значение напряжения сдвига равно нулю $\tau = 0$, т.е. атомы находятся в неравновесном состоянии, но на практике (рис. 1.26) [22] пластическое течение происходит при некотором постоянном значении напряжения $\sigma_{\text{т}}$ (или $\tau_{\text{тек}}$).

Таким образом, участок 2–3 имеет координаты $[0,07a_0; 0,5a_0]$ по оси абсцисс.

Результаты расчета напряжения сдвига в точке 3, т.е. предела текучести $\tau_{\text{тек}}$, приведены в табл. 1.17.

В соответствии с диаграммой «напряжение — деформация» (рис. 1.26), начиная с предела текучести, вследствие зарождения дислокаций монокристалл переходит в поликристалл, поэтому значения предела текучести монокристалла и поликристалла одинаковы. Это позволяет сравнивать результаты расчета для монокристаллов с экспериментальными значениями предела текучести поликристаллов. Данное сравнение допустимо, в частности, для недеформированных поликристаллов (технических и отожженных).

Как видно из табл. 1.17, результаты расчета удовлетворительно сходятся с результатами экспериментов.

Таблица 1.17

Наименование элемента, плоскость скольжения	Величина $\tau_{\text{тек}}$, МПа		Погрешность, %	Источник
	расчетная	эксперимент.		
Cu (ГЦК) (100)	58,7	18*...60	—	[20, 21]
Ag (ГЦК) (100)	36,0	40 (32,3 отожжен.)	10	[20] [7]
Cd (ГП) (0001)	10	5* (9,81)	—	[20] [7]
Fe (ОЦК) (100)	148	(177 технич.) (123 отожжен.)	—	[7]

Примечания: * — в экспериментальных данных не указана кристаллографическая плоскость скольжения, поэтому погрешность не рассчитывалась; в скобках указаны экспериментальные значения для недеформированных, с точки зрения технологии изготовления, поликристаллов (технических и отожженных).

Таким образом, зная значение максимального напряжения сдвига, можно рассчитать величину предела текучести для монокристаллов как металлов, так и неметаллов, например, карбидов и нитридов. Результаты работы можно использовать в практических расчетах на прочность бездефектных монокристаллов, в частности, для эвтектических композиционных материалов с нитевидными монокристаллами, используемых в рабочих лопатках газовых турбин, а также для недеформированных (с точки зрения технологии изготовления) поликристаллов.

1.6. Теплофизические и физические характеристики

1.6.1. Коэффициент теплового расширения

В настоящее время задача учета межатомного взаимодействия в кристаллической решетке для определения коэффициента теплового расширения кристаллов решается различными способами.

Так, коэффициент теплового расширения α связан с температурой плавления и может характеризовать силу межатомной связи [2]. Максимальная сила межатомной связи приходится на металлы с максимальными температурами плавления и минимальными значениями коэффициента термического расширения. Соответственно эти металлы имеют и минимальные межатомные расстояния.

Для металлов с кубической решеткой коэффициент α связан с температурой плавления соотношением $\alpha T_{\text{пл}} \cong 0,02$. Кроме того, для веществ с металлическим характером связи имеется эмпирическое соотношение $\alpha = 7,24 \cdot 10^{-2} / T_{\text{пл}}^{1,19}$ [2]. Однако эти соотношения не позволяют установить зависимость коэффициента теплового расширения от эксплуатационной температуры.

Расчет α , учитывающий ангармоническую составляющую колебаний атомов, по формуле [36]

$$\alpha = \frac{1}{x_0} \frac{d\langle x \rangle}{dT} = \frac{3k_B g}{4\beta^2 x_0},$$

где g и β — функции потенциала U ; x — расстояние; T — температура, предполагает знание потенциала кристаллической решетки U и также не имеет методики инженерного расчета коэффициента теплового расширения.

Для оценки коэффициента теплового расширения по формуле Гилмана [2] необходимо знать силу межатомного сцепления σ_c

$$\sigma_c = 3k/(8\alpha V),$$

где k – постоянная Больцмана; V – средний атомный объем.

Поэтому актуальной является задача *инженерного* расчета коэффициента теплового расширения применительно к моно- и поликристаллам материалов, в частности, лопаток газовых турбин.

Вследствие периодичности и симметрии бездефектного монокристалла свойства элементарной атомной ячейки передаются кристаллической решетке. Поэтому для атомной ячейки и кристаллической решетки в целом коэффициент теплового расширения определяется как

$$\alpha = \Delta a_0 / (a_0 \Delta T).$$

Так, температурная зависимость коэффициента теплового расширения для хрома, меди, алюминидов никеля приведены на рис. 1.34–1.36 [37].

Рис. 1.34. Температурная зависимость коэффициента теплового расширения хрома Cr

Рис. 1.35. Температурная зависимость коэффициента теплового расширения меди Cu

Рис. 1.36. Температурная зависимость коэффициента теплового расширения алюминид никеля NiAl

Рис. 1.37. Температурная зависимость коэффициента теплового расширения алюминия Al

Из рис. 1.34–1.37 видно, что результаты расчета удовлетворительно сходятся со справочными данными [7].

Выводы

1. Полученная формула позволяет определять теоретическую зависимость коэффициента теплового расширения от температуры и сократить объем экспериментов.
2. Результаты расчета коэффициента теплового расширения армирующей фазы и матрицы эвтектического композита или монокристалла являются исходными данными для оценки термических напряжений в материале лопатки турбины.

1.6.2. Модель распространения колебаний и коэффициент теплопроводности

Явление распространения колебаний в твердых телах, в частности в кристаллах, имеет большое практическое значение в технике. С ним связаны процессы распространения колебаний в кристаллах и теплопроводность.

В данном разделе рассматривается модель скорости распространения колебаний в монокристаллах.

Допущения

1. Рассматривается неподвижная кристаллическая решетка, принятая в кристаллографии.
2. Не учитывается факт, что атомы являются осцилляторами.
3. Решается статическая задача из условия равновесия кулоновских сил притяжения и отталкивания между двумя ближайшими зарядами в элементарной атомной ячейке монокристалла.
4. Вследствие симметрии и периодичности бездефектного монокристалла свойства ячейки передаются макрообъему.

Скорость распространения колебаний в монокристаллах определяется по формуле, выведенной автором из условия равенства кинетической энергии колебания атома $U_{\text{кин}}$ относительно узла кристаллической решетки

$$U_{\text{кин}} = \frac{mv_{\text{зв}}^2}{2}, \quad (1.4)$$

вызванной внешним воздействием (например, тепловым), с одной стороны, и энергии электростатического противодействия атома $U_{\text{эл}}$ внешнему воздействию, с другой стороны,

$$U_{\text{эл}} = e^2/4\pi\epsilon_0 r, \quad (1.5)$$

где $m = m_A \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}$, кг — масса атома; m_A — атомная масса химического элемента; v — скорость передачи колебаний от одного атома к другому (скорость звука); e — элементарный заряд, равный заряду электрона; r — расстояние между ближайшими атомами — соседями; ϵ_0 — электрическая постоянная.

Тогда можно записать

$$mv^2/2 = e^2/4\pi\epsilon_0 r.$$

Откуда скорость распространения колебаний v в моно- и поликристаллах [38]

$$v = \frac{e}{\sqrt{2\pi\epsilon_0 r m}} = \frac{e}{\sqrt{2\pi\epsilon_0 r m_A \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}}. \quad (1.6)$$

Следует отметить, что соотношение (1.5) характеризует скорость распространения колебаний между двумя соседними зарядами в элементарной атомной ячейке кристаллической решетки.

В частности, для никеля с гранецентрированной кристаллической решеткой $r = a/\sqrt{2} = 2,556 \cdot 10^{-10}$ м. После подстановки $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ Кл и $m = 58,7$ (атомной массы никеля) получим значение скорости звука в моно- или поликристалле никеля Ni, равное 4380 м/с.

Результаты некоторых расчетов сведены в табл. 1.18.

Из табл. 1.18 видно, что расчетная величина скорости распространения колебаний для никеля Ni составляет 4380 м/с, а справочное значение [39] для v_3 — 4785 м/с. В табл. 1.18 приведены минимальные расхождения с расчетом. Поэтому по результатам сравнительного анализа из табл. 1.18 можно заключить, посредством каких волн распространяются колебания в данном химическом элементе. В частности, для алюминия это продольные волны, т.к. минимальное расхождение, соответствующее v_1 , составляет 9,2 %. А для никеля — продольные и поперечные волны с расхождением 8,5 %.

Таблица 1.18

Результаты расчета скорости распространения колебаний

Символ элемента	Величина скорости, м/с				Расхождение в % для		
	расчетная	справочная [39]					
		v_1	v_2	v_3	v_1	v_2	v_3
Al	5991	6601	3103	5092	9,2	—	—
Ni	4380	5413	2979	4785	—	—	8,5
Ag	2983	3732	1699	2806	—	—	6,3
Cu	4131	4702	2257	3711	—	—	11,3
W	2345	5141	2794	4491	—	16	—
Pb	1955	2137	6993	1187	8,5	—	—
Ir	4790	5341	3041	4828	—	—	0,7
Au	2209	3084	1204	2023	—	—	9,2
Ta	2314	4286	2059	3137	—	12,4	—

Расчет скорости распространения колебаний в монокристаллах необходим, в частности, для определения коэффициента теплопроводности.

Формула расчета коэффициента теплопроводности выводится в следующей последовательности [40].

Известно, что перенос энергии в форме теплоты подчиняется закону Фурье

$$j = -\lambda(\Delta T/\Delta x),$$

где j — плотность теплового потока — величина, определяемая энергией, переносимой в форме теплоты Q в единицу времени τ через единичную площадку A , перпендикулярную оси x , λ — коэффициент теплопроводности; $\Delta T/\Delta x$ — градиент температуры, равный скорости изменения температуры на единицу длины x в направлении нормали к этой площадке.

Исходя из определения, закон Фурье можно записать в следующем виде

$$\frac{Q}{A\tau} = \lambda \frac{\Delta T}{\Delta x},$$

откуда

$$\lambda = \frac{c'_v \Delta T \Delta x}{A\tau \Delta T},$$

где $Q = c'_v \Delta T$; c'_v — теплоемкость одного атома, или

$$\lambda = \frac{c'_v \Delta x}{A\tau}.$$

Допущения

1. Рассматривается элементарная ячейка монокристалла в виде куба со стороной, равной периоду кристаллической решетки a .

2. В качестве единичной площадки принимается $A = a_0^2$.

3. Единица времени τ в элементарном объеме не равна одной секунде $\tau \neq 1$ с, тогда время процесса передачи колебаний между двумя атомами в ячейке можно определить по формуле $\tau = \Delta x/v$, где Δx – расстояние между ближайшими соседями-атомами.

4. Колебания в ячейке атома распространяются в наиболее плотноупакованных плоскостях (рис. 1.38). В пределах одной кристаллографической плоскости могут распространяться одна или две плоские волны: продольная и (или) поперечная.

Рис. 1.38. Кристаллографические направления и плоскости ГЦК решетки

5. Теплоемкость одного атома постоянная величина и определяется в соответствии с законом Дюлонга и Пти, т.е.

$$c'_v = \frac{c_v}{N_A} = 3k = 4,1421 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К},$$

где N_A – число Авогадро; k – постоянная Больцмана.

В общем случае теплоемкость одного атома зависит от температуры.

6. Коэффициент теплопроводности характеризует передачу тепла. Тепло в кристалле передается за счет кинетической энергии колебаний атомов в кристаллической решетке равной $(mv^2)/2$. Иначе говоря, в формуле расчета коэффициента теплопроводности необходимо учитывать массу. Масса учитывается через атомную массу элемента m_A и коэффициент ретикулярной плотности k_p элементарной атомной ячейки.

С учетом перечисленных допущений формула расчета коэффициента теплопроводности для монокристаллов примет следующий вид [40]

$$\lambda = \frac{c'_v \Delta x m_A k_p}{a^2 \Delta x / v} = \frac{c'_v v m_A k_p}{a^2}. \quad (1.7)$$

Результаты расчетов для некоторых металлов сведены в табл. 1.19. Примечание: итоговое значение λ оценивается, в частности, как сумма λ для плотноупакованных плоскостей ячейки, либо как половина среднего значения λ в соответствии с четвертым допущением. Справочные значения в табл. 1.19 приведены из работы [7].

Из табл. 1.19, в частности, видно, что расчетная величина коэффициента теплопроводности для меди Cu составляет 406 Вт/м·К, а справочное значение – 401,2 Вт/м·К [7], расхождение – 1,2 %.

Таким образом, удовлетворительная сходимость расчета с экспериментальными данными, полученными другими авторами, подтверждают адекватность разработанной модели.

Таблица 1.19

Результаты расчета коэффициента теплопроводности

Обозначение химического элемента	Расчетное значение λ , в зависимости от кристаллографического направления, Вт/(м·К)			Результирующие значения $\lambda_{\text{расч}}$, Вт/(м·К)	Справочное значение λ , Вт/(м·К)	Расхождение, %
	$\lambda [010]$	$\lambda [\bar{1}10]$	$\lambda [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$			
Cu	117,68	176,53	112,1	406	401,2	1,2
Ag	112,9	169,4	107,57	390	453	13,9
Al	57,76	86,64	55,02	199,4	221,5	9,9
Cr	69,068	207,2	168,8	74,2	88,6	16,2
Fe	72,67	218	177,6	78	75,8	2,9
Ni	120,59	180,89	114,8	69,4	67	3,6
Rh	131,878	197,81	125,6	75,9	87,8	13,6
Pd	126,98	190,5	120,96	73,8	72,1	2,3
W	102,9	308,77	251,6	154,3	154	0,2
Pb	96,81	145,22	92,2	72,6	72,1	0,7
Ta	91,82	275,5	224,5	45,9	45,2	1,5
V	60,57	181,7	148,1	30,3	31	2,3

Результаты оценки коэффициента теплопроводности являются исходными данными для расчета напряженно-деформированного состояния рабочей лопатки турбины, изготовленной из монокристаллических сплавов и эвтектических композитов.

1.6.3. Плотность кристаллических структур

В расчетах на прочность лопатки турбины необходимо знать плотность материала. В частности, ее величину для матрицы и армирующей фазы эвтектического композита лопатки, чтобы оценить величину объемных сил инерции при вращении рабочего колеса турбины. Решение данной задачи является одним из этапов обобщенной модели прочности лопатки [41] (рис. 1.39).

Рис. 1.39

В данном разделе обосновывается расчет плотности монокристаллов.

Плотность монокристаллов ρ определяется по известной формуле

$$\rho = m/V,$$

где m — масса; V — объем.

В рассматриваемом случае в качестве объема принимается объем элементарной атомной ячейки с периодом кристаллической решетки a_0 , равный

$$V = a_0^3.$$

Масса элементарного объема определяется по следующей формуле:

$$m = m_A M_{\text{ед}} k_p,$$

где m_A — атомная масса элемента; $M_{\text{ед}} = 1,66 \cdot 10^{-27}$ кг — атомная единица массы; k_p — коэффициент ретикулярной плотности для элементарной атомной ячейки (рис. 1.40).

Рис. 1.40. Схема формирования ретикулярной плотности в ячейке [42]

Коэффициент ретикулярной плотности элементарной ячейки кристаллической структуры определяется в соответствии с правилами кристаллографии [43].

Тогда формула расчета плотности монокристалла, разработанная автором, примет следующий вид [44]

$$\rho = (m_A M_{\text{ед}} k_p) / a_0^3.$$

Плотность монокристалла простого вещества, состоящего из атомов одного химического элемента железа — Fe с объемно-центрированной кристаллической решеткой, определяется как

$$\rho = \frac{m_A M_{\text{ед}} k_p}{a_0^3} = \frac{55,847 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \cdot 2}{(2,8665 \cdot 10^{-10})^3} = 7871,9 \text{ кг/м}^3.$$

Плотность монокристалла простого вещества, состоящего из атомов одного химического элемента меди — Cu с гранецентрированной кристаллической решеткой, определяется как

$$\rho = \frac{m_A M_{\text{ед}} k_p}{a_0^3} = \frac{63,546 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \cdot 4}{(3,6148 \cdot 10^{-10})^3} = 8933 \text{ кг/м}^3.$$

Плотность сложных веществ или соединений, состоящих их атомов разных химических элементов типа NaCl, определяется как сумма плотностей составляющих химических элементов, т.е.

$$\rho_{\text{NaCl}} = \sum \rho_i = \frac{m_{\text{Na}} k_{p\text{Na}} M_{\text{ед}}}{a_0^3} + \frac{m_{\text{Cl}} k_{p\text{Cl}} M_{\text{ед}}}{a_0^3} = \frac{(m_{\text{Na}} k_{p\text{Na}} + m_{\text{Cl}} k_{p\text{Cl}}) M_{\text{ед}}}{a_0^3} =$$

$$= \frac{(22,989 \cdot 4 + 35,453 \cdot 4) \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}{(5,63 \cdot 10^{-10})^3} = 2174 \text{ кг/м}^3,$$

где $k_{p\text{Na}}$, $k_{p\text{Cl}}$ – коэффициент ретикулярной плотности соответственно для Na и Cl; m_{Na} , m_{Cl} – атомная масса соответственно для Na и Cl; a_0 – период кристаллической решетки NaCl (табл. 1.20).

Таблица 1.20

Символ элемента, соединения	Величина плотности ρ , кг/м ³		Расхождение, %
	расчетная	экспериментальная	
Fe	7871,9	7872	0
Cu	8933	8933	0
NaCl	2174,5	2100	3,5

Из табл. 1.20 видно, что расчетная величина плотности для железа Fe составляет 7871,9 кг/м³, а экспериментальное значение – 7872 кг/м³ [7].

Результаты некоторых расчетов плотности приведены в табл. 1.21.

Таблица 1.21

Наименование элемента	Величина плотности, кг/м ³		Погрешность, %	Источник
	расчетная	экспериментальная		
Mo (ОЦК)	10219,9	10218 (10200)	0,02	[7]
W (ОЦК)	19248,5	19263 (19230)	0,08	[7]
Ta (ОЦК)	16678,6	16623 (16600)	3,3	[7]
Nb (ОЦК)	8581,5	8630 (8570)	5,6	[7]
TaC (кубич)	14625,0	14500	8,6	[7]

Примечание. Приведены рентгеновская и пикнометрическая (в скобках) экспериментальные значения плотности.

Как видно из табл. 1.20, 1.21, результаты расчетов удовлетворительно сходятся с результатами экспериментов.

Таким образом, результаты расчета применимы для оценки плотности моно- и поликристаллов, в том числе соединений, по которым редко или совсем не встречается справочная информация.

Результаты расчета плотности моно- и поликристаллов, из которых состоит матрица эвтектических композитов, являются исходными данными для моделирования прочности лопаток газовых турбин.

1.7. Коэффициент интенсивности напряжений. Ударная вязкость

«В современной технике при расчетах оценки прочности тел с трещинами сложные методы математической теории трещин должны в практических целях дополняться более простыми методами вычислений. Хотя такие методы могут иметь пониженную точность вычислений, но это компенсируется достаточно малой трудоемкостью и быстротой получения требуемой оценки» [45].

1.7.1 Краткие сведения о существующих характеристиках и моделях разрушения

«Вязкость разрушения. Для высокопрочных материалов большое распространение получили статические испытания образцов с надрезом и трещиной для определения вязкости разрушения – сопротивления распространению трещины.

Теоретической основой испытания на вязкость разрушения является линейная механика разрушения. Разработанные Ж. Ирвиным положения механики разрушения позволяют оценить влияние трещин и подобных дефектов на сопротивление материала хрупкому разрушению. Базой для линейной механики разрушения послужили работы А. Гриффитса, который показал, что хрупкое разрушение связано с наличием в материале трещин, вызывающих локальную концентрацию напряжений, и происходит за счет энергии, накопленной в результате упругой деформации» [46].

«Задача определения напряженного состояния около конца трещины отличается от обычных задач определения концентрации напряжений тем, что геометрически линеаризованная постановка краевых условий и физически линейная теория упругости приводят к бесконечным напряжениям и бесконечным градиентам напряжений в конце тонкого разреза. При этом понятие коэффициента концентрации напряжений теряет смысл.

Это означает отказ от использования коэффициента концентрации напряжений в пользу асимптотического представления напряженного состояния у конца разреза. Радиальное и угловое распределения для асимптотики напряженного состояния *не зависят от длины трещины, формы тела и схемы действующих нагрузок*. Интенсивность же этого распределения зависит только от одного множителя K , который, наоборот, не зависит от координат точек вблизи конца разреза. Следовательно, процессы разрушения материала инициируются и управляются интенсивностью (окружающего конец трещины) поля напряжений, характеризующейся *коэффициентом интенсивности напряжений* (КИН). В отличие от коэффициента концентрации коэффициент интенсивности напряжений есть размерная величина ($\text{МПа} \cdot \sqrt{\text{м}}$)» [47].

«Широкое распространение получили испытания на ударный изгиб образцов с искусственно полученной в основании надреза трещиной усталости. Работа разрушения таких образцов $a_{\text{н}}$ находится в целом в удовлетворительном соответствии с такой характеристикой разрушения, как КИН – K_{IC} » [48].

1.7.2. Обоснование расчетной модели коэффициента интенсивности напряжений

В отличие от моделей механики сплошной среды разработанная модель, учитывающая кулоновские силы межатомного взаимодействия в кристаллической решетке, позволяет оценить величину напряжений в вершине трещины.

Допущения

1. Физической основой расчетной модели являются электростатические силы притяжения и отталкивания между узлами кристаллической решетки, определяемые законом Кулона

$$F_{\text{кул}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}.$$

2. За расчетную формулу КИН принимается соотношение, основанное на концентрации напряжений [45]

$$K_{1C} = \sigma_{\text{max}} \sqrt{\pi \cdot r},$$

где σ_{max} , r — максимальное напряжение и радиус скругления в вершине трещины ($\pi \cdot r$ — длина полуокружности в вершине трещины). Причем это не «приводит к бесконечным напряжениям и бесконечным градиентам напряжений в конце тонкого разреза», так как в основу расчета заложены конечные значения кулоновских сил в вершине трещины.

3. Используется известное положение о том, что КИН «не зависит от длины трещины, формы тела и схемы действующих нагрузок». Поэтому рассматривается модельная нанотрещина следующей геометрии (рис. 1.41, а). «В модели жестких сфер нерелаксированная идеальная граница совпадающих узлов не может соответствовать минимум энергии. Чтобы уменьшить сумму энергий соседних кристаллов необходимо сместить кристаллы один относительно другого. Хотя границы совпадающих узлов после указанного смещения зерен уже не существует, периодичность строения границ сохраняется и сохраняется сегмент повторяемости p (рис. 1.41, б), равный соответствующему сегменту идеальной границы совпадающих узлов (рис. 1.41, а)» [43].

Результаты расчета коэффициента интенсивности напряжения с учетом кристаллографического направления и поликристаллического состояния (равноосной структуры) для некоторых металлов приведены в табл. 1.22.

Рис. 1.41. Наклонная граница $37 \langle 001 \rangle$ между зернами с кубической решеткой в положении совпадения (а) и после жесткой релаксации (б)

Таблица 1.22

Наименование элемента	Величина коэффициента интенсивности напряжения, МПа · √м		Источник справочных данных
	расчетная	справочная	
Cu <001>	42,7	—	—
Cu <110>	64,2	—	—
Cu <111>	75,5	—	—
Cu поликрист.	60,8	—	—
Сплавы Cu	—	50...110	[49]
Al <001>	35,3	—	—
Al <110>	53,0	—	—
Al <111>	62,4	—	—
Al поликрист.	50,3	—	—
Сплавы Al	—	10...60	[49]
Fe <001>	33,7	—	—
Fe <110>	44,1	—	—
Fe <111>	43,4	—	—
Fe поликрист.	40,7	—	—
Стали	—	20...150	[49]
Ni <001>	59,7	—	—
Ni <110>	89,6	—	—
Ni <111>	105,5	—	—
Ni поликрист.	84,9	—	—
Сплавы Ni	—	60...110	[49]

Поскольку экспериментальных значений КИН для монокристаллов металлов в справочниках не удалось найти, то результаты расчета сравниваются со значениями для сплавов на основе соответствующего металла. Из табл. 1.22 видно, что такая приближенная оценка укладывается в диапазон справочных данных.

1.7.3. Ударная вязкость

«Ударная вязкость — способность материала поглощать механическую энергию в процессе деформации и разрушения под действием ударной нагрузки. Обычно оценивается работой, необходимой для деформации и разрушения призматического образца с односторонним поперечным надрезом при испытании на ударный изгиб, условно отнесенной к сечению образца в основании надреза; обозначается символом a_n . Ударная вязкость — одна из наиболее важных прочностных характеристик металла» [48].

Допущения

1. Рассматривается образец прямоугольного сечения 10·10 мм по ГОСТ 9454-60.
2. Работа разрушения таких образцов a_n находится в целом в удовлетворительном соответствии с такой характеристикой разрушения, как КИН — K_{IC} , поэтому физической основой расчетной модели являются электростатические силы притяжения и отталкивания между узлами кристаллической решетки, определяемые законом Кулона

$$F_{\text{кул}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}.$$

3. Работа разрушения для одной межатомной связи определяется как работа перемещения одного атома на расстояние двойного радиуса [45].

Результаты расчета *ударной вязкости* для некоторых металлов приведены в табл. 1.23.

Таблица 1.23

Наименование элемента	Величина ударной вязкости, МДж/м ²		Источник
	расчетная	экспериментальная	
Cu <001>	1,36	—	[7]
Cu <110>	2,04	—	
Cu <111>	2,40	—	
Cu поликрист.	1,93	—	
Сплавы Cu	—	1,76	
Al <001>	—	—	[7]
Al <110>	—	—	
Al <111>	—	—	
Al поликрист.	1,14	—	
Сплавы Al	—	0,71...3,35	
Fe <001>	2,65	—	[7]
Fe <110>	3,45	—	
Fe <111>	3,43	—	
Fe поликрист.	3,17	—	
Стали	—	2,35	
Ni <001>	2,05	—	[7]
Ni <110>	3,08	—	
Ni <111>	3,63	—	
Ni поликрист.	2,92	—	
Сплавы Ni	—	3,34...3,68	

Справочные данные приведены для поликристаллического состояния металлов. Из табл. 1.23 видно, что расчетные значения укладываются в диапазон справочных данных для сплавов на основе рассматриваемого металла.

1.8. Термические напряжения

Допущения

1. Для расчета термических напряжений $\sigma_{\text{терм}}$ используется известная зависимость, справедливая для области упругих деформаций

$$\sigma_{\text{терм}} = E_{\text{юнг}} \cdot \varepsilon_t,$$

где $E_{\text{юнг}}$ — модуль упругости; $\varepsilon_t = \alpha \cdot \Delta t$ — термическая деформация; α — коэффициент теплового расширения; Δt — перепад температуры.

2. Рассматривается термонапряженное состояние тонких кромок лопаток газовых турбин: входная и выходная кромки пера лопатки; тонкие стенки охлаждающих поверхностей внутренней полости пера лопатки.

3. Результаты сравнительных расчетов термических напряжений в пространственной и линейной постановках задачи дают практически совпадающие сведения о термонапряженности для области кромок лопаток [50].

Поскольку эквивалентное напряжение есть одноосное напряжение, эквивалентное сложно напряженному состоянию, то одноосные термические напряжения сравниваются с эквивалентными.

4. В линейной постановке задачи более нагретые части сжимаются, а менее нагретые – растягиваются [51].

В более нагретых частях стержня возникают сжимающие температурные напряжения. Физически это объясняется тем, что крайние волокна стержня получают большую температурную деформацию и при отсутствии поперечных связей стержня деформируются так, как показано на рис. 1.42, а. Поперечные связи удерживают крайние волокна (рис. 1.42, б), создавая в них напряжения сжатия, а в менее нагретых частях стержня – растяжение.

Рис. 1.42. Картина температурных деформация в стержне:
а – поперечные связи отсутствуют, б – в конце стержня имеется жесткая пластина

Комментарии к рис. 1.42. Рассматривается одноосное растяжение двух неодинаково нагретых участков. Поперечные сечения остаются плоскими и перпендикулярными к оси (гипотеза плоских сечений), температура при нагреве каждого участка равномерно распределена по объему. В результате нагрева (или охлаждения) каждый из участков будет иметь неодинаковую деформацию вследствие различных температур (рис. 1.43).

Рис. 1.43. Схема термического расширения
неодинаково нагретых двух участков тела

Как видно из рис. 1.43, результатом такого взаимодействия является средняя деформация, обозначенная пунктиром.

5. Для определения термической деформации в направлении распространения теплового потока (температуры) в линейной постановке задачи модель, приведенная в работе [51], преобразована в следующий вид (рис. 1.44).

Рис. 1.44. Схема одноосного деформирования при неодинаковом нагреве участков 1 и 2

Тогда средняя величина деформации в соответствии со схемой одноосного деформирования при неодинаковом нагреве участков 1 и 2 тела определяется по формуле

$$\Delta \varepsilon = \varepsilon_1/2 + (-\varepsilon_2/2),$$

где $\varepsilon_1/2$ — средняя деформация первого участка; $\varepsilon_2/2$ — средняя деформация второго участка.

Пример решения задачи при одноосном деформировании.

В основе моделирования лежат экспериментальные исследования, проведенные в институте проблем прочности АН УССР (рис. 1.45) [50, 52].

Рис. 1.45. Однолопаточная камера для моделирования условий теплосмен с целью определения реальных тепловых состояний:

1 — сопловая лопатка; 2 — искусственное регулирование гидравлическое сопротивление [52]

В частности, определяются термические напряжения в сопловой лопатке газовой турбины из материала ХН75ВМЮ (ЭИ827), где перепад температур на входной или выходной кромках (на участках толщиной 3 мм) лопатки составляет $t_{\max} = 630^\circ\text{C}$ и $t_{\min} = 460^\circ\text{C}$ в течение 15 с термоцикла (рис. 1.46).

Рис. 1.46. Изменение напряжений (сплошные линии), температуры (штриховая линия) и перепад температур (штрихпунктирная линия) на входной кромке модели лопатки на режиме 450–800°C при наложении статической растягивающей нагрузки: 1 – $\sigma = 0$; 2 – $\sigma = 12$ кг/мм²; 3 – $\sigma = 24$ кг/мм² [52]

Результаты расчета

Рис. 1.47. Изменение термических напряжений по толщине кромки лопатки

Рассматривается цикл нагрева – охлаждения длительностью 15 с [52]. Результаты расчета одноосного нагружения приведены на рис. 1.47.

Проведен сравнительный расчет сложнапряженного состояния 3D-модели лопатки методом конечных элементов.

Выявлено, что при одноосном и сложнапряженном нагружении термические напряжения на выходной кромке лопатки одного порядка составляют 196–208 МПа (рис. 1.47). Аналогичное сходжение результатов получено и для входной кромки лопатки до уровня 140 МПа.

Таким образом, получена удовлетворительная сходимость результатов расчета термических напряжений по двум методикам с результатами эксперимента других авторов [52].

1.9. Ползучесть

В расчетах на прочность рабочих лопаток газовых турбин важной составляющей является деформация ползучести. В этом случае деформация, определяющая напряженно-деформированное состояние лопатки, выражается как суммарная деформация ε_Σ

$$\varepsilon_\Sigma = \varepsilon_{\text{упр}} + \varepsilon_t + \varepsilon^0,$$

где $\varepsilon_{\text{упр}}$ — относительная упругая деформация; ε_t — относительная термическая деформация; ε^0 — относительная деформация ползучести.

Для применения известной [8] формулы скорости деформации ползучести ξ по модели Нортона $\xi = k\sigma^n$ необходимо знать экспериментальные значения коэффициентов k , n , информация по которым ограничена [8, 53]. Возникает задача определения характеристик ползучести в условиях ограниченных экспериментальных данных.

Задача решается созданием математической модели расчета характеристик ползучести, основанной на перемещении краевых дислокаций. Такая модель позволяет получить диаграмму установившейся ползучести для конкретного материала в зависимости от температуры и напряжения.

Рассматривается деформация на I участке и на II участке установившейся ползучести (рис 1.48). В этом случае для определения величины деформации ползучести необходимо знать скорость перемещения дислокации.

Рис. 1.48. Типичный вид кривой ползучести $\Delta l(\tau)$ и скорости ползучести $\xi(\tau)$:
I — стадия неустановившейся ползучести; II — стадия установившейся ползучести;
III — стадия разрушения

Вначале рассматривается движение одной краевой дислокации в бездефектном монокристалле. Начальная скорость перемещения дислокации в нанобъеме v_0 определяется по формуле [54, 55]

$$v_0 = \frac{0,5a_0}{\sqrt{\frac{2 \cdot 0,5a_0}{M \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 x^2}}}} = \frac{e}{\sqrt{\frac{5\pi\varepsilon_0 a_0}{M}}}, \quad (1.8)$$

где $M = F_{\text{внеш}} / F_{\text{кул}}^1$; $F_{\text{внеш}}$ — внешняя сила; $F_{\text{кул}}^1$ — кулоновская сила взаимодействия двух зарядов.

Зная скорость перемещения дислокации в нанобъеме, рассчитывается деформация в монокристалле.

Скорость деформации ползучести технических монокристаллов, имеющих плотность дислокаций до 10^3 см^{-2} , определяется по формуле Орована

$$\xi = \rho_d b v, \quad (1.9)$$

где ξ — скорость деформации ползучести; ρ_d — плотность дислокаций; b — вектор Бюргерса (параметр, характеризующий геометрическое искажение кристаллической решетки вследствие появления краевой дислокации); v — скорость движения дислокации (в частом случае $v = v_0$).

Эта же формула (1.9) используется для расчета скорости деформации ползучести поликристаллов. В этом случае расчет ведется при следующих **допущениях**.

1. Рассматривается установившаяся ползучесть (I и II участки).
2. Механизм ползучести определяется перемещением краевых дислокаций.
3. Изменение плотности дислокаций (в том числе, межзеренное и внутризеренное для поликристаллов) учитывается формулой Орована (1.9).
4. Влияние температуры на скорость деформации учитывается через изменение периода кристаллической решетки a_0 и плотность дислокаций.
5. Влияние напряжения на скорость деформации учитывается через изменение коэффициента.

Определение скорости перемещения краевой дислокации v по длине нанобъема под действием заданной внешней нагрузки дает возможность оценить величину и скорость деформации установившейся ползучести. Расчетная модель корректируется по ограниченным экспериментальным данным и в дальнейшем используется для определения характеристик ползучести при различных температурах и напряжениях внутри заданного интервала.

Последовательность расчета деформации ползучести следующая.

1. Рассчитывается начальная скорость перемещения дислокации по формуле (1.8).
2. По экспериментальным значениям скорости деформации ξ (при данных температуре и напряжении) определяется средняя плотность дислокаций ρ_d по формуле (1.9)

$$\rho_d = \xi / (a_0 v).$$

3. Расчетные значения плотности дислокаций подставляются в формулу Орована, тем самым определяется зависимость скорости деформации ξ от напряжения и температуры $\xi = f(\sigma, t)$.

4. Влияние температуры на скорость деформации ξ определяется также через изменение периода кристаллической решетки a_0 по формуле (см. п. 1.1)

$$\Delta a_0 = 0,5 \left(\frac{e^2}{\frac{e^2}{a_0} - c_v^1 \Delta T 2\pi \epsilon_0} - a_0 \right),$$

где c_v^1 — теплоемкость атома при постоянном объеме; ΔT — изменение температуры. Затем величина Δa_0 подставляется в формулу Орована.

5. Деформация ε на I участке и II участке установившейся ползучести определяется, в частности, по формуле [93]

$$\varepsilon = \xi \tau^{\mu} \exp^{\xi \tau},$$

где τ – длительность испытаний на ползучесть; $\mu = 0,3$.

6. Ограничением величины деформации ползучести является нормативная величина, равная 0,2 %.

Примеры реализации методики расчета

Пример 1

Некоторые результаты расчета приведены на рис. 1.49, 1.50 (нулевая линия является технической).

Рис. 1.49. Модельная диаграмма ползучести сплава при температуре t_1

Рис. 1.50. Модельная диаграмма ползучести сплава при температуре t_1

По справочным экспериментальным данным корректируется модель диаграммы ползучести. Затем по скорректированной модели прогнозируются неизвестные характеристики ползучести. В частности, при другом уровне температуры такие зависимости приведены на рис. 1.51, 1.52.

Модель позволяет достраивать диаграммы ползучести жаропрочного сплава на основе ограниченного объема экспериментальных данных.

Исходные расчетные данные формируются в условиях сокращения объема экспериментов, что снижает экономические и временные затраты в процессе проектирования лопаток газовых турбин.

Рис. 1.51. Модельная диаграмма ползучести сплава при температуре t_2

Рис. 1.52. Соответствие модельной диаграммы ползучести сплава при температуре t_2 при $\sigma = \text{const}$ справочным данным

Адекватность модели подтверждается удовлетворительной сходимостью со справочными данными.

Пример 2

Результаты моделирования ползучести сплава ЖС26 представлены на рис. 1.53–1.56.

Рис. 1.53. Расчетная диаграмма ползучести ЖС26 в зависимости от напряжения при 900°C

Рис. 1.54. Результаты расчета диаграмм ползучести сплава ЖС26 при температуре 900°C, $\sigma = 309$ МПа: _____ – расчетные; ..... – справочные значения [53]

Рис. 1.55. Результаты расчета диаграмм ползучести сплава ЖС26 при температуре 900°C, $\sigma = 400$ МПа: _____ – расчетные; • – справочные значения [53]

Рис. 1.56. Результаты расчета диаграмм ползучести сплава ЖС26 при температуре 1000°C, $\sigma = 300$ МПа: _____ – расчетные; • – справочные значения [53]

Адекватность модели подтверждается удовлетворительной сходимостью с экспериментальными данными из работы [53].

Пример массива деформаций ползучести при температуре 900°C приведен на рис. 1.57.

В результате получен массив деформаций ползучести, который в дальнейшем используется для построения диаграмм релаксации (п. 1.10) данного сплава, а также в модели малоциклового усталости (п. 1.11).

1.10. Остаточные напряжения. Релаксация напряжений

Оценка остаточных напряжений после нагрева или охлаждения

Рассматриваются остаточные напряжения, возникающие в результате неравномерного охлаждения или нагрева.

Допущения

	1	2	3	4
0	0	0	0	0
1	0.012	0.012	0.013	0.013
2	0.018	0.02	0.021	0.022
3	0.025	0.029	0.031	0.033
4	0.034	0.039	0.043	0.046
5	0.042	0.051	0.057	0.061
6	0.052	0.064	0.072	0.079
7	0.062	0.079	0.09	0.099
8	0.073	0.095	0.11	0.123
9	0.084	0.112	0.133	0.15
10	0.096	0.132	0.158	0.18
11	0.108	0.152	0.186	...

Рис. 1.57. Фрагмент массива деформаций ползучести при температуре 900°C

1. Для одноосного напряженного состояния наибольшее остаточное напряжение $\sigma_{\text{ост}}$ не может превышать предел текучести σ_T

$$\sigma_{\text{ост}} \leq \sigma_T,$$

так как любая деформация под действием внешней силы не может вызвать напряжения больше предела текучести.

2. Для двухосного напряженного состояния наибольшее остаточное напряжение $\sigma_{\text{ост}}$ не может превышать предел текучести $1,15\sigma_T$ [56].

$$\sigma_{\text{ост}} \leq 1,15\sigma_T.$$

3. Для двухосного напряженного состояния с учетом процесса ползучести наибольшее остаточное напряжение $\sigma_{\text{ост}}$ не может превышать предел ползучести [56].

$$\sigma_{\text{ост}} \leq 1,15\sigma_{0,2/T}.$$

Исходными данными для моделирования технологии изготовления лопатки является градиент температур при монокристаллическом литье.

Для модельного расчета экспериментальная оценка градиента температуры приведена на рис. 1.58 [57].

Рис. 1.58. Диаграмма градиента температуры сплава [57]

На основе диаграммы градиента температуры рассчитываются остаточные напряжения по величине предела текучести и термических напряжений в зависимости от температуры в отливке из модельного сплава (рис. 1.59).

Расчетная кривая 2 на рис. 1.59 позволяет определять предел текучести при температуре свыше 1100°C.

Рис. 1.59. Температурная зависимость термических напряжений модельного сплава — 1; предела текучести: 2 — расчет; 3 — эксперимент

Из рис. 1.59 видно, что при затвердевании отливки от 1300 до 700°C $\sigma_{\text{терм}}$ и $\sigma_{\text{т}}$ возрастают. При 1000°C $\sigma_{\text{ост max}} \approx 600$ МПа. Это ведет к образованию локальных микротрещин. Необходимо учитывать, что предел текучести на уровне элементарной атомной ячейки обладает анизотропией, т.е. его значения (в зависимости от направления действующих напряжений) могут быть меньше приведенных на графике.

Остаточные напряжения, возникающие в отливке, снижаются последующей термообработкой.

Для моделирования режимов термообработки лопатки необходимо иметь расчетные диаграммы ползучести сплава, которые позволят определить длительность термообработки. В п. 1.9 приведены фрагменты результатов расчета ползучести модельного сплава:

- а) в зависимости от напряжения при температуре 900°C;
- б) в зависимости от напряжения при температуре 1000°C;
- в) фрагмент массива деформаций ползучести при 1200 °C.

На основе массива данных деформации ползучести строится расчетная диаграмма релаксации сплава (рис. 1.60).

На основе массива данных по деформации ползучести и, полагая, что механизмы релаксации и ползучести одинаковы, определяются режимы термообработки. В частности, получены несколько вариантов термообработки лопатки.

Вариант 1 (на основе предела текучести). После термообработки при температуре 1200°C остаточные напряжения составят 180 МПа.

Вариант 2 (на основе предела ползучести). После термообработки в течение 8 ч при температуре 1200°C остаточные напряжения составят 120 МПа.

Вариант 3 (на основе предела ползучести). После термообработки в течение 35 ч при температуре 1200°C остаточные напряжения составят 90 МПа.

Рис. 1.60. Расчетная диаграмма релаксации сплава:
1 — 1100 °C; 2 — 1200 °C

Таким образом, определены модельные (расчетные) режимы отдельных этапов изготовления лопатки турбины.

1.11. Малоцикловая (термическая) усталость

Краткая характеристика процесса малоциклового усталости

«Разрушение элементов конструкций может быть вызвано действием температурных напряжений от повторяющихся нагревов и охлаждений, обусловленных тепловым процессом машины и внешним воздействием. Такое разрушение деталей при сравнительно небольшом числе циклов (10^2 — 10^5) называют термической усталостью или термоусталостью, которая является частным случаем неизотермической малоциклового усталости» [31].

«Расчеты элементов конструкций на малоцикловую усталость базируются на экспериментальных данных изучения закономерностей сопротивления деформированию и разрушению при циклическом упруго-пластическом деформировании, а также исследованиях кинетики неоднородного напряженно-деформированного состояния и накопления повреждений в зонах концентрации — местах вероятного разрушения».

«Модель Мазинга — одна из первых моделей. Мазинг рассмотрел реверсивное деформирование поликристаллического образца в предположении, что зерна, обладая анизотропией свойств, различным образом ориентированы по отношению к деформирующей нагрузке, деформируются по-разному и имеют различные пределы текучести» [31].

«Наиболее вероятной причиной изменения пределов упругости, пропорциональности и условного предела текучести при реверсивном нагружении (эффект Баушингера), по-видимому, являются остаточные ориентированные микронапряжения, возникающие в предшествующей пластической деформации. Они и способствуют более раннему возникновению пластической деформации при повторной нагрузке другого знака» [31].

На основе существующих представлений о малоциклового усталости сформулированы следующие допущения.

Допущения модели малоциклового усталости

1. Причиной разрушения является образование трещины в результате циклического накопления пластической деформации. Поэтому принимается, что малоцикловая усталость включает и квазистатическое разрушение, и термическую усталость.

2. Материал, обладая анизотропией свойств на уровне элементарной атомной ячейки, деформируется по-разному и имеет различные пределы упругости и текучести (см. пп. 1.3, 1.5).

3. Учитываются температурные зависимости модуля упругости и предела текучести, которыми, в частности, характеризуется неизоотермическое нагружение.

4. При одноосном нагружении пластические деформации формируются в результате действия следующих факторов:

- остаточные технологические $\sigma_{\text{отехн}}$ (в частности, остаточные напряжения в отливке не полностью снимаются последующей термообработкой при изготовлении детали);
- остаточные эксплуатационные $\sigma_{\text{оэксп}}$ (в частности, остаточные напряжения формируются под действием внешней нагрузки: термической и механической, превышающей предел текучести или предел ползучести);
- внешние нагрузки (термические $\sigma_{\text{терм}}$ и механические растягивающие $\sigma_{\text{р}}$ напряжения);
- внутренние напряжения в области упругих деформаций, возникающие вследствие деформации кристаллической решетки $\sigma_{\text{вн}}$ вокруг дислокации.

Внутренние напряжения определяются на основе результатов рентгеноструктурного анализа поверхностного слоя образца или натурной лопатки. Так, на рис. 1.61 [43] показана модель искажения кристаллической структуры в результате кристаллизации, где видно образование деформации кристаллической решетки вокруг дислокации. Также из этого рисунка видно, что малоугловые границы являются концентраторами напряжений и возможными очагами развития трещин.

Рис. 1.61. Образование стенки дислокации при срастании зерен во время кристаллизации:
а – до срастания; б – после срастания

Тогда суммарное действующее напряжение в детали за цикл определяется по формуле

$$\sigma = \sigma_{\text{вн}} + \sigma_{\text{отехн}} + \sigma_{\text{оэксп}} + \alpha_{\text{к}} \cdot (\sigma_{\text{р}} + \sigma_{\text{терм}}),$$

где $\alpha_{\text{к}}$ — коэффициент концентрации напряжений, определяемый для охлаждаемых лопаток по формуле Нейбера. Причем концентрация напряжений учитывается автоматически, если сложнапряженное состояние лопатки определяется методом конечных элементов.

5. Релаксация напряжений сжатия при максимальной температуре цикла t_{max} увеличивает длительность температурного интервала (в полуцикле охлаждения), в котором происходит пластическая деформация [58].

6. По диаграмме ползучести определяется величина пластической деформации за цикл $\varepsilon_{\text{цикл}}$ при данных значениях температуры и действующего напряжения σ из условия $\sigma = \sigma_{\varepsilon/\tau}$. При этом модельная диаграмма ползучести позволяет определять величину $\varepsilon_{\text{цикл}}$ для длительности цикла нагружения в секунды и минуты.

7. Предельная величина, накопленной в результате циклического нагружения, пластической деформации в первом приближении принимается по величине условного предела текучести (ползучести), т.е. $0,2\% - \varepsilon_{0,2}$.

8. Число циклов до образования трещины $N_{\text{р}}$ определяется из соотношения

$$N_{\text{р}} = \varepsilon_{0,2} / \varepsilon_{\text{цикл}}.$$

9. Учитывается температура начала растворения фаз в многокомпонентном сплаве, которая определяет точку перегиба температурной кривой предела текучести и структурные переходы на диаграмме ползучести. В этом случае расчеты ведутся в два этапа.

Пример расчета числа циклов $N_{\text{р}}$ до образования трещины.

Исходные данные.

В п. 1.8 получены результаты расчета термических напряжений в сопловой лопатке газовой турбины из материала ХН75ВМЮ (ЭИ827). В частности, перепад температур на входной или выходной кромках (на участках толщиной 3 мм) лопатки составляет $t_{\text{max}} = 630^\circ\text{C}$ и $t_{\text{min}} = 460^\circ\text{C}$ при длительности термоцикла 15 с [52]. Сравнительные расчеты в этом случае показали, что при одноосном и сложнапряженном нагружениях термические напряжения одного порядка и составляют 196...208 МПа.

Внутренние напряжения определяются рентгеноструктурным анализом. В данном случае они неизвестны и принимаются равными нулю.

Технологические остаточные напряжения $\sigma_{\text{отехн}}$ для деформируемого сплава принимаются равными нулю. В общем случае могут иметь место и сжимающие напряжения.

Основой сплава является кристаллическая решетка никеля. Пределы текучести никеля при температуре 600°C с учетом анизотропии составляют $\sigma_{\text{Т100}} = 30$ МПа, $\sigma_{\text{Т110}} = 65$ МПа, $\sigma_{\text{Т111}} = 105$ МПа.

Поэтому при воздействии внешней нагрузки, превышающей предел текучести, формируются соответствующие остаточные напряжения $\sigma_{\text{оэксп}} 30; 65; 105$ МПа.

Суммарное действующее напряжение в кромке лопатки за один цикл нагружения определяется при отсутствии механической нагрузки, т.е. $\sigma_{\text{р}} = 0$. Для неохлаждаемой лопатки на входной и выходной кромках $\alpha_{\text{к}} = 1$. Так как $\sigma_{\text{терм}} > \sigma_{\text{Т111}}$, то $\sigma_{\text{оэксп}} = 105$ МПа.

Тогда

$$\sigma = \sigma_{\text{вн}} + \sigma_{\text{отехн}} + \sigma_{\text{оэксп}} + \alpha_{\text{к}} \cdot (\sigma_{\text{р}} + \sigma_{\text{терм}}) = 0 + 0 + 105 + \alpha_{\text{к}} \cdot (0 + 207) = 312 \text{ МПа.}$$

Для оценки числа циклов $N_{\text{р}}$ до образования трещины (разрушения) используется массив деформаций из модельной диаграммы ползучести для сплава ХН75ВМЮ.

Предельная величина, накопленной в результате циклического нагружения, пластической деформации (в первом приближении) принимается по величине условного предела текучести (ползучести), т.е. $\varepsilon_{0,2} = 0,2\%$.

Деформация ползучести при 600°C , $\sigma = 312 \text{ МПа}$ за 15 с составляет $\varepsilon_{\text{цикл}} = 5,172 \cdot 10^{-6}\%$.

Тогда число циклов до разрушения

$$N_{\text{р}} = \varepsilon_{0,2} / \varepsilon_{\text{цикл}} = 0,2 / 5,172 \cdot 10^{-6} = 38\,670.$$

Экспериментальные значения $N_{\text{р}}$ составляют [59] величины 25 000, 31600, 37400 циклов. Расхождение с максимальным числом циклов составляет 3,4 %.

Имея результаты рентгеноструктурного анализа, можно определить значение внутреннего напряжения $\sigma_{\text{вн}}$. Так, если величина упругого искажения кристаллической решетки $\Delta a_0 = 0,0024 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, то внутреннее напряжение в кристаллографическом направлении $\langle 001 \rangle$ составит 95 МПа. Тогда суммарное действующее напряжение в кромке лопатки за один цикл нагружения будет $312 + 95 = 407 \text{ МПа}$, а число циклов до предельной пластической деформации (образования трещины) составит

$$N_{\text{р}} = \varepsilon_{0,2} / \varepsilon_{\text{цикл}} = 0,2 / 9,87 \cdot 10^{-6} = 20\,260.$$

Минимальное экспериментальное значения $N_{\text{р}}$ составляет [59] 25 000 циклов.

Необходимо отметить, что для поликристаллических деформируемых сплавов циклическая прочность зависит от размера зерна, который, в свою очередь, связан с режимом термообработки сплава. Этот важный фактор учитывается при формировании модельной диаграммы ползучести, построенной с учетом режима термообработки сплава.

Выводы

1. Заложена физическая основа для моделирования малоциклового усталости.
2. Получена удовлетворительная сходимость экспертной расчетной оценки с результатами экспериментов, проведенных другими авторами [50, 52, 59].

1.12. Моделирование кристаллической структуры и конструирование материалов

Краткий обзор подходов к выбору материалов

«Конструктор должен оценить характеристики механики разрушения — неотделимую составляющую в процессе исследования механических свойств.

Важным элементом подхода механики разрушения является использование коэффициента вязкости разрушения при плоской деформации (K_{Ic}). Знание коэффициента вязкости разрушения при плоской деформации может помочь проектировщику при предварительном анализе поведения конкретной конструкции в случае начавшегося разрушения...

K_{lc} прямо связан с затратой энергии, необходимой для начала развития трещины. Другим важным свойством K_{lc} является то, что его величина не зависит от формы и размеров образца — это свойство материала. При других оценках надежности металла (таких как ударная вязкость) результат зависит от геометрии образца. Для большинства конструкционных материалов K_{lc} обратно пропорционален пределу текучести...

Повышение прочности с понижением температуры обычно сопровождается уменьшением пластичности и вязкости металла. Пластичность определяет способность металла подвергаться остаточной деформации, а вязкость — способность поглощать работу внешних сил при разрушении...

Пластичность и вязкость в конструкторские расчеты не входят и являются качественными показателями. Пластичность характеризует способность металла к перераспределению напряжений в зонах их концентрации. Пластическая деформация как бы предохраняет металл от резких локальных перегрузок вблизи концентраторов напряжений. В обычном машиностроении принято считать пластичность удовлетворительной, если относительное удлинение металла $\delta_s > 15\%$ ...

Выбор из серий возможных материалов может быть более эффективным при внимательном рассмотрении особых механических и физических свойств. Для военной и гражданской аэрокосмической техники необходимыми свойствами конструкционных материалов являются: малая плотность, износостойкость, высокий предел текучести или пропорциональности, высокий модуль упругости и особые характеристики теплового расширения, особенно в отношении соединений металл–стекло...

Таким образом, конструкторы военных и гражданских аэрокосмических устройств обычно заинтересованы в выборе легких материалов с высокими характеристиками удельной прочности и удельной жесткости» [60]. Сравнение различных материалов на базе отношения модуля упругости к плотности и предела текучести к плотности приведено на рис. 1.62.

Рис. 1.62. Отношение предела текучести и модуля упругости к плотности для различных материалов [60]

1.12.1. Моделирование кристаллической структуры

Для новых материалов характерна весьма ограниченная информация об упругих и прочностных характеристиках, необходимая в расчетах напряженно-деформированного состояния лопаток. В этих условиях возникает потребность в теоретических методах расчета упругих, прочностных характеристик, основанных на учете сил межатомного взаимодействия, так как классические методы расчета механики деформируемого твердого тела, основанные на гипотезе сплошности среды, не позволяют этого сделать.

При отсутствии экспериментальных данных разработанный метод позволяет моделировать элементарную атомную ячейку, ее характеристики и свойства бездефектных монокристаллов, в частности, в составе эвтектического композита для лопаток газовых турбин. Исходными данными являются химическая формула соединения, пространственная группа и символ Пирсона.

Рассматривается моделирование кристаллической структуры и ее упругих характеристик бездефектных монокристаллов в составе эвтектического композита Nb–Nb₅Si₃ для лопаток газовых турбин в условиях ограниченного объема экспериментальных данных.

Исходными данными для расчета модуля упругости являются кристаллическая структура элементарной атомной ячейки монокристалла и ее период (рис. 1.63).

Рис. 1.63. Блок-схема последовательности расчета

Известными данными является химическая формула соединения Nb₅Si₃ и его параметры кристаллической структуры. В соответствии с символом Пирсона *tI32* и пространственной группой *I4/mcm* [61] моделируется элементарная ячейка кристаллической структуры Nb₅Si₃ при следующих **допущениях**.

Рис. 1.64. Восьмиатомная модель элементарной атомной ячейки Nb_5Si_3 по схеме замещения

Рис. 1.65. Модель фрагмента элементарной ячейки Nb_5Si_3

1. Элементарная ячейка выбирается в кристаллической структуре на основе следующих правил [43]: форма элементарной атомной ячейки должна по своей симметрии соответствовать симметрии кристалла; выбираемая ячейка должна иметь максимально возможное число прямых углов; объем элементарной атомной ячейки должен быть минимальным.

В результате получена 8-атомная модель элементарной ячейки Nb_5Si_3 по схеме замещения (рис. 1.64), кратная ячейке с 32 атомами.

Данная модель ячейки соответствует определенным пунктам описания структуры, приведенной в работе [62]. В частности, атомы кремния (как и ниобия) образуют вертикальные цепи, параллельные оси c . Расстояние $\text{Me}-\text{Si}$ равно сумме атомных радиусов (0,3663 нм).

На рис. 1.65 представлена модель фрагмента элементарной ячейки Nb_5Si_3 , которая является основой для дальнейших расчетов.

Период модельной кристаллической решетки определяется в соответствии с известными правилами кристаллографии, а именно: зная металлические радиусы атомов и тип кристаллической решетки, определяется a_0 из соотношения для расстояния между ближайшими соседями-атомами. Например, для ОЦК решетки $2r = a_0\sqrt{3}/2$, а для ГЦК – $4r = a_0\sqrt{2}$ [43].

Для расчета температурной зависимости модуля упругости компонентов композита используются следующие формулы:

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \frac{1}{a_0^2}; \quad \Delta a_0 = 0,5 \left(\frac{e^2}{\frac{e^2}{a_0} - c_v^1 \Delta T 2\pi\epsilon_0} - a_0 \right).$$

Адекватность методики апробирована на соединениях с известными структурными и упругими характеристиками. В частности, в табл. 1.24 приведены расчетные значения периода кристаллической решетки.

Из табл. 1.24 видно, что в результате расчета периода кристаллической решетки получена удовлетворительная сходимость со справочными данными для двойных соединений [43]. На основании этого, в результате расчета для модельной ячейки Nb_5Si_3 получено значение $a_0 = 3,663 \cdot 10^{-10}$ м (рис. 1.64).

В качестве примера адекватности модели в табл. 1.25 приведены результаты расчета модуля упругости для монокристаллов-компонентов композита с известными характеристиками при температуре 20°C.

Таблица 1.24

Наименование соединения	Величина периода кристаллической решетки, нм		Расхождение, %
	расчетная	справочная	
NbC	0,444	0,4470 [43]	–0,6
TaC	0,446	0,4441 [43]	0,4
Mo ₂ C	0,432	0,4254 [43]	1,6
TiN	0,432	0,4239 [43]	1,9
Nb ₅ Si ₃ (модель)	0,3663	—	—

Таблица 1.25

Наименование элемента	Величина модуля упругости, ГПа		Расхождение, %
	расчетная	справочная	
NbC (ОЦК) $\langle 100 \rangle$	621,5	—	—
$\langle 110 \rangle$	466,2	—	—
$\langle 111 \rangle$	515,8	—	—
поликристалл	534,5	497; 504; 518; 550; 540 [63]	—
TaC(ОЦК) $\langle 100 \rangle$	637,8	—	—
$\langle 110 \rangle$	478,3	—	—
$\langle 111 \rangle$	529,3	—	—
поликристалл	548,5	515; 550; 730; 500 [63]	—

Упругие свойства матрицы композита Nb–Nb₅Si₃ определяются ее основой – кристаллической решеткой ниобия Nb типа ОЦК с периодом $a_0 = 3,3002 \cdot 10^{-10}$ м. Поэтому исходные данные для расчета матрицы известны.

На основе модели кристаллической структуры силицида ниобия проведены расчеты упругих характеристик (табл. 1.26).

Получена теоретическая температурная зависимость модуля упругости бездефектного монокристалла Nb₅Si₃ с учетом анизотропии (рис. 1.16).

Таблица 1.26

Наименование элемента	Величина модуля упругости, ГПа		Расхождение, %
	расчетная	справочная	
Nb (ОЦК) $\langle 100 \rangle$	77,2	—	—
$\langle 110 \rangle$	134,7	—	—
$\langle 111 \rangle$	155,1	—	—
поликристалл	121,6	119 [7]	2,3
Nb ₅ Si ₃ $\langle 100 \rangle$	145,5	—	—
$\langle 110 \rangle$	308,7	—	—
$\langle 111 \rangle$	419,7	—	—
Si-Si $\langle 110 \rangle$ в (001)	183,5	—	—

Выводы

1. Заложена основа метода моделирования кристаллической структуры и упругих свойств монокристалла.

2. Разработанный метод позволяет использовать его для компьютерного моделирования материалов в условиях отсутствия экспериментальных данных. В частности, смоделирована кристаллическая структура элементарной атомной ячейки Nb_5Si_3 по схеме замещения атомов и рассчитан ее период.

3. На основе модели кристаллической структуры ячейки получена теоретическая температурная зависимость модуля упругости Nb_5Si_3 с учетом анизотропии.

1.12.2. Конструирование материалов

Актуальность и постановка задачи

В настоящее время новые жаропрочные сплавы успешно разрабатываются с использованием статистических моделей, основанных на обширной базе свойств имеющихся сплавов. При этом используются как линейные регрессионные модели [64], так и нелинейные [65].

Однако для новых перспективных материалов объем экспериментальных данных о свойствах материала весьма ограничен, а статистические данные отсутствуют.

В этих условиях возникает задача моделирования заданных свойств материала на этапе проектирования элементов сложных технических изделий, в частности, ГТД. Классические методы расчета механики деформируемого твердого тела, основанные на гипотезе сплошности среды, не позволяют этого сделать.

Принципиальным отличием разработанного метода является расчет упругих, прочностных и теплофизических характеристик, основанных на учете сил межатомного взаимодействия. Кроме того, ставится задача моделирования свойств материала *не для образца, а для конкретной детали*, в частности, *рабочей лопатки турбины* с учетом условий ее работы:

- температура газа перед турбиной;
- давление газа перед турбиной;
- частота вращения ротора;
- и изготовления:
- конструктивные особенности (например, степень закрученности пера лопатки);
- технологические особенности (наличие покрытия, методы обработки).

Поэтому выбор материала должен учитывать определенные этапы проектирования ГТД [66], на основе которых формируются принципы конструирования материалов [66, 67].

Кроме того, для нового многокомпонентного жаропрочного сплава с химическим составом, определенным методом регрессионного анализа, следующим этапом его формирования является экспериментальное определение служебных свойств. Применение разработанной модели [67, 41] позволяет сократить объем таких экспериментов и длительность проверки этих характеристик.

Расчетная модель

Последовательность решения задачи представлена в виде блок-схемы (рис. 1.66) этапов расчета прочности.

Рис. 1.66. Этапы расчета

Первый этап — расчет упругих, прочностных, теплофизических и физических характеристик нанообъема монокристалла — элементарной атомной ячейки. Для новых и перспективных материалов этот этап предусматривает моделирование его кристаллической структуры (если она неизвестна) на основе химической формулы, индекса Пирсона и пространственной группы.

Второй этап — расчет упругих, прочностных, теплофизических и физических характеристик представительного микрообъема эвтектического композитного материала или моно- и поликристаллического жаропрочного сплава на основе результатов расчета первого этапа.

Третий этап — расчет методом конечных элементов напряженно-деформированного состояния макрообъема материала (в том числе эвтектического композитного или жаропрочного сплава) детали турбоустройства, например, рабочей лопатки турбины.

Переход в расчетах от нанообъема к микрообъему и макрообъему основан на бездефектной структуре нитевидного монокристалла. Нанообъем — элементарная атомная ячейка — периодически повторяется в нитевидном монокристалле. В поперечном направлении нанообъем, периодически повторяясь, достигает микрообъема. В продольном направлении микрообъем, периодически повторяясь, достигает макрообъема, т.е. длина волокон равна длине пера лопатки.

Разработанный метод расчета позволяет установить влияние параметров кристаллической решетки материала, силы химической связи на упругие и прочностные характеристики. Иначе говоря, оценивается влияние химического состава материала (металлургический фактор) на конструкционную прочность лопатки. Тем самым определяются управляющие факторы.

Сравнительный анализ и приложение результатов

Для определения напряженно-деформированного состояния и расчета на прочность деталей ГТД, турбонасоса методом конечных элементов, необходимо иметь комплекс исходных данных: модуль упругости с учетом анизотропии; коэффициент Пуассона; предел текучести с учетом анизотропии; коэффициент теплопроводности; коэффициент теплового расширения; модуль упругости и коэффициент теплового расширения в зависимости от температуры; плотность материала. Разработанный метод позволяет дополнять ограниченный объем экспериментальных данных по этим характеристикам результатами теоретического расчета.

Результаты расчета основных компонентов позволяют оценить упругие, прочностные и теплофизические характеристики композиции материала в целом (см. пп. 1.1–1.6).

В частности, для перспективного композита Nb–Nb₅Si₃ [68] получена расчетная зависимость влияния объемной доли армирующей фазы y на его модуль упругости с учетом анизотропии (рис. 1.67).

Рис. 1.67. Зависимость модуля упругости композита Nb–Nb₅Si₃ от объемной доли y (при $t = 20^\circ\text{C}$):

1 – модуль упругости в направлении $\langle 100 \rangle$; 2 – модуль упругости в направлении $\langle 110 \rangle$;
3 – модуль упругости в направлении $\langle 111 \rangle$

Из рисунка видно, что композит Nb–Nb₅Si₃ имеет выраженную анизотропию упругих свойств, которую необходимо учитывать, в частности, для оценки напряженно-деформированного состояния элементов конструкций и технологии изготовления детали. Необходимо отметить, что подобную зависимость можно построить и для других значений температуры.

Учет сил межатомного взаимодействия позволяет теоретически определить величины коэффициента интенсивности напряжения (при плоском нагружении) и ударной вязкости. Оценочные результаты этих величин для некоторых элементов и соединений приведены в п. 1.7.

Полученный комплекс расчетных характеристик материала позволяет сформировать исходные данные для оценки напряженно-деформированного состояния и запаса прочности элементов ГТД, турбонасоса из конструируемого материала.

Результаты сравнительного анализа теоретического расчета упругих и теплофизических характеристик позволяют использовать модельные данные в качестве исходных для оценки прочностных характеристик материалов. В частности, зная температурные зависимости модуля упругости, коэффициента теплового расширения и коэффициента Пуассона, можно оценить величину термических напряжений, возникающих в элементах конструкции (см. п. 1.8). Используя массив деформаций ползучести, оцениваются не только характеристики ползучести, но и число циклов до разрушения при малоцикловой усталости (см. пп. 1.9, 1.11)

Кроме того, разработанный метод позволяет заложить основу конструирования лопаток и других деталей с заданными механическими и теплофизическими характеристиками. А применение управляющих факторов позволяет использовать разработанную модель для конструирования материалов.

Принципы конструирования материалов

На основе разработанного метода расчета упругих, прочностных и теплофизических характеристик [67, 41] появляется возможность конструирования материалов с учетом следующих принципов [37, 66, 67, 69].

1. Цель конструирования материала. Постановка приоритетной задачи [66]:

- достижение одного, двух параметров критериев оптимизации;
- компромиссный вариант по всем критериям оптимизации (плотность, прочность, пластичность, вязкость, термостойкость, длительная жаропрочность, теплопроводность, тепловое расширение).

2. Обеспечение резервов доводки требуемых критериев материала [66].

В частности, кристаллографическое направление $\langle 001 \rangle$ монокристаллической лопатки может обеспечить резерв повышения модуля упругости за счет направлений $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. В свою очередь, низкая плотность материала – повышение частоты вращения ротора.

3. *Принцип независимости характеристик материалов* осуществляется, в частности, на примере независимости в некоторых случаях упругих характеристик от химического состава жаропрочных никелевых сплавов.

4. *Взаимозависимость и взаимовлияние характеристик материалов* [66].

Этот принцип реализуется, в частности, влиянием модуля упругости на другие упругие характеристики. Повышение модуля упругости ведет к соответствующему повышению предела упругости монокристалла и снижению коэффициента Пуассона. Введение в кристаллическую решетку никеля (твердый раствор) легирующего элемента Al позволяет при практическом сохранении модуля упругости никеля уменьшить массу за счет уменьшения плотности. Тем самым улучшаются удельные

характеристики материала. Кроме того, изменение модуля упругости влияет на пластичность и термостойкость.

5. *Использование в композиции материала только всесторонне и многократно исследованных компонентов [66].*

6. *Создание резервов по «критическим» элементам для достижения цели проекта [66].*

7. *Неразрывность свойств материала, конструкции и технологии изготовления детали.* В частности, управляющими факторами, определяющими свойства материала, являются следующие. Металлургические факторы: химический состав (химическая формула); тип кристаллической решетки; период кристаллической решетки a_0 . Технологические факторы: кристаллографическое направление монокристалла; объемная доля армирующей фазы композитного материала.

8. Повышение экологической безопасности при конструировании и создании нового материала благодаря использованию «чистых» технологий.

9. Оптимизация жизненного цикла материала (создание материала — эксплуатация — диагностика — ремонт — переработка, утилизация) с использованием информационных технологий.

10. Создание научного задела расширением и углублением фундаментальных исследований.

В результате закладывается основа решения прямой задачи — создание материала с заданными характеристиками. При этом недостающая информация, необходимая в расчетах напряженно-деформированного состояния деталей ГТД, восполняется за счет результатов моделирования.

Выводы

1. Разработанный метод позволяет исследовать влияние металлургических, технологических и эксплуатационных факторов на конструкционную прочность деталей ГТД при различных режимах его работы (в частности, оценивать термические напряжения).

2. Возможна теоретическая оценка удельных характеристик материалов, таких, например, как отношение модуля упругости к плотности.

3. Модель, блок-схема которой приведена на рис. 1.66, позволяет перейти от исследования образца к исследованию деталей ГТД (например, лопатки турбины).

4. Обобщены принципы конструирования материалов.

---

2. ВИХРЕВАЯ МОДЕЛЬ АТОМА И ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

В главе 1 показано, что учет сил межатомного взаимодействия, основанный на электростатической природе упругости, то есть законе Кулона, позволяет теоретически и полуэмпирически определять прочностные и теплофизические характеристики моно- и поликристаллов. Однако с помощью электростатической модели не решается ряд задач, связанных, в частности, с оценкой упругих характеристик отдельных химических элементов и двойных соединений. Кроме того, имеются сложности в оценке предела текучести для жаропрочных сплавов.

Для решения подобных задач разработана вихревая модель атома, которая позволяет оценивать силы внутри- и межатомного взаимодействия. Это, в свою очередь, дает возможность расширить круг задач по оценке характеристик прочности кристаллических материалов.

В основе вихревой модели лежат известные положения теоретической механики и, соответственно, механическая модель, которая излагается ниже.

2.1. Механическая модель взаимодействия сил на вращающемся роторе

2.1.1. Физическая сущность механической модели

Существующая модель расчета ускорения силы тяжести g основана на законе всемирного тяготения и втором законе Ньютона. В соответствии с названными законами ускорение силы тяжести на поверхности Земли определяется по известному соотношению [70]

$$g = F/m = GM/R^2,$$

где G – гравитационная постоянная; $M = 5,98 \cdot 10^{24}$ кг – масса Земли [71]; m – масса тела, находящегося на поверхности Земли; R – средний радиус Земли.

Расчетная модель основана на следующих предпосылках.

1. Рассмотрим тело, имеющее форму шара, движущееся в пространстве.

Первый случай

Если тело движется только *поступательно и прямолинейно* без вращения под действием некоторого импульса, то точки A и B (рис. 2.1) имеют одинаковую линейную скорость $V_1 = V_2$. Центробежное ускорение в этом случае отсутствует.

Например, пушечное ядро, вылетевшее из ствола пушки, может совершать такое движение на прямолинейном участке траектории полета и т.п.

Рис. 2.1

Второй случай

К телу привязывается нить, другой конец которой жестко закрепляется в точке O (рис. 2.2). Как и в первом случае, телу придается импульс. В отличие от первого

Рис. 2.2

случая тело будет совершать круговое движение с радиусом, равным длине нити. Кинетическая энергия, которой обладает движущееся тело, является источником центробежной силы, направленной от центра вращения наружу. Центробежная сила уравновешена силой сопротивления (упругости) нити. Поскольку тело движется по криволинейной траектории, то имеет место и центростремительное ускорение, которое вызвано силой сопротивления нити, именно она заставляет тело двигаться по окружности. Действительно, если нить перерезать (сила сопротивления нити равна нулю), равновесие нарушится и тело вылетит за пределы орбиты вращения.

При этом точки *A* и *B* (рис. 2.2) также имеют примерно одинаковую линейную скорость $V_1 \approx V_2$ в случае, когда радиус орбиты значительно превышает радиус тела (рис. 2.2).

Рис. 2.3

Третий случай

Если к поступательному прямолинейному движению (см. первый случай) рассматриваемого тела добавить вращение вокруг собственной оси (рис. 2.3), то необходимо сложить векторы орбитальной и вращательной скоростей.

Вследствие сложения векторов линейная скорость V_1 в точке *A* будет больше, чем V_2 в точке *B* (рис. 2.3)

$$V_1 = V_{\text{орб}} + V_{\text{вр}};$$

$$V_2 = V_{\text{орб}} - V_{\text{вр}}.$$

Соответственно, импульс в точке *A* будет больше, чем в точке *B* при одинаковой массе *m*:

$$m \cdot V_1 > m \cdot V_2.$$

Рис. 2.4

Иначе говоря, нижняя полусфера тела затормаживается по сравнению с верхней полусферой. Появляется крутящий момент в точке *A* относительно точки *B* (рис. 2.4).

Крутящий момент смещает центр масс в точке *C* рассматриваемого тела с прямолинейной траектории (пунктирная линия на рис. 2.3) в новое положение в точку *C1*

(рис. 2.5). В результате многократного смещения центра масс формируется криволинейная траектория (сплошная линия со стрелкой на рис. 2.3).

Например, если ударить по бильярдному шару не точно по его центру, а с некоторым смещением от центра, то шар будет двигаться не только поступательно, но и одновременно вращаться. Это так называемый «крученный удар» заставляет шар двигаться по криволинейной траектории.

Иначе говоря, в данном случае роль силы упругости нити (которой здесь нет) играет центростремительная сила. Тело движется равномерно по криволинейной траектории, находясь в равновесии. Центробежная сила, вызванная кинетической энергией движения по орбите, уравновешена центростремительной силой, вызванной взаимодействием поступательного и вращательного движения тела.

Таким образом, совместное поступательное и вращательное движение тела является причиной возникновения центростремительного ускорения, вызывающего, в свою очередь, переход от прямолинейного к криволинейному движению.

Рис. 2.5

2.1.2. Модель нагружения вращающегося ротора

Для решения поставленной задачи разработана модель поступательного движения вращающегося тела.

Задача решается на примере совместного поступательного и вращательного движения тела – шара.

Допущения

1. Используется принцип суперпозиции.
2. Рассматривается *равноускоренное* движение центра масс тела по окружности в инерциальной системе координат XOY с центром в точке O (рис. 2.6): $|a| = \text{const}$, изменяется только направление вектора ускорения.

3. Решается первая задача механики: при заданной траектории движения определить действующие силы.

Соответствие положениям теоретической механики

Допустим, к телу приложены постоянные по величине внешняя сила F_1 в центре масс точке C , направленная по касательной к окружности, и момент пары сил (F_2, F_2') (рис. 2.6, а) В результате тело движется плоскопараллельно, а центр масс (точка C) – равномерно по окружности. Такое движение описывается системой дифференциальных уравнений [73]

$$ma_{cx} = \sum F_{i,x}; \quad (2.1)$$

$$ma_{cy} = \sum F_{i,y}; \quad (2.2)$$

$$I_c \cdot \varepsilon = \sum M_c, \quad (2.3)$$

где m – масса тела; $a = dV/dt$ – ускорение центра масс поступательного движения; I_c – момент инерции центра масс; F_i – внешние силы; ε – угловое ускорение; M_c – момент сил относительно центра масс.

Рис. 2.6. Схема действующих сил

Рассмотрим движение центра масс — точки C по окружности (рис. 2.6, б, в). В соответствии с теоремой о движении центра масс момент от пары сил F_2 равен нулю (рис. 2.6, б). В этом случае вращательная часть движения не рассматривается, а уравнение (2.3) не используется. Тогда сумма внешних сил, действующих на точку C , равна

$$\sum F_i = F_1 \neq 0.$$

Схема сил на рис. 2.6, в получена путем параллельного переноса суммарного вектора внешних сил из конечного $F_{вн_k}$ в начальное положение $F_{вн_n}$ на бесконечно малой дуге перемещения. Откуда видно, что центростремительная сила является результирующей действия внешних сил, т.е. эквивалентна одной центральной силе $F_{ц}$, вызывающей движение тела по окружности.

Для материальной точки C система (2.1)–(2.3) принимают следующий вид:

$$m \cdot a_{Cx} = \sum F_{i,x}; \quad (2.4)$$

$$m \cdot a_{Cy} = \sum F_{i,y}. \quad (2.5)$$

При переходе к одной центральной силе соотношения (2.4)–(2.5) можно записать в следующем виде:

$$m \cdot a_c = \sum F_{вн} = F_c, \quad (2.6)$$

где

$$a_c = dV_x/dt + dV_y/dt. \quad (2.7)$$

Таким образом, теорема о движении центра масс позволяет исключить из рассмотрения все наперед неизвестные внутренние силы [73] для упрощения решения задачи. Однако в решении данной задачи важно показать физическую сущность внешних и внутренних сил, определяющих движение тела по заданной траектории, что отражено в последующих пунктах допущений.

4. Движение точки C по дуге DE моделируется кусочно-линейной траекторией DKE , которая на бесконечно малом отрезке времени стягивается в дугу DE , определяя перемещение центра масс (рис. 2.7). Тогда

$$\sum \delta x_i = DK \sum \delta y_i = KE.$$

Рис. 2.7. Схема движения центра масс

То есть DK и KE – суммарные проекции на оси OX и OY элементарных линейных перемещений соответственно.

Так как проекции центральной силы F_{cx} и F_{cy} – переменные величины (рис. 2.7), то точка C перемещается по суммарным отрезкам DK и KE с переменным только по направлению и постоянным по модулю ускорением

$$a_x = a \cdot \sin \varphi; \quad a_y = a \cdot \cos \varphi,$$

где φ – угловое перемещение т. C .

5. Кусочно-линейная модель позволяет свести динамическую задачу, описываемую соотношениями (2.1)–(2.3), к задаче прямолинейного равноускоренного (меняется только направление) движения точки под действием проекций центральной силы. Тогда на отрезках DK и KE ускорение определяется по известной формуле

$$|a_x| = V_{cp}^2 / 2 \cdot S_{DK}$$

и

$$|a_y| = V_{cp}^2 / 2 \cdot S_{KE},$$

где S_{DK} и S_{KE} – длина отрезков DK и KE . Поскольку $S_{DK} = S_{KE}$ и средние скорости также равны, то $|a_x| = |a_y|$.

Такой же результат можно получить на основе закона сохранения энергии.

В соответствии с положениями механики [74], приращение кинетической энергии частицы δK на некотором перемещении равно алгебраической сумме работ всех сил δA , действующих на частицу на том же перемещении

$$\delta K = \delta A. \quad (2.8)$$

Соотношение (2.8) справедливо в инерциальной и неинерциальной системах координат [74].

Под действием проекции силы F_{cx} центр масс перемещается с постоянным отрицательным ускорением по отрезку DK , а под действием проекции силы F_{cy} центр масс т. С изменяет направление и перемещается по отрезку KE с постоянным положительным ускорением.

На отрезке DK под действием проекции внутренней силы F_{cx} внешняя сила F_1 уменьшается и в точке K проекция скорости $V_x = 0$, кинетическая энергия также равна нулю. При этом совершаемая работа и, как результат, потенциальная энергия в точке K равна

$$\Pi_x = A_x = F_1 \cdot S_{DK}.$$

В соответствии с моделью в точке K центр масс тела изменяет направление и движется по отрезку KE с постоянным положительным ускорением, равным a_y . Причем в этой точке тело обладает потенциальной энергией $\Pi_x = \Pi_y$, т.е. можно записать, что по модулю

$$F_1 \cdot S_{DK} = F_{cy} \cdot S_{KE}$$

или

$$ma_x \cdot S_{DK} = ma_y \cdot S_{KE}$$

Но из геометрических построений расстояния $S = OD = DK = KE$ одинаковые и масса также одинаковая. Следовательно,

$$|a_x| = |a_y|.$$

Причем

$$A_x = -ma_x \sum \delta x_i = -ma_x \cdot S; \quad A_y = ma_y \sum \delta y_i = ma_y \cdot S.$$

Тогда для прямолинейного равноускоренного перемещения материальной точки C по суммарным отрезкам DK и KE (рис. 2.7) можно записать соотношения

$$ma_x \cdot S = \frac{mV_x^2}{2}; \quad ma_y \cdot S = \frac{mV_y^2}{2}, \quad (2.9)$$

где V_x, V_y – средние значения проекций скорости. При этом результирующие значения работы и энергии на дуге DE равны нулю, что не противоречит исходным данным.

Поскольку $|a_x| = |a_y|$ или $|a_n| = |a_t|$, то базовая формула расчета центростремительного ускорения центра масс (т. C), которое определяет движение тела по траектории DKE , имеет вид

$$a_c = \frac{V_{cp}^2}{S_{DK} + S_{KE}} = \frac{V_{cp}^2}{2(2S)}. \quad (2.10)$$

6. При моделировании движения центра масс тела – точки C – по окружности (в частности, по дуге DE) кусочно-линейной суммарной траекторией DKE , которая в пределе стягивается в дугу DE , ускорение определяется по соотношению (2.10). Проекции скоростей на оси координат изменяются следующим образом (рис. 2.7):

1) при перемещении из точки D в точку K под действием силы F_{cx} проекция V_x изменяется от V_{max} до 0, а проекция $V_y = 0$;

2) в точке K скорость равна нулю: $V_x = 0$; $V_y = 0$, изменяется направление движения за счет вращения тела $V_{\min} = 0$;

3) при перемещении из точки K в точку E под действием силы F_{cy} проекция $V_x = 0$, а проекция V_y изменяется от 0 до $V_{\max}$.

Так, на суммарном отрезке DK абсолютная скорость $V_{\text{абс}} = V_x$ и изменяется от $V_{\max}$ до 0, а на суммарном отрезке KE абсолютная скорость $V_{\text{абс}} = V_y$ и изменяется от 0 до $V_{\max}$.

Таким образом, определена динамика движения по окружности точки C , которая определяет движение всего тела (шара), но не учитывает его вращение.

Кроме того, определены экстремальные значения скорости $V_{\max}$ и $V_{\min}$.

7. При переходе от движения точки C к движению шара в целом, эпюры скоростей показаны на рис. 2.8, а–в.

Рис. 2.8. Эпюры скоростей

В частности, для вращательной части движения шара эпюра скоростей представлена рис. 2.8, в.

Для кинематического анализа сложного движения шара и определения среднего значения ускорения (а следовательно, и скорости) используется теорема Шаля: всякое перемещение *свободного твердого тела* из одного положения в другое за время Δt может быть осуществлено посредством поступательного его перемещения, равного перемещению некоторой точки тела и повороту около этой точки (рис. 2.9) [75]. Причем *вращение тела* вокруг неподвижной точки можно свести к рассмотрению *движения двух точек* [75], например, точек A и B .

В качестве «некоторой точки», т.е. полюса, принимается точка B . Если рассматривать движение тела по составляющим на некотором малом участке B_1B_2 (рис. 2.9), то вследствие сложения векторов линейная скорость V_1 в точке A будет больше, чем V_2 в точке B (рис. 2.8, а, б)

$$V_1 = V_{\text{орб}} + V_{\text{вр}}; \quad V_2 = V_{\text{орб}} - V_{\text{вр}}. \quad (2.11)$$

Для вращательной части движения при перемещении из т. A'_2 в т. A_2 (рис. 2.9) имеет место соотношение

$$(V_{\text{орб}} + V_{\text{вр}}) - (V_{\text{орб}} - V_{\text{вр}}) = 2V_{\text{вр}}.$$

Рис. 2.9. Схема к теореме Шаля

В соответствии с теоремой Шаля схема модели перемещения точек A и B по окружности с радиусом OD показана на рис. 2.10.

Рис. 2.10. Схема движения шара с диаметром AB

Из рис. 2.10 видно, что из т. B_1 в т. B_3 полюс B перемещается *поступательно по линейным отрезкам* B_1B_2 и B_2B_3 .

В свою очередь, точка A перемещается из т. A_1 в т. A_3 , имея две составляющие движения: поступательную на линейных отрезках A_1A_2' , A_2A_3' и вращательную – по дугам $A_2'A_2$ и $A_3'A_3$.

Это означает, что для т. A в соответствии с принятой моделью вращательная часть движения совершается с *радиусом кривизны, равным AB* .

При переходе от движения материальной точки C к движению объемного тела C (шар с диаметром AB , который движется как показано на рис. 2.10), максимальное значение скорости т. A (когда центр масс шара находится в т. D на рис. 2.7) определяется по соотношению

$$V_{\max} = V_{\text{абс}} = V_x = V_{\text{орб}} + 2V_{\text{вр}}, \quad (2.12)$$

а минимальная скорость будет определяться положением полюса в точке B_2 и равна нулю $V_{\min} = 0$ (рис. 2.10).

Необходимо отметить, что все точки, принадлежащие окружности с диаметром AB при сложном движении, проходят через *экстремальные точки* A и B .

Результатом такого моделирования является *средняя по модулю скорость* $V_{абс} = \text{const}$, что не противоречит положению о равномерном движении по окружности.

Тогда скорость V произвольной точки тела на окружности диаметром AB определяется как среднее значение $V_{\max}$ и $V_{\min}$, т.е. при $V_{\min} = 0$

$$V_{\text{ср}} = 0,5(V_{\text{орб}} + 2V_{\text{вп}}). \quad (2.13)$$

Таким образом, в соответствии с разработанной моделью определен радиус кривизны вращательной части движения шара, равный диаметру AB . Кроме того, определены экстремальные значения скоростей, которые имеют место на окружности с диаметром AB .

Экстремальные значения скоростей позволяют найти интеграл функции ускорения (скорости) или в простейшем случае – среднее значение ускорения (скорости) в произвольной точке, принадлежащей поверхности шара с диаметром AB .

8. Расчетная формула *гравитационной постоянной* выводится на примере тела, находящегося на поверхности Земли.

В этом случае сила тяжести F определяется в соответствии с законом всемирного тяготения

$$F = G \cdot M \cdot m / D^2, \quad (2.14)$$

где D – расстояние до оси вращения (см. рис. 2.8–2.10).

С другой стороны, сила тяжести определяется по второму закону Ньютона

$$F = ma. \quad (2.15)$$

Приравнявая (2.1) и (2.2), получим

$$G(Mm/D^2) = ma.$$

Отсюда гравитационная постоянная G

$$G = aD^2/M. \quad (2.16)$$

Соотношение для равноускоренного движения тела к центру вращения (вдоль диаметра Земли D)

$$a = V^2/2D. \quad (2.17)$$

Подставим (2.4) в (2.3), тогда

$$G = \frac{\frac{V^2}{2D} \cdot D^2}{M} = \frac{\frac{V^2}{2} \cdot D}{M} = \frac{x \cdot V^2}{M},$$

где $x = D/2 = R$ – радиус Земли. С учётом эксцентриситета вращения Земли $r = 4,70 \cdot 10^6$ м [72] минимальное расстояние до оси вращения составляет

$$x = R - r = 6,37 \cdot 10^6 - 4,70 \cdot 10^6 = 1,67 \cdot 10^6 \text{ м.}$$

В результате выведена расчетная формула гравитационной постоянной, которая с учетом $V = V_{\text{ср}}$ имеет вид

$$G = \frac{xV_{\text{ср}}^2}{M}. \quad (2.18)$$

Таким образом, коэффициент G является функцией результирующей скорости орбитального и вращательного движения тела, а также зависит от массы взаимодействующих тел.

Анализ адекватности модели

Адекватность модели подтверждается сравнением результатов расчета с экспериментальными (справочными) данными на следующих примерах.

Пример 1

Рассматривается движение планеты Земля вокруг Солнца в инерциальной гелиоцентрической системе координат XOY из точки D в точку E (рис. 2.7) с дополнительными **допущениями**.

1. Рассматривается движение по окружности с радиусом OD (рис. 2.7).
2. Тело движется плоскопараллельно из т. D в т. E по эквипотенциальной траектории, т.е. в однородном поле гравитации.
3. На Землю действует центростремительная сила, т.е. имеет место соотношение (2.10).

Тогда в соответствии с разработанной моделью поступательного движения вращающегося тела центростремительное ускорение на поверхности Земли определяется по соотношению (2.10) с учетом (2.13) и результат расчета принимает вид

$$a_{\text{ср}} = (0,5(V_{\text{орб}} + 2V_{\text{вр}}))^2 / 2D = (0,5(30 \cdot 10^3 + 2 \cdot 0,8 \cdot 10^3))^2 / 2 \cdot 12,744 \cdot 10^3 = 9,79 \text{ м/с}^2, \quad (2.19)$$

где $D = 2R = 12,744 \cdot 10^3$ км (R – средний радиус Земли); $V_{\text{орб}} = 30$ км/с; $V_{\text{вр}} = 0,8$ км/с.

Справочное значение ускорения силы тяжести $9,80 \text{ м/с}^2$. Расхождение определения ускорения силы тяжести по сравнению со справочным значением [76] составляет $-0,15 \%$.

Гравитационная постоянная G [77]

$$G = \frac{xV_{\text{ср}}^2}{M} = \frac{1,67 \cdot 10^6 \cdot (15,5 \cdot 10^3)^2}{5,98 \cdot 10^{24}} = 6,71 \cdot 10^{-11} \text{ м}^3 / (\text{кг} \cdot \text{с}^2), \quad (2.20)$$

где M – масса Земли.

Справочное значение гравитационной постоянной $6,67 \cdot 10^{-11} \text{ Нм}^2 / \text{кг}^2$ [71, 76]. Размерность $\text{м}^3 / (\text{кг} \cdot \text{с}^2)$ тождественна $\text{Нм}^2 / \text{кг}^2$. Расхождение определения гравитационной постоянной по сравнению со справочной величиной составляет -1% .

Пример 2

Рассматривается движение Луны вокруг Земли в той же системе координат.

В соответствии с разработанной моделью центростремительное ускорение на поверхности Луны определяется по соотношению (2.19)

$$a_{\text{ср}} = (0,5(V_{\text{орб}} + 2V_{\text{вр}}))^2 / 2D = (0,5(1 \cdot 10^3 + 2 \cdot 30 \cdot 10^3))^2 / 2 \cdot 384 \cdot 10^6 = 1,31 \text{ м/с}^2,$$

где $D = 384 \cdot 10^6$ м – среднее расстояние от Луны до Земли; $V_{\text{орб}} = 1 \cdot 10^3$ м/с; $V_{\text{вр}} = (4,6 + 30 \cdot 10^3) \approx 30 \cdot 10^3$ м/с – экстремальное значение скорости при совпадении вектора скорости вращения Луны с вектором орбитальной скорости Земли.

Ускорение силы тяжести на Луне, определенное по закону Всемирного тяготения, составляет

$$g = \frac{GM_{\text{л}}}{R_{\text{л}}^2} = \frac{6,67 \cdot 10^{-11} \cdot 7,34 \cdot 10^{22}}{1,737 \cdot 10^6} = 1,62 \text{ м/с}^2,$$

где $M_{\text{л}}$ – масса Луны; $R_{\text{л}}$ – радиус Луны [76]. Расхождение составляет 19 %.

Удовлетворительная сходимость результатов расчета ускорения силы тяжести и гравитационной постоянной с экспериментальными данными подтверждают адекватность модели.

Разработанная модель позволяет объяснить гироскопический эффект (рис. 2.11).

Вследствие совместного переносного и относительного (орбитального и вращательного) движения ротора возникает центробежная сила, которая обеспечивает устойчивость гироскопа к внешним воздействиям. В частности, не дает ему упасть под действием силы тяжести mg (рис. 2.11).

Рис. 2.11. Схема прецессии гироскопа [78]

Ориентация ротора ГТД в соответствии с направлением векторов внешних сил позволяет изменить величину суммарного вектора внешних сил и уменьшить нагрузку на двигатель. Одним из частных случаев реализации предлагаемой модели, применительно к ГТД, является использование ориентации ротора двигателя и летательного аппарата с целью снижения внешних нагрузок. Например, можно расположить летательный аппарат в соответствии с направлением векторов скоростей $V_{\text{орб}}$, $V_{\text{вр}}$ так, чтобы центробежное ускорение, возникающее вследствие вращения ротора ГТД, было направлено в противоположную сторону ускорения силы тяжести. В результате получим уменьшение величины силы тяжести, действующей на летательный аппарат. Необходимо отметить, что величина изменения веса серийного двигателя в этом случае составляет порядка нескольких десятков ньютонов, что для серийных изделий пренебрежимо мало.

Результаты расчета коэффициента G_1 и ускорения силы тяжести g_1 для Земли приведены в табл. 2.1. Величины центробежной и центроостремительной сил определяются для тела массой 80 кг.

Из табл. 2.1 видно, в частности, что результаты расчета для Земли удовлетворительно сходятся со справочными данными, что подтверждает адекватность модели. Гравитация проявляется превышением центроостремительной силы над центробежной.

Результаты расчета коэффициента G_2 и ускорения силы тяжести g_2 для Луны приведены в табл. 2.2.

Таблица 2.1

Результаты расчета и справочные данные

Обозначение параметра, размерность	Величина параметра		Расхождение, %
	расчетная	справочная	
G_1 , Нм ² /кг ²	$6,71 \cdot 10^{11}$	$6,67 \cdot 10^{11}$	0,57
g_1 , м/с ²	9,79	9,80	–0,15
F_c , Н	783,3	784,0	0,4
$F_{цб}$, Н	1,8	–	–

Таблица 2.2

Результаты расчета и справочные данные

Обозначение параметра, размерность	Величина параметра		Расхождение, %
	расчетная	справочная	
$G_2 \cdot 10^{11}$, Нм ² /кг ²	5,60	6,67	16
g_2 , м/с ²	1,31	1,62	19

Из табл. 2.2 видно, в частности, что результаты расчета для Луны имеют расхождение 16 и 19 %. Однако, если рассчитать ускорение силы тяжести с учетом расчетного значения коэффициента G_2 для Луны, то расхождение снижается с 19 до 3 %.

Выводы

1. Применение разработанной модели силы тяжести позволяет заложить основу для:

- увеличения подъемной силы летательного аппарата за счет соответствующей ориентации векторов действующих сил;
- объяснения физической сущности гироскопического эффекта;
- объяснения физической сущности самоцентрирования ротора на сверхкритических скоростях вращения.

2. Масса, сосредоточенная в центре вращения, не является причиной притяжения (гравитации), масса есть результат действия центростремительной силы (центростремительного ускорения).

3. Гравитация имеет место при $F_c > F_{цб}$. Антигравитация имеет место при $F_c < F_{цб}$, то есть определяется соотношением центростремительной и центробежной сил.

2.1.3. Модель опыта Г. Кавендиша*Описание опыта Г. Кавендиша*

Установка представляет собой [79–82] деревянное коромысло длиной около 1,8 м с прикрепленными к его концам небольшими свинцовыми шарами диаметром 5 см и массой 775 г, подвешенное на нити из посеребренной меди длиной 1 м. К этим шарам с помощью специальной поворотной фермы, ось вращения которой совпадает, насколько возможно точно, с осью нити, подводятся два свинцовых шара большего

размера — диаметром 20 см и массой 49,5 кг, жестко закрепленные на ферме. Вследствие гравитационного взаимодействия малых шаров с большими коромысло отклоняется на некоторый угол. Зная упругие свойства нити, а также угол поворота коромысла, вычисляется сила притяжения малого шара к большому. Упругость нити на кручение определяется по периоду свободных колебаний коромысла (15 мин) (рис. 2.12).

Рис. 2.12. Вертикальный разрез установки (копия рисунка из отчета Г. Кавендиша «Experiments to determine the Density of the Earth», опубликованного в Трудах Лондонского Королевского Общества за 1798 г.)

Для компенсации погрешностей физических условий опыта выполняются следующие мероприятия.

1. Опыт проводится в два приема. Сначала большие шары с помощью поворотного механизма фермы подводятся к малым с одной стороны, например, против часовой стрелки, как показано на рис. 2.12, б. Затем — с противоположной, и измеряется двойной угол закручивания нити — от отклонения коромысла в одном направлении до противоположного. Это увеличивает непосредственно измеряемое значение угла, а главное — компенсирует влияние возможного наклона или деформации установки и/или здания при перемещении тяжелых шаров в ходе эксперимента. Кроме

того, исключается воздействие: технически неизбежной асимметрии самой установки; гравитационного влияния массивных объектов, находящихся поблизости (зданий, гор и т.п.); магнитного поля Земли и ее вращения; положения Солнца и Луны.

2. Для предотвращения влияния конвекционных потоков воздуха в помещении крутильные весы заключаются в деревянный кожух.

3. Для исключения магнитного взаимодействия железных стержней фермы и свинцовых шаров Кавендиш заменил стержни медными, получив те же результаты.

На рис. 2.12, а: *ABCDDCBAEFFEA* — неподвижный деревянный кожух, внутри которого подвешены крутильные весы;

m — тонкий деревянный стержень коромысла;

g — растяжка из тонкой серебряной проволоки, сообщающая жесткость коромыслу;

X — малые шары, подвешенные к коромыслу на проволоке;

K — рукоятка механизма первоначальной установки коромысла;

RrPrR — поворотная ферма, с закрепленными на ней большими шарами *W*;

MM — шкив поворотного механизма фермы;

L — осветительные приборы;

T — «телескопы» для наблюдения за отклонением коромысла через остекленные отверстия в торцевых стенках кожуха, напротив концов коромысла. На нижних краях этих отверстий с внутренней стороны кожуха были установлены шкалы из слоновой кости с делениями в 1/20 дюйма (около 1,2 мм).

На торцах коромысла прикреплены верньеры из того же материала, с такими же делениями, подразделенными на 5 равных отрезков. Точность измерения отклонения конца коромысла составляла, таким образом, 1/100 дюйма.

Наличие двух «телескопов» позволяет контролировать корректность эксперимента. Различие показаний «телескопов» указывает на наличие дефекта в конструкции установки или на неучтенный физический фактор.

Для своего времени эта установка явилась беспримерным шедевром искусства физического эксперимента.

Подробное описание установки и протоколы эксперимента, составленные Г. Кавендишем, приведены в [82].

Модель взаимодействия тел

В данном разделе приведено обоснование физической сущности силы взаимодействующих масс в опыте Г. Кавендиша на основе разработанной модели. Рассматривается сближение тел вследствие их движения к центру вращения.

Исходные предпосылки.

Два тела *A* и *B* находятся на некотором расстоянии *AB* друг от друга на одинаковой высоте *h* над поверхностью Земли. Траектория движения (падения) каждого из тел *A* и *B* при воздействии только силы тяжести направлена по радиусу Земли. Иначе говоря, траектории тел *A* и *B* непараллельны.

Допущения

1. Рассматривается взаимодействие двух тел.

2. Два тела находятся друг от друга на расстоянии *AB* (рис. 2.13).

3. Рассматривается взаимодействие шарика относительно неподвижного пробного тела. То есть расстояние AB соответствует расстоянию между телами в опыте Г. Кавендиша.

Под действием силы тяжести тела A и B перемещаются к центру в точке O вдоль радиуса. Вследствие такого перемещения расстояние между A и B уменьшается (рис. 2.13) – тела сближаются.

В точках A и B , лежащих на одном диаметре, сила притяжения между двумя телами равна силе тяжести. В точках A_1 и B_1 сила притяжения между двумя телами будет равна горизонтальной проекции силы тяжести F_τ

Рис. 2.13. Схема взаимодействия тел

$$F_\tau = mg \cdot \operatorname{tga}. \quad (2.21)$$

Аналогично в точках A_2 и B_2 и т.д.

Таким образом, два тела под действием силы тяжести сближаются друг с другом вследствие наличия горизонтальной составляющей центростремительной силы (силы тяжести).

Расчетные формулы

Рассматривается взаимодействие шарика массой $m_1 = 0,775$ кг и пробного тела массой $m_2 = 49,5$ кг. Расстояние между центрами масс тел в опыте Г. Кавендиша ориентировочно можно определить по схеме на рис. 2.12. Расстояние между ними в соответствии со схемой определяется колебаниями шарика. Минимальное расстояние составляет $r_{\min} = 0,238$ м.

В соответствии с законом всемирного тяготения сила взаимодействия F_g определяется по формуле

$$F_g = G \cdot m_1 \cdot m_2 / r^2, \quad (2.22)$$

где $G = 6,673 \cdot 10^{-11}$ – гравитационная постоянная.

Величина силы взаимодействия по разработанной модели определяется в соответствии со схемой на рис. 2.12 по формуле (2.21)

Результаты расчета сведены в табл. 2.3.

Таблица 2.3

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		в формуле (2.21)	в формуле (2.22)	расхождение, %
Расстояние между центрами масс тел	м	0,281	0,281	0
Сила гравитации, F_g	Н	$3,234 \cdot 10^{-8}$		
Горизонтальная проекция силы тяжести, F_τ	Н		$3,236 \cdot 10^{-8}$	0,6
Гравитационная постоянная	Н·м ² /кг ²	$6,671 \cdot 10^{-11}$		
Отношение F_τ / F_g	—		$6,673 \cdot 10^{-11}$	0,3

Из табл. 2.3 видно, что величина силы гравитационного взаимодействия, рассчитанная как горизонтальная проекция силы тяжести F_τ , удовлетворительно сходится с величиной силы гравитации F_g , определенной по закону всемирного тяготения, расхождение составляет 0,6 %. Это является подтверждением адекватности модели.

Выводы

1. Два тела под действием силы тяжести сближаются друг с другом вследствие горизонтальной составляющей центростремительной силы тяжести. Гравитационное взаимодействие определяется сближением тел вследствие их движения к центру вращения Земли.

2. Отношение тангенциальной (горизонтальной) проекции силы тяжести к силе тяжести пробного тела F_τ/F_g численно равно величине гравитационной постоянной. Это обстоятельство является дополнительным подтверждением адекватности модели.

2.1.4. Самоцентрирование ротора

Частным следствием модели является объяснение физической сущности некоторых механических явлений, которые имеют лишь математическую трактовку.

При наличии эксцентриситета ротора a (несовпадении центра масс с осью вращения) возникает взаимодействие центробежной силы F и силы упругости ротора F_y (рис. 2.14) [83]. При установившемся движении имеет место равновесие сил

$$F = F_y,$$

или

$$m(a + y)\omega^2 = cy,$$

где m — масса ротора; a — эксцентриситет; y — прогиб вала ротора; ω — угловая скорость ротора; c — коэффициент жесткости вала на изгиб.

Откуда прогиб вала

$$y = m\omega^2 a / (c - m\omega^2). \quad (2.23)$$

Рис. 2.14. Схема симметричного однодискового ротора [83]

При превышении угловой скорости вращения ротора некоторой критической величины $\omega_{кр}$ (при которой прогиб резко возрастает) возникает явление самоцентрирования [83], то есть прогиб уменьшается, и центр масс стремится к оси вращения.

Математическое объяснение самоцентрирования [83] следует из выражения (2.23), а именно: прогиб вала ротора y при $\omega > \omega_{кр}$ принимает отрицательные значения.

Физическая сущность самоцентрирования, в соответствии с разработанной моделью, основанной на совместном вращательном и орбитальном движении ротора, заключается в следующем.

При $\omega > \omega_{кр}$ изменяется соотношение между центробежной силой $F_{цб}$

$$F_{цб} = m \cdot (\omega^2 r) \quad (2.24)$$

и центростремительной силой F_c

$$F_c = m \cdot a_c,$$

где a_c определяется по формуле (2.19). При $\omega > \omega_{кр}$ центростремительная сила превышает центробежную $F_c > F_{цб}$, что приводит к самоцентрированию вращающегося ротора.

Заключение

Физической сущностью гравитации является центростремительное ускорение (центростремительная сила), вызванное совместным орбитальным и вращательным движением объекта.

Солнце образовалось в результате концентрации материи в центре вращения Солнечной системы под действием центростремительной силы (центростремительного ускорения). Солнце не притягивает Землю и другие планеты, Солнце является результатом действия центростремительного ускорения движущейся материи.

Причиной возникновения антигравитации является изменение соотношения между центростремительной $F_{цс}$ и центробежной $F_{цб}$ силами. Возможны следующие варианты этого соотношения.

1. Превышение центробежной силы над центростремительной во вращательном движении

$$F_{цб} > F_{цс}.$$

Например, общепринято, что Вселенная расширяется. Это обстоятельство объясняется превышением центробежной силы над центростремительной в совместном орбитальном и вращательном движении темной материи, из которой состоит вся материя Вселенной. При этом расширение происходит с уменьшением скорости.

2. Искусственное изменение направления вращательного движения в совместном орбитальном и вращательном движении объекта. Это также приводит к изменению соотношения между центростремительной $F_{цс}$ и центробежной $F_{цб}$ силами. При этом орбитальная скорость должна превысить некоторую критическую скорость, при которой

$$F_{цб} = F_{цс}.$$

Отсюда следует, что для получения антигравитации необходимо изменить направление вращательной составляющей скорости движения тела относительно собственной оси.

2.2. Силы межатомного взаимодействия в материалах

Физическая сущность структуры атома

Вакуум — это не пустота, а пространство, заполненное движущейся *темной материей*, которая является источником энергии вращения атома. Его колебания относительно центра вращения (осцилляция) вызваны смещением центра масс атома — эксцентриситетом. Наличие внешнего источника энергии — движущейся темной материи — является основой возникновения и устойчивости атома.

Светлая материя (состоящая из протонов, нейтронов, электронов и атомов) образуется из темной материи в результате действия центростремительной силы. В свою очередь, центростремительное ускорение (и, следовательно, сила) возникает в результате совместного орбитального и вращательного движения частиц темной материи (темных нейтрино).

Таким образом, светлая материя является неотъемлемой частью темной материи и «плавает» в ней.

Гравитация, в соответствии с разработанной моделью, появляется в результате превышения центростремительной силы движущейся темной материи над ее центробежной силой $F_{цс} > F_{цб}$.

Понятие темной энергии введено астрофизиками как необъяснимое на сегодняшний день явление антигравитации. Антигравитация, в соответствии с разработанной моделью, появляется в результате превышения центробежной силы движущейся темной материи над ее центростремительной силой, то есть темная энергия — это часть темной материи, у которой $F_{цб} > F_{цс}$, и в этом заключается физическая сущность темной энергии.

2.2.1. Вихревая модель атома

Атом моделируется в виде вихря «жидкости» из темной материи, состоящей из «темных нейтрино». Под действием центростремительного ускорения (возникающего в результате совместного орбитального и вращательного движения) «жидкость» из темной материи собирается в центре вращения. Поэтому в центре вращения плотность вещества выше, чем на периферии вихря — это и есть ядро атома (протон в случае атома водорода). Электрон — это оставшаяся часть вихря без плотной центральной части. Такое деление условно, т.к. атом — единое целое. Вихревая модель атома соответствует понятиям квантовой механики о том, что электрон «размазан» в атоме и присутствует во всех точках орбиты одновременно.

Допущения вихревой модели атома

1. Движущаяся темная материя является основой светлой материи и источником ее энергии.

2. Модель атома аналогична модели галактики. В центре находится ядро. Ядро окружает сферическая оболочка — электронное облако. Строение оболочки неравномерное. Наиболее плотная часть является спиралевидным диском (рис. 2.15).

3. Энергетические уровни атома определяются наличием спиралей в структуре материи внутри атома. Наличие спиралей связано с распространением волн сжатия внутри атома (по аналогии со спиралью в галактиках) [84].

Рис. 2.15. Схема строения галактики Млечный путь [84]

4. Атом образуется в результате вихревого движения темной материи. Вихрь темной материи есть совокупность вращающихся частиц темной материи — темных нейтрино. Каждая частица движется по орбите, одновременно вращаясь вокруг собственной оси. Ядро — вихрь состоит из n -го количества малых вихрей, являющихся частью ядра.

В соответствии с законом сохранения сумма моментов количества движения каждого вихря равна моменту количества движения ядра — вихря

$$L_{\text{ядра}} = \sum (m_i \cdot v_i \cdot r_i) = \text{const.}$$

Это допущение согласуется с положениями механики жидкости и газа:

— циркуляция по любому контуру может быть выражена в виде суммы циркуляций по отдельным клеткам произвольной сетки, покрывающей площадь, ограниченную этим контуром (рис. 2.16) [85];

— возникновение циркуляции всегда связано с образованием вихрей в потоке жидкости или газа.

Иначе говоря, циркуляция скорости, характеризующая вращение ядра, подтверждает наличие вихрей внутри ядра.

Теорема Стокса в механике жидкости и газа, показывающая связь циркуляции с образованием вихрей, основана на законе сохранения момента количества движения (импульса).

Покажем это. По определению, циркуляция скорости по окружности равна

$$\Gamma = v \cdot (2\pi \cdot r) = \text{const.}$$

Умножим обе части равенства на массу m и поделим на 2π

$$m \cdot \Gamma / 2\pi = m \cdot v \cdot r.$$

Тогда в правой части уравнения получим момент количества движения (импульса)

$$L = m \cdot v \cdot r = \text{const.}$$

5. Вихрь моделируется *механической моделью*, в которой масса вихря сосредоточена в материальной точке, расположенной на радиусе равном радиусу вихря. При этом соблюдаются законы сохранения энергии и момента количества движения (импульса).

Рис. 2.16. Суммирование циркуляции [85]

2.2.2. Расчетные формулы вихревой модели

Вихревая модель используется не только для макрообъектов (Солнечная система, галактика и т.п.), но и для объектов с нано- и фемторазмерами — элементарных частиц и атомов.

В случае атома необходимо выделить следующие допущения в модели:

1) материальная основа элементарных частиц (протонов, электронов и др.) — темная материя;

2) источником энергии вращения электронной оболочки атома и его ядра (протонов и нейтронов) является движение темной материи, которая образует единое поле взаимодействий (электромагнитное суть гравитационное). Поэтому в качестве расчетных формул используются законы сохранения, а также следующие физические законы.

Второй закон Ньютона

$$F_1 = m \cdot a_{\text{ис}}.$$

Закон Кулона

$$F_2 = e^2 / (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2).$$

Закон всемирного тяготения

$$F_3 = (G \cdot m \cdot M) / r^2.$$

При этом коэффициент G зависит от скорости движения темной материи $V_{\text{ср}}$.

$$G = x \cdot V_{\text{ср}} / M,$$

где x — расстояние до центра масс; M — масса.

Физическая сущность перечисленных соотношений едина, т.к. в основе возникновения этих сил лежит центростремительное движение *темной материи* как для макро-, так и для нано- и фемторазмеров. В частности, природой электростатического взаимодействия также является центростремительная сила (ускорение). Подтверждением адекватности модели (а также единства физических законов в природе) является примерное равенство сил $F_1 \approx F_2 \approx F_3$ или $F_{\text{ис}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ в приведенных ниже примерах.

2.2.3. Сравнительный анализ результатов расчета взаимодействия электронной оболочки с ядром атома

Основой сравнительного анализа является примерное равенство сил $F_1 \approx F_2 \approx F_3$, а также удельного (по отношению к одному электрону оболочки атома) расчетного потенциального барьера $\Pi_{\text{бар}}$ со справочным значением энергии возбужденного состояния атома $U_{\text{возб}}$.

Необходимо отметить, что справочный радиус атома определяется как половина минимального расстояния между узлами кристаллической решетки. То есть перекрытие электронных оболочек двух соседних атомов не учитывается. В то же время расчетное значение радиуса атома определяется с учетом перекрытия электронных оболочек двух соседних атомов. Отсюда расхождение этих радиусов.

В атомном спектре элементов учитывается первое (ближайшее к равновесному состоянию) возбужденное состояние атома без учета тонкой структуры спектра.

Далее приведены результаты некоторых расчетов.

Атом водорода

Фрагмент диаграммы уровней энергии и спектра атома водорода, из которой взяты справочные значения энергий, приведен на рис. 2.17 [86].

Рис. 2.17. Уровни энергии и атомный спектр водорода

Потенциальный барьер $\Pi_{\text{бар}}$ определяется как произведение результирующей между центростремительной и центробежной силами в атоме на диаметр атома.

$$\Pi_{\text{бар}} = (F_{\text{цс}} - F_{\text{цб}}) \cdot D_{\text{атом}},$$

где $D_{\text{атом}}$ — диаметр атома.

Затем величина $\Pi_{\text{бар}}$ сравнивается с величиной изменения уровня энергии в возбужденном состоянии атома $U_{\text{возб}}$. Результаты сравнения сведены в табл. 2.4–2.12 для различных элементов.

Результаты расчета для атома водорода приведены в табл. 2.4.

Таблица 2.4

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$0,5264 \cdot 10^{-10}$	$0,52917 \cdot 10^{-10}$	–0,5
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	$20,7 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	$20,8 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$20,7 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	$5,2 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{\text{бар}}$	эВ	10,15		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{\text{возб}}$	эВ		10,20 [86]	–0,4

Как видно из табл. 2.4, что в атоме водорода центростремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер (отсутствует излучение в равновесном состоянии). Величина потенциального барьера имеет расхождение со справочным значением изменения уровня энергии атома –0,4 %.

Атом алюминия

Таблица 2.5

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,70 \cdot 10^{-10}$	$1,43 \cdot 10^{-10}$	18,8
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	$2,81 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	$2,81 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$2,81 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	$1,61 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{\text{бар}}$	эВ	2,54		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{\text{возб}}$	эВ		3,14 [86]	–18,9

В атоме Al центроостремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера имеет расхождение со справочным значением изменения уровня энергии атома – 18,9 %.

Атом ванадия

Таблица 2.6

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,60 \cdot 10^{-10}$	$1,34 \cdot 10^{-10}$	19,4
Центроостремительная сила $F_{цс}$	Н	$3,37 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$3,35 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$3,37 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,73 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	3,3		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		3,1 [86]	6,4

В атоме V центроостремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера имеет расхождение со справочным значением изменения уровня энергии атома 6,4 % .

Атом железа

Таблица 2.7

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,68 \cdot 10^{-10}$	$1,24 \cdot 10^{-10}$	26,1
Центроостремительная сила, F_c	Н	$3,75 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$3,74 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$3,75 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,63 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	4,46		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		3,242...4,956 [86]	—

В атоме Fe центроостремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера лежит в диапазоне изменения уровня энергии атома.

Атом лития

Таблица 2.8

Наименование параметра	Размер- ность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,73 \cdot 10^{-10}$	$1,55 \cdot 10^{-10}$	11,6
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$2,49 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$2,50 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$2,49 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,59 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	1,95		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		1,85 [86]	5,1

В атоме Li центростремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера имеет расхождение со справочным значением изменения уровня энергии атома 5,1 %.

Атом меди

Таблица 2.9

Наименование параметра	Размер- ность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,73 \cdot 10^{-10}$	$1,28 \cdot 10^{-10}$	35,1
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$3,56 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$3,53 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$3,56 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,58 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	4,29		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		3,82...5,348 [86]	—

В атоме Cu центростремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера лежит в диапазоне изменения уровня энергии атома.

Атом никеля

Таблица 2.10

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,64 \cdot 10^{-10}$	$1,25 \cdot 10^{-10}$	31,2
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$3,72 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$3,72 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$3,72 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,68 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	4,19		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		4,16...4,53 [86]	—

В атоме Ni центростремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер 4,19 Эв. Величина потенциального барьера лежит в диапазоне изменения уровня энергии атома.

Атом натрия

Таблица 2.11

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$2,45 \cdot 10^{-10}$	$1,89 \cdot 10^{-10}$	29,6
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$1,68 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$1,67 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$1,67 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,12 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	1,70		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		2,10 [86]	–17,0

В атоме Na центростремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера имеет расхождение со справочным значением изменения уровня энергии атома –17,0 % .

Атом хрома

Таблица 2.12

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,47 \cdot 10^{-10}$	$1,27 \cdot 10^{-10}$	15,7
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$3,68 \cdot 10^{-9}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$3,69 \cdot 10^{-9}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$3,68 \cdot 10^{-9}$	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	$1,87 \cdot 10^{-9}$	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{возб}$	эВ	3,32		
Величина изменения уровня энергии атома, $U_{возб}$	эВ		2,90...3,45 [86]	—

В атоме Ni центростремительная сила больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер. Величина потенциального барьера лежит в диапазоне изменения уровня энергии атома.

Таким образом, результаты расчета удовлетворительно сходятся со справочными данными, что подтверждает адекватность модели. В дальнейшем эти результаты используются для определения силы химической связи в монокристаллах.

2.2.4. Электронная плотность

Величина электронной плотности необходима для расчета силы химической связи в кристаллической решетке монокристалла по вихревой модели атома.

Допущения

1. Сфера электронной оболочки атома *геометрически* разбивается на сферические оболочки-уровни (шаровые слои) на одинаковом расстоянии между собой по радиусу атома.

Масса электронной оболочки атома распределена равномерно. Иначе говоря, масса оболочки на каждом уровне от внешнего радиуса атома до радиуса ядра одинаковая, изменяется только объем и плотность, т.е. соблюдается закон сохранения массы $\sum m_e = M_e = \text{const}$.

2. В соответствии с вихревой моделью электронной оболочки вихрь представляется механической моделью с точечной массой на наружном диаметре. В этом случае законы сохранения момента количества движения и момента инерции для вихря и механической модели выполняются.

3. Если потенциальная энергия от центростремительной силы больше кинетической энергии от центробежной силы электронной оболочки, то имеется потенциальный барьер, излучения нет.

4. Объем ядра атома не учитывается.

*Расчетные формулы*Объем атома V

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3,$$

где R – радиус атома.Плотность электронной оболочки атома ρ

$$\rho = m/V.$$

Расчетное распределение электронной плотности в атоме никеля Ni от расчетного радиуса атома до справочного радиуса на поверхности ядра (условная величина) приведено на рис. 2.18.

Рис. 2.18. Распределение электронной плотности Ni

По результатам расчета получено, что электронная плотность в атоме никеля Ni изменяется от $3,21 \text{ кг/м}^3$ на поверхности атома до $1,85 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ на поверхности ядра.

Распределение электронной плотности в дальнейшем используется для оценки модуля упругости двойных соединений типа Ni–Re по вихревой модели атома.

2.2.5. Модель химической связи*Природа химической связи*

В определенных условиях часть вещества одного атома (т.е. часть вихря, состоящего из «темных нейтрино») объединяется с вихрем другого атома. Так как вихри взаимодействующих атомов имеют центростремительное ускорение, направленное в противоположные стороны, то вихрь левого атома «тянет» влево часть вихря правого атома. Соответственно, вихрь правого атома «тянет» вправо часть вихря левого атома (рис. 2.19). Вследствие этого взаимодействия возникает сцепление двух вихрей-атомов, определяемое как химическая связь.

Рис. 2.19. Схема химической связи двух атомов

Аналогична модель природы ядерного взаимодействия, но сцепление происходит на уровне ядер. При этом центр вращения вихрей смещается относительно друг друга.

Таким образом, «жидкостная» вихревая модель не противоречит квантово-механической модели атома о «размазанности» электрона.

Допущения и расчетные формулы

1. Химическая связь в монокристалле определяется для элементарной атомной ячейки, которая схематично представлена на рис. 2.20.

Рис. 2.20. Схема расположения ячейки в кристаллической решетке

2. Природой химической связи является взаимодействие электронных оболочек атомов (рис. 2.19).

3. Применяется **единая** модель расчета кулоновской силы (для силы и модуля упругости)

$$F_g = \frac{e_1^2}{4\pi\epsilon_0 \left(\frac{1}{2}r_q\right)^2},$$

где $r_q = r_{100}$ — расстояние между взаимодействующими зарядами; r_{100} — расстояние между ближайшими соседями-атомами.

4. В случае химической связи центр вращения масс находится между центрами взаимодействующих масс. Поэтому в формуле всемирного закона тяготения

$$F_g = G_{\text{атом}} \frac{m_e M_c}{r_g^2}$$

расстояние между центрами взаимодействующих масс определяется как $r_g = a_0/2$.

5. Современными техническими средствами радиусы стационарных орбит атомов измерить невозможно. Для проверки теории необходимо обратиться к таким величинам, которые могут быть измерены экспериментально [70]. Поэтому принимается, что радиус атома изменяемая (варьируемая) величина, а расстояние между атомами (период кристаллической решетки) a_0 – физическая константа, определяемая экспериментально, то есть

$$r_{\text{атом}} = \text{var}; \quad a_0 = \text{const.}$$

6. Поскольку $r_{\text{атом}} = \text{var}$, то радиус атома подбирается до выполнения условия $F_c \approx F_q \approx F_g$. С другой стороны, условие $F_c \approx F_q \approx F_g$ определяет возможность расчета действительного значения радиуса атома.

7. Доля взаимодействующей массы (взаимодействующих электронов в объемной доле взаимодействующих сфер) $m_{\text{доля}}$ определяется как

$$m_{\text{доля}} = V_{\text{доля}} \cdot M_e,$$

где $M_e = m_e \cdot Z$ – масса электронной оболочки; m_e – масса электрона; Z – атомный заряд элемента.

2.2.6. Сравнительный анализ

Подтверждением адекватности модели (а также единства физических законов в природе) является примерное равенство сил $F_c \approx F_q \approx F_g$ и соответствие расчетного и справочного значений модуля упругости элемента в табл. 2.13–2.17.

Необходимо отметить, что в расчетном значении радиуса атома учитывается перекрытие электронных оболочек двух взаимодействующих атомов, а в справочном – не учитывается.

Кристаллическая решетка никеля

Таблица 2.13

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,52 \cdot 10^{-10}$	$1,24 \cdot 10^{-10}$	22,1
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	$1,736 \cdot 10^{-8}$	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	$1,745 \cdot 10^{-8}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$1,736 \cdot 10^{-8}$	—	—
Модуль упругости $\langle 001 \rangle$	ГПа	140,6	138,0[7]	1,4

Из табл. 2.13 видно, что величины центростремительной силы $1,736 \cdot 10^{-8}$ Н и кулоновской $1,745 \cdot 10^{-8}$ Н примерно одинаковы, расхождение составляет 0,5 %. При этом расхождение расчетного и справочного значений модуля упругости никеля в кристаллографическом направлении $\langle 001 \rangle$ составляет 1,4 %.

Кристаллическая решетка железа

Таблица 2.14

Наименование параметра	Размер- ность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,72 \cdot 10^{-10}$	$1,24 \cdot 10^{-10}$ ($1,43 \cdot 10^{-10}$)	20
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$1,172 \cdot 10^{-8}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$1,123 \cdot 10^{-8}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$1,172 \cdot 10^{-8}$	—	—
Модуль упругости $\langle 100 \rangle$	ГПа	136,7	132 [7]	3,5

Из табл. 2.14 видно, что величины центростремительной силы $1,172 \cdot 10^{-8}$ Н и кулоновской $1,12 \cdot 10^{-8}$ Н примерно одинаковы, расхождение составляет 4,3 %. При этом расхождение расчетного и справочного значений модуля упругости железа в кристаллографическом направлении $\langle 001 \rangle$ – 3,5 %.

Кристаллическая решетка меди

Таблица 2.15

Наименование параметра	Размер- ность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,52 \cdot 10^{-10}$	$1,28 \cdot 10^{-10}$	19,3
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$1,174 \cdot 10^{-8}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$1,187 \cdot 10^{-8}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$1,174 \cdot 10^{-8}$	—	—
Модуль упругости $\langle 110 \rangle$	ГПа	136,2	131 [7]	4,0

Из табл. 2.15 видно, что величины центростремительной силы $1,174 \cdot 10^{-8}$ Н и кулоновской $1,187 \cdot 10^{-8}$ Н примерно одинаковы, расхождение составляет –1,1 %. При этом расхождение расчетного и справочного значений модуля упругости меди в кристаллографическом направлении $\langle 110 \rangle$ – 4,0 %.

Кристаллическая решетка вольфрама

Таблица 2.16

Наименование параметра	Размер- ность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,64 \cdot 10^{-10}$	$1,40 \cdot 10^{-10}$	20
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$3,305 \cdot 10^{-8}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$3,243 \cdot 10^{-8}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$3,305 \cdot 10^{-8}$	—	—
Модуль упругости $\langle 110 \rangle$	ГПа	401,4	389 [7]	3,2

Из табл. 2.16 видно, что величины центростремительной силы $3,305 \cdot 10^{-8}$ Н и кулоновской $3,243 \cdot 10^{-8}$ Н примерно одинаковы, расхождение составляет 1,9 %. При этом расхождение расчетного и справочного значений модуля упругости вольфрама в кристаллографическом направлении $\langle 110 \rangle$ – 3,2 %.

Кристаллическая решетка молибдена

Таблица 2.17

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус атома	м	$1,67 \cdot 10^{-10}$	$1,39 \cdot 10^{-10}$	20,6
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	$2,354 \cdot 10^{-8}$	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	$2,349 \cdot 10^{-8}$	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	$2,354 \cdot 10^{-8}$	—	—
Модуль упругости $\langle 110 \rangle$	ГПа	322,3	313 [7]	2,9

Из табл. 2.17 видно, что величины центростремительной силы $2,354 \cdot 10^{-8}$ Н и кулоновской $2,349 \cdot 10^{-8}$ Н примерно одинаковы, расхождение составляет 0,2 %. При этом расхождение расчетного и справочного значений модуля упругости молибдена в кристаллографическом направлении $\langle 110 \rangle$ – 2,9 %.

Аналогичные результаты получены и для других элементов таблицы Д.И. Менделеева. Удовлетворительная сходимость результатов расчета со справочными данными [7] подтверждает адекватность модели.

Таким образом, центростремительная сила (ускорение) вихревого движения темной материи определяет природу электрического заряда и химической связи. Иначе говоря, электростатическая сила вызвана взаимодействием вихрей двух атомов.

2.2.7. Модуль упругости двойных соединений

Электростатическая модель упругого взаимодействия имеет ограниченную область применения. В частности, для двойных соединений типа Ni–Re нет возможности рассчитать модуль упругости.

Учитывая единую природу внутри- и межатомного взаимодействия как электростатических сил, так и гравитационных, в данном случае задача определения упругих характеристик решается на основе *вихревой модели атома*, сущность которой изложена в п. 2.2. При этом сила взаимодействия вихрей атомов оценивается с помощью электронной плотности, принципы расчета которой приведены в п. 2.2.4.

Допущения

Основой для расчета является учет сил межатомного взаимодействия в кристаллической решетке материала.

1. Модуль упругости является характеристикой химической связи в монокристалле.
2. Химическая связь определяется электростатическим взаимодействием положительных и отрицательных зарядов кристаллической решетки в соответствии с законом Кулона.

Сила химической связи определяется числом взаимодействующих электронов внешней оболочки атома.

3. Число взаимодействующих электронов в решетке Ni и решетке Re разное, поэтому сила взаимодействия в решетках этих атомов также разная. В частности, для поликристаллов при 20°C: модуль упругости Ni равен 196 ГПа, а у Re 470 ГПа.

4. Влияние легирования на модуль упругости твердого раствора (например, на основе Ni) определяется массовой долей легирующего элемента.

В частности, при легировании Ni рением с массовой долей до 25 % нет условий (не хватает Re) для образования упорядоченной структуры. В данном случае под упорядоченной структурой подразумевается непрерывная цепочка атомов Ni–Re–Ni–Re... хотя бы в одном кристаллографическом направлении на всю длину монокристалла. Поэтому, когда нет непрерывной цепочки, модуль упругости жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС) определяется кристаллической решеткой твердого раствора, т.е. мало отличается от модуля упругости чистого Ni.

При массовой доле рения свыше 25% (варианты решения задачи приведены ниже) возможно образование непрерывных цепочек атомов Ni–Re–Ni–Re... на всю длину монокристалла. Здесь полагается, что образуется двойная система Ni–Re, для которой и проводится расчет. В этом случае химическая связь определяется свойствами двух атомов Ni и Re. Очевидно, что модуль упругости E соединения Ni–Re будет лежать в интервале значений каждого из атомов, т.е. $E_{\text{Ni}} < E_{\text{Ni-Re}} < E_{\text{Re}}$.

Результаты расчета

Дополнительные допущения

1. Рассматривается бездефектный монокристалл.
2. Основой для расчета модуля упругости является элементарная атомная ячейка, которая, периодически повторяясь, образует монокристалл. Поэтому принимается, что структура двойного соединения Ni–Re упорядоченная (хотя бы в одном кристаллографическом направлении).
3. Исходными данными для расчета являются справочные значения периода кристаллической решетки a_0 и массовая доля компонентов соединения. Для Ni–Re с массовой долей Re 0,1412 $a_0 = 3,582 \cdot 10^{-10}$ м [87].

Модуль упругости зависит от периода кристаллической решетки a_0 . Но в трех вариантах расчета принято $a_0 = 3,582 \cdot 10^{-10}$ м, т.к. для других массовых долей период кристаллической решетки неизвестен. Поэтому если будут известны a_0 , соответствующие массовой доле, то и значения модуля упругости будут другими.

Варианты расчета для различных массовых долей Re в соответствующем кристаллографическом направлении в случае образования непрерывных цепочек атомов Ni–Re–Ni–Re....

1. Направление $\langle 001 \rangle$. Один атом Re в ячейке, остальное (3 атома) — никель (рис. 2.21). Массовая доля Re — 51%. Расчетное значение модуля упругости $E_{001} = 202$ ГПа. В этом варианте в направлениях $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ расчет не проводился.

Рис. 2.21. Структура атомной ячейки с массовой долей Re 51 %

2. Направление $\langle 110 \rangle$. 4/8 атома рения в ячейке, остальное (3,5 атома) — никель (рис. 2.22). Массовая доля Re — 31 %. Расчетное значение модуля упругости $E_{110} = 303$ ГПа. В этом варианте в направлениях $\langle 001 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ расчет не проводился.

Рис. 2.22. Структура атомной ячейки с массовой долей Re 31 %

3. Направление $\langle 111 \rangle$. 3/8 атома рения в ячейке, остальное — никель (рис. 2.23). Массовая доля Re — 25 %. Расчетное значение модуля упругости $E_{111} = 357$ ГПа. В этом варианте в направлениях $\langle 001 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ расчет не проводился.

Рис. 2.23. Структура атомной ячейки с массовой долей Re 25 %

Выводы

Расчетные значения модуля упругости двойного соединения Ni–Re превышают значения модуля упругости ЖНС по следующим причинам.

1. Модуль упругости не рассчитывался для кристаллографических направлений, где имеют место цепочки, состоящие только из атомов Ni. Именно в этих направлениях модуль упругости практически не отличается от значений, соответствующих ЖНС.

2. С увеличением массовой доли Re модуль упругости соединения Ni–Re возрастает. При этом в расчетах массовая доля Re превышает 25 % (25; 31; 51 %).

3. Период кристаллической решетки принят постоянным для всех вариантов расчета и равным $a_0 = 3,582 \cdot 10^{-10}$ м для Ni–Re с массовой долей Re 0,1412 [87], т.к. для других массовых долей период кристаллической решетки неизвестен. При этом необходимо иметь в виду, что с уменьшением a_0 модуль упругости возрастает.

2.2.8. Теплоемкость материалов

В работах В.С. Ивановой, Г.Н. Третьяченко и Б.С. Карпиноса показано, что при числе циклов N_k , по достижении которого при напряжении, равном пределу выносливости, начинают возникать субмикроскопические трещины:

$$N_k = c_p T_{пл} E \rho \frac{1}{\beta^2},$$

где β — коэффициент, учитывающий напряжения; c_p — удельная теплоемкость; $T_{пл}$ — температура плавления.

«Формула свидетельствует о том, что долговечность материала зависит от теплофизических свойств c_p и $T_{пл}$. Результаты экспериментов хорошо это подтверждают» [88].

В связи с этим возникает потребность расчетного определения теплоемкости материала.

Расчетная модель теплоемкости материалов основана на следующих допущениях.

Допущения

1. В основе расчета удельной теплоемкости материалов лежит вихревая модель атома. То есть материальной основой (физической сущностью) атома является «темная материя», обладающая свойствами жидкости (газа). Поэтому применимы законы механики жидкостей и газов.

2. Для расчета используется уравнение Майера и уравнение состояния для идеального газа Клапейрона — Менделеева.

Тогда теплоемкость при постоянном давлении c_p определяется как

$$c_p = c_v + R = c_v + p dV_m / dT,$$

где c_v — теплоемкость при постоянном объеме; R — молярная газовая постоянная; p — давление; dV_m — изменение молярного объема; dT — изменение температуры.

В соответствии с законом Дюлонга и Пти для монокристаллов твердых тел $c_v = 3R$ [24]. Учитывая, что постоянная Больцмана

$$k = R/N_A,$$

где N_A — число Авогадро, можно записать $R = k \cdot N_A$.

Тогда теплоемкость при постоянном давлении одного атома

$$c_v^1 = \frac{c_v}{N_A} = \frac{3R}{N_A} = 3k$$

или

$$c_p^1 = 3k + \frac{pdV_m}{dT}.$$

Таким образом, последнее выражение позволяет определять зависимость теплоемкости (при постоянном давлении) от температуры.

2.2.9. Предел текучести жаропрочных сплавов

В п. 1.5 показано, что **предел текучести при растяжении** монокристалла рассчитывается по теоретической формуле, основанной на механизме перемещения краевой дислокации и электростатической природе межатомного взаимодействия $\tau = c/(x/a_0)^2$. Нормальная и тангенциальная проекции напряжения сдвига бездефектного монокристалла связаны известной формулой $\sigma = \tau/(\cos \alpha \cdot \cos \beta)$.

Расчетная модель предела текучести для бездефектных монокристаллов является основой для *полуэмпирического* расчета предела текучести жаропрочных сплавов при высоких температурах. Для этого необходимо иметь ограниченный объем экспериментальных данных для рассматриваемого сплава.

Допущения

1. Температурная зависимость предела текучести основана на зависимости периода кристаллической решетки от температуры.

2. При высоких температурах предел текучести зависит от теплоемкости материала C_p . В частности, в работе [88] показано, что предел текучести зависит от теплоемкости материала при теплосменах.

3. Теоретическая зависимость предела текучести монокристалла (основы сплава) сравнивается с экспериментальной зависимостью для технического металла и совмещается с ней. Для жаропрочных сплавов поступают аналогично.

Расчетные формулы приведены в п. 1.5.

В качестве примера на рис. 2.24 приведена температурная зависимость предела текучести никеля поликристаллического. Точками обозначены экспериментальные (справочные) данные, полученные другими авторами [32, 89, 90], а результаты расчета — сплошными линиями.

На рис. 2.25–2.28 приведены результаты расчета для некоторых сплавов.

Рис. 2.24. Зависимость предела текучести Ni от температуры:
.... – эксперимент [32], ____ – результаты расчета

Рис. 2.25. Зависимость предела текучести ЖС6К от температуры:
.... – эксперимент [89], ____ – результаты расчета

Рис. 2.26. Зависимость предела текучести ЖС6Ф от температуры:
.... – эксперимент [89], ____ – результаты расчета

Рис. 2.27. Зависимость предела текучести ВКНА-4 от температуры:

.... – эксперимент [90], ____ – результаты расчета

Рис. 2.28. Зависимость предела текучести ВКНА-1В от температуры:

.... – эксперимент [90], ____ – результаты расчета

Как видно из графиков, модель хорошо согласуется с результатами эксперимента для кристаллической решетки никеля (рис. 2.24). Для жаропрочных сплавов модель позволяет прогнозировать предел текучести при *высоких температурах* (рис. 2.25–2.28), когда идет процесс растворения фаз. В этих условиях предел текучести определяется свойствами кристаллической решетки основы сплава.

2.3. Силы внутриатомного взаимодействия

2.3.1. Допущения модели внутриатомного взаимодействия

Центростремительная сила (ускорение), вызванная совместным орбитальным и вращательным движением объекта (в частности, Земли), является физической сущностью гравитации. Причем при изменении направления вращательного движения возникает антигравитация.

Центростремительная сила (ускорение) вихревого движения темной материи определяет природу электрического заряда.

В частности, атом моделируется в виде вихря «жидкости» из темной материи, которая, в свою очередь, состоит из *темного нейтрино* (рис. 2.19). Под действием центростремительного ускорения (возникающего в результате совместного орбитального и вращательного движения) «жидкость» из темной материи стремится собраться в центре вращения.

Поэтому в центре вращения плотность вещества выше, чем на периферии вихря — это и есть ядро атома (протон в случае атома водорода). Электрон — это оставшаяся часть вихря без плотной центральной части. Такое деление условно, т.к. атом — единое целое. Вихревая модель атома *согласуется* с моделью *квантовой механики*, в соответствии с которой электрон «размазан» в атоме и присутствует во всех точках орбиты одновременно.

Вихревая модель ядра атома определяется следующими **допущениями**.

1. Ядро атома есть вихрь темной материи. Вихрь темной материи есть совокупность вращающихся частиц темной материи — темных нейтрино.

2. Каждая частица движется по орбите, одновременно вращаясь вокруг собственной оси. Вихревое ядро состоит из n -го количества малых вихрей, являющихся частью ядра.

В соответствии с законом сохранения сумма моментов количества движения каждого вихря равна моменту количества движения вихревого ядра

$$L_{\text{ядра}} = \sum m_i \cdot v_i \cdot r_i = \text{const.}$$

Это допущение согласуется с положениями механики жидкости и газа и аналогично с соответствующим пунктом допущений для атома.

3. Момент количества движения ядра равен моменту количества движения электронной оболочки

$$h_{\text{ядра}} = h_{\text{оболочки}}.$$

4. Вихрь моделируется механической моделью. При этом соблюдаются законы сохранения энергии и момента количества движения.

5. В основе модели лежит положение об одинаковой природе гравитации и электрического заряда.

6. Излучение энергии и ее поглощение определяются соотношением между центростремительной F_c и центробежной $F_{\text{ц}}$ силами, возникающими в ядре. Так, для радиоактивных ядер $F_{\text{цб}} > F_c$. Этим неравенством объясняется распад ядра (характеризуемый периодом полураспада ядра), а также туннельный эффект.

«Данные по магнитному и квадрупольному моментам дейтона указывают на то, что в его волновой функции обязательно должна присутствовать компонента с $L = 2$.

Наличие такой компоненты трудно понять, если между протоном и нейтроном действуют только центральные силы притяжения. В этом случае частицы стремились бы находиться как можно ближе друг к другу. Волновая функция достигала бы максимума при $|r_p - r_n| = 0$, т.е. вероятность того, что протон и нейтрон находятся в одной точке, была бы максимальна. Чтобы к этому состоянию дейтона имела

примесь с $L = 2$, необходимо действие сил между частицами, понижающих энергию этого состояния. Эти силы должны действовать в том случае, если частицы начинают принимать участие в относительном движении. При этом максимум вероятности в пространственном распределении нуклонов уже приходится на некоторое расстояние $|r_p - r_n| \neq 0$.

Подобные нецентральные силы получили название тензорных» [91].

7. Понятие нуклон — условное, так как это вихрь внутри вихревого ядра.

«В отличие от ядер у нуклонов не наблюдается дифракционной картины (максимумов и минимумов), определяющей резкую границу» [92].

2.3.2. Расчетные формулы

Вихревая модель используется для объектов с наноразмерами — атомов, элементарных частиц, а также для ядра атома с фемторазмерами.

В случае ядра дополнительные допущения в модели аналогичны дополнительным допущениям в модели атома (п. 2.2.1).

При моделировании используются законы сохранения и единые формулы расчета:

$$F_c = ma_c; F_q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}; F_g = G \frac{mM}{r^2}; G = \frac{xV_{cp}}{M}.$$

2.3.3. Сравнительный анализ результатов расчета со справочными данными

Подтверждением адекватности модели (а также единства физических законов в природе) является примерное равенство сил $F_1 \approx F_2 \approx F_3$ или $F_{uc} \approx F_{кул} \approx F_g$ в приведенных ниже примерах. А также сравнение потенциального барьера с энергией первого возбужденного состояния ядра, $\Pi_{уд}$ и расчетных радиусов ядра со справочными значениями.

Ядро урана, $^{238}_{92}\text{U}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{uc} \approx F_{кул} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.18.

Таблица 2.18

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$10,56 \cdot 10^{-15}$	$7,43 \cdot 10^{-15} \dots 10,53 \cdot 10^{-15}$	— 0,2
Радиус нуклона	м	$1,0 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	25
Центростремительная сила F_{uc}	Н	57,9	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	57,8	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	57,9	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	65,6	—	—
Удельный потенциальный барьер, $\Pi_{уд}$	эВ	$-1,02 \cdot 10^6$	—	—
Удельная кинетическая энергия частицы, $K_{уд}$	эВ	$1,0 \cdot 10^6$	—	—
Кинетическая энергия α -частицы, K_α	эВ	$4,0 \cdot 10^6$	$4 \cdot 10^6 \dots 8,8 \cdot 10^6 [70]$	0... —

Примечания: отрицательное значение потенциального барьера означает, что в ядре центробежная сила больше центростремительной силы. Иначе говоря, имеет место излучение, т.е. радиоактивность.

Вывод

Удельная энергия связи (на один нуклон) для урана-238 составляет 7,6 МэВ. Но т.к. $F_{цб} > F_{цс}$, α -частица с энергией 4,00 МэВ, состоящая из четырех нуклонов, излучается из ядра.

Ядро трития, ${}^3_1\text{H}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{цс} \approx F_{кул} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.19.

Таблица 2.19

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$0,80 \cdot 10^{-15}$	$1,23 \cdot 10^{-15}$	–34,9
Радиус нуклона	м	$0,45 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	–43,7
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	284,3	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	282,9	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	284,3	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	286,2	—	—
Удельный потенциальный барьер, $P_{уд}$	эВ	$-18,5 \cdot 10^3$	—	—
Удельная кинетическая энергия частицы, $K_{уд}$	эВ	$18,5 \cdot 10^3$	—	—
Кинетическая энергия β -частицы, K_{β}	эВ	$18,5 \cdot 10^3$	$18,6 \cdot 10^3$ [39]	0,5

Примечания. Отрицательное значение потенциального барьера означает, что центробежная сила в ядре трития больше центростремительной силы. Иначе говоря, имеет место излучение, т.е. радиоактивность. β -частица с энергией 0,185 МэВ, излучается из ядра, т.к. $F_{цб} > F_{цс}$.

Ядро дейтерия, ${}^2_1\text{H}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{цс} \approx F_{кул} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.20.

Таблица 2.20

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$1,26 \cdot 10^{-15}$	$(1,01...2,1) \cdot 10^{-15}$	—
Радиус нуклона	м	$0,49 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	–38,7
Центростремительная сила $F_{цс}$	Н	69,9	—	—
Кулоновская сила $F_{кул}$	Н	69,3	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	69,9	—	—
Центробежная сила $F_{цб}$	Н	51,8	—	—
Удельный потенциальный барьер, $P_{уд}$	эВ	$0,286 \cdot 10^6$	—	—
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{уд}$	эВ		нет	

Поскольку центростремительная сила в ядре дейтерия больше центробежной, то удельный (на один нуклон) потенциальный барьер имеет положительное значение. Иначе говоря, излучение отсутствует.

Ядро лития, ${}^7\text{Li}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{цс}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.21.

Таблица 2.21

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$1,42 \cdot 10^{-15}$	$1,79 \cdot 10^{-15}$	–20,6
Радиус нуклона	м	$0,43 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	–46,2
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	318,7	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	318,3	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	318,7	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	291,7	—	—
Удельный потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$0,476 \cdot 10^6$		0,6
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$0,479 \cdot 10^6$ [39]	

Центростремительная сила в ядре Li больше центробежной силы, имеется потенциальный барьер, излучение отсутствует.

Ядро натрия, ${}^{23}_{11}\text{Na}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{цс}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.22.

Таблица 2.22

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$1,98 \cdot 10^{-15}$	$3,18 \cdot 10^{-15}$	–50,5
Радиус нуклона	м	$1,81 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	126
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	337,3	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	338,5	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	337,3	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	319,6	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$0,437 \cdot 10^6$		0,04
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$0,440 \cdot 10^6$ [39]	

Центростремительная сила в ядре Na больше центробежной силы, имеется потенциальный барьер.

Ядро меди, $^{63}_{29}\text{Cu}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{ис}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.23.

Таблица 2.23

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$5,20 \cdot 10^{-15}$	$(4,77 \dots 6,76) \cdot 10^{-15}$	—
Радиус нуклона	м	$1,21 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	51,2
Центростремительная сила $F_{\text{ис}}$	Н	135,2	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	134,1	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	135,2	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	125,0	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$0,665 \cdot 10^6$		
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$0,668 \cdot 10^6$ [39]	0,4

Центростремительная сила в ядре Si больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер.

Ядро алюминия, $^{27}_{13}\text{Al}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{ис}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.24.

Таблица 2.24

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$2,34 \cdot 10^{-15}$	$3,10 \cdot 10^{-15}$	—21
Радиус нуклона	м	$1,29 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	61,2
Центростремительная сила $F_{\text{ис}}$	Н	285,3	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	284,3	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	285,3	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	256,9	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$0,831 \cdot 10^6$		
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$			$0,842 \cdot 10^6$ [39]	1,31

Центростремительная сила в ядре Al больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер.

Ядро никеля, $^{58}_{28}\text{Ni}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{ис}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.25.

Таблица 2.25

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$4,78 \cdot 10^{-15}$	$(4,66 \dots 6,60) \cdot 10^{-15}$	—
Радиус нуклона	м	$1,25 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	56,2
Центростремительная сила $F_{\text{ис}}$	Н	148,1	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	148,1	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	148,1	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	124,1	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$1,43 \cdot 10^6$		1,3
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$1,45 \cdot 10^6$ [39]	

Центростремительная сила в ядре Ni больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер.

Ядро железа, $^{56}_{26}\text{Fe}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{ис}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.26.

Таблица 2.26

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$4,57 \cdot 10^{-15}$	$4,59 \cdot 10^{-15}$	—0,4
Радиус нуклона	м	$1,20 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	50,0
Центростремительная сила $F_{\text{ис}}$	Н	154,3	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	154,7	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	154,3	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	139,4	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$0,847 \cdot 10^6$		
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$0,845 \cdot 10^6$ [39]	0,2

Центростремительная сила в ядре Fe больше центробежной силы, имеется потенциальный барьер.

Ядро ванадия, $^{51}_{23}\text{V}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{цс}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.27.

Таблица 2.27

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$4,23 \cdot 10^{-15}$	$4,45 \cdot 10^{-15}$	–4,9
Радиус нуклона	м	$1,08 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	35,0
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	154,3	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	154,7	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	154,3	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	139,4	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$0,321 \cdot 10^6$		
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$0,323 \cdot 10^6$ [39]	0,2

Центростремительная сила в ядре V больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер.

Ядро хрома, $^{52}_{24}\text{Cr}$

Результаты расчета получены при условии, что $F_{\text{цс}} \approx F_{\text{кул}} \approx F_g$ и сведены в табл. 2.28.

Таблица 2.28

Наименование параметра	Размерность	Величина параметра		
		расчетная	справочная	расхождение, %
Радиус ядра	м	$4,26 \cdot 10^{-15}$	$4,47 \cdot 10^{-15}$	–4,6
Радиус нуклона	м	$1,08 \cdot 10^{-15}$	$0,8 \cdot 10^{-15}$	35,0
Центростремительная сила $F_{\text{цс}}$	Н	165,9	—	—
Кулоновская сила $F_{\text{кул}}$	Н	165,6	—	—
Сила гравитации, F_g	Н	165,9	—	—
Центробежная сила $F_{\text{цб}}$	Н	138,8	—	—
Потенциальный барьер, $P_{\text{уд}}$	эВ	$1,44 \cdot 10^6$		
Энергия первого возбужденного состояния, $P_{\text{уд}}$	эВ		$1,46 \cdot 10^6$ [39]	1,4

Центростремительная сила в ядре Cr больше центробежной силы, т.е. имеется потенциальный барьер.

Заключение

1. Центростремительное ускорение объекта, совершающего совместное орбитальное и вращательное движение, определяется по формуле (2.19)

$$a_c = \frac{V_{\text{ср}}^2}{2D}.$$

2. Центробежное ускорение этого же объекта определяется по формуле

$$a_{\text{ц}} = \omega^2 r.$$

3. Часть физических явлений объясняется соотношением между центробежной и центростремительной силами. В частности, процессы излучения и поглощения энергии в атоме и его ядре, а также гироскопический эффект и самоцентрирование ротора при $\omega > \omega_{\text{кр}}$.

4. Результаты сравнительного анализа, приведенные в табл. 2.18–2.28 подтверждают адекватность модели.

---

3. ЕДИНСТВО ФИЗИЧЕСКИХ ЗАКОНОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МАКРОТЕЛ И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

3.1. От четырех к одному. Сокращение числа экспериментов

Разработанная модель позволяет на основе ограниченного объема экспериментальных данных рассчитывать упругие, прочностные, теплофизические и физические характеристики монокристаллических материалов.

В частности, имея экспериментальные данные изменения модуля упругости металлов и двойных соединений в зависимости от температуры в поликристаллическом состоянии, определяется эта же зависимость для монокристаллических направлений $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$.

В частности, для никеля сравнение теоретической температурной зависимости модуля упругости в поликристаллическом состоянии приведено на рис. 1.8.

Удовлетворительная сходимость результатов расчета (рис. 1.8) и экспериментов, проведенных другими авторами, позволяет моделировать температурную зависимость для монокристаллического состояния никеля (рис. 1.7).

Другой пример. Для двойного соединения NbC известна экспериментальная зависимость, приведенная на рис. 1.15. Удовлетворительная сходимость результатов расчета (рис. 1.15) и экспериментов, проведенных другими авторами, для поликристалла позволяет моделировать температурную зависимость для монокристаллического состояния карбида ниобия (рис. 1.14).

Таким образом, моделирование позволяет проводить один из четырех экспериментов. Остальные зависимости получаются в результате расчета.

3.2. Обобщение аналогий. Единая модель материи

Расчетная оценка четырех фундаментальных взаимодействий основана на следующих физических законах:

- второй закон Ньютона;
- закон всемирного тяготения;
- закон Кулона,
- а также законах сохранения.

В соответствии с разработанной моделью силы взаимодействия, определенные по этим трем законам, имеют одинаковую природу — совместное вращательное и орбитальное движение частиц темной материи (автор условно называет их «темными нейтрино»).

Единство физических законов подтверждается примерным равенством названных сил взаимодействия $F_{\text{ис}} \approx F_{\text{Кул}} \approx F_g$, в частности, для внутри-, межатомного (см. пп. 2.3, 2.2).

На примере движения Земли вокруг Солнца и Луны вокруг Земли решена задача оценки сил взаимодействия этих макротел. Удовлетворительная сходимость результатов расчета со справочными данными подтверждают адекватность модели гравитационного взаимодействия (см. п. 2.1).

Расчетная оценка уровня энергии атома в возбужденном состоянии и сравнение его со справочным спектром атома имеет удовлетворительную сходимость (см. п. 2.2.3), что является примером **слабого** взаимодействия элементарных частиц – электрона.

Расчет **электромагнитного** взаимодействия, в частности, электростатического проведен на примере силы химической связи и сравнении ее с упругими характеристиками материала (см. п. 2.2).

Рис. 3.1. Единая модель материи:
а – ядро, б – атом, в – монокристалл; г – Солнечная система и галактика

Расчет энергии ядра в первом возбужденном состоянии и сравнение ее со справочными данными подтверждает адекватность модели сильного (ядерного) взаимодействия (см. п. 2.1).

На рис. 3.1 представлена схема единой модели материи. Темная материя, заполняющая пространство, называемое вакуумом — основа светлой материи. Темная материя состоит из темных нейтрино-основного элемента всей материи. В результате вихревого движения, то есть совместного орбитального и вращательного движения темных нейтрино, возникает центростремительное ускорение и соответственно центростремительная сила. Это приводит к концентрации материи в центре вращения и образованию ядра. Таким образом, формируется ядро с оболочкой, состоящей из светлой материи в следующих вариантах:

- атом с ядром в центре (рис. 3.1, б);
- собственно ядро атома (рис. 3.1, а);
- кристаллическая решетка (рис. 3.1, в) и другие виды химической связи;
- Солнечная система, галактика и Вселенная (рис. 3.1, г).

Модели атома и ядра аналогичны модели галактики. В центре находится ядро. Ядро окружает сферическая оболочка — электронное облако. Строение оболочки неравномерное. Наиболее плотная часть является спиралевидным диском (рис. 3.1, г). Энергетические уровни атома определяются наличием спиралей в структуре материи внутри атома. Наличие спиралей связано с распространением волн сжатия внутри атома (по аналогии со спиралью в галактиках).

Плотность электронной оболочки с уменьшением радиуса (с приближением к центру вращения) возрастает и достигает плотности ядра атома. На рис. 3.2 в качестве примера, приведено расчетное изменение электронной плотности меди в зависимости от радиуса.

Рис. 3.2. Фрагмент зависимости электронной плотности меди в зависимости от радиуса

Результаты расчета плотности соответствуют справочным значениям. В частности, расчетная плотность ядра атома составляет порядка 10^{-17} кг/м^3 .

Известно, что химическая связь, определяющая разнообразие веществ в природе, образуется вследствие перекрытия электронных оболочек атомов (рис. 3.1, в). Разработанная модель не противоречит данному положению, но при этом химическая связь двух атомов представляется как взаимодействие двух вихрей. Это позволяет рассчитать силу химической связи для различных элементов в таблице Д.И. Менделеева (см. п. 2.2.6).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Вихревое (совместное орбитальное и вращательное) движение темной материи является причиной возникновения центростремительной силы, которая является физической сущностью гравитации.

Масса, сосредоточенная в центре вращения, не является причиной притяжения (гравитации), масса есть результат действия центростремительной силы (центростремительного ускорения). В частности, Солнце образовалось в результате концентрации материи в центре вращения Солнечной системы под действием центростремительной силы (центростремительного ускорения). Не Солнце притягивает Землю и другие планеты, а Солнце возникло в результате действия центростремительного ускорения движущейся материи. Аналогично образуются и другие системы: от элементарных частиц и атомов до галактик и Вселенной.

2. Причиной возникновения антигравитации является изменение соотношения между центростремительной $F_{цс}$ и центробежной $F_{цб}$ силами.

Превышение центробежной силы над центростремительной во вращательном движении

$$F_{ц} > F_{с}.$$

Например, общепринято, что Вселенная расширяется. Это обстоятельство объясняется превышением центробежной силы над центростремительной в совместном орбитальном и вращательном движении темной материи, из которой состоит вся материя Вселенной.

Искусственное изменение направления вращательного движения в совместном орбитальном и вращательном движении объекта также приводит к изменению соотношения между центростремительной и центробежной силами. При этом орбитальная скорость должна превысить некоторую критическую скорость, при которой

$$F_{ц} = F_{с}.$$

Отсюда следует, в частности, что для получения антигравитации необходимо изменить направление вращательной составляющей скорости движения тела.

3. Одним из частных случаев реализации предлагаемой модели, применительно к ГТД, является использование ориентации ротора двигателя и летательного аппарата с целью снижения внешних нагрузок.

Например, можно расположить самолет вертикального взлета и посадки в соответствии с направлением векторов скоростей $V_{орб}$, $V_{вр}$ так, чтобы центростремительное ускорение, возникающее вследствие вращения ротора ГТД, было направлено в противоположную сторону вектору ускорения силы тяжести. При этом положим, что линейная скорость вращения на контуре ротора 500 м/с, а масса ротора $m_1 = 300$ кг. Для двигателя с приведенными характеристиками вращения ротора величина силы F_c составляет порядка нескольких десятков ньютонов H , т.е. пренебрежительно мала.

Однако при создании специально спроектированного устройства можно значительно увеличить величину силы F_c и подъемной силы летательного аппарата нового типа.

4. Единая модель позволяет объяснить физическую сущность опыта Г. Кавендиша: два тела под действием силы тяжести сближаются друг с другом вследствие горизонтальной составляющей центростремительной силы тяжести. При этом отношение горизонтальной проекции силы тяжести к силе тяжести пробного тела F_t/F_g численно равно величине гравитационной постоянной.

5. Следствие модели является объяснение физической сущности некоторых механических явлений в дополнение к математическому обоснованию.

5.1. Разработанная модель позволяет объяснить физическую сущность гироскопического эффекта. Вследствие совместного переносного и относительного (орбитального и вращательного) движения ротора возникает центростремительная сила, которая обеспечивает устойчивость гироскопа к внешним воздействиям. В частности, не дает ему упасть под действием силы тяжести mg .

5.2. При превышении угловой скорости вращения ротора некоторой критической величины $\omega_{кр}$ возникает явление самоцентрирования. Математическое объяснение самоцентрирования заключается в том, что прогиб вала ротора принимает отрицательные значения. В соответствии с разработанной моделью физическая сущность самоцентрирования заключается в том, что при $\omega > \omega_{кр}$ изменяется соотношение между центробежной и центростремительными силами $F_c > F_{цб}$, что приводит к самоцентрированию вращающегося ротора.

6. Электростатическое и гравитационное взаимодействия имеют одинаковую природу. Различие состоит в величинах скоростей и гравитационной «постоянной». Дополнительным косвенным подтверждением этого является аналогия законов Кулона и Всемирного тяготения, а также аналогия опытов Кулона и Кавендиша.

Изменение направления вращения атомов-вихрей, в частности в кристаллах, под действием внешнего электромагнитного воздействия и передача этого момента количества движения (импульса) соседним атомам-вихрям определяет физическую сущность электрического тока в проводниках.

7. Физическая сущность приливов и отливов в океанах и морях объясняется наличием эксцентриситета вращения Земли относительно центра масс системы Земля–Луна с радиусом примерно $r_3 \approx 4700$ км (рис. А) [72].

Вследствие этого Земля совершает колебания относительно центра масс вращения системы Земля–Луна. Колебательные движения приводят к периодическому смещению воды на поверхности планеты под действием силы инерции. Подобно тому, как в результате поступательного движения сосуда с водой жидкость в емкости собирается на задней стенке вследствие силы инерции (рис. Б).

8. Изменение траектории движения комет и других небесных тел вблизи массивных тел (Солнце, Юпитер и др.) вызвано вовлечением в вихрь темной материи, окружающей данное массивное тело. Центростремительная сила вихря смещает траекторию небесного тела.

Аналогично объясняется такое наблюдение как «гравитационные линзы» (рис. В), а также модель искривленного пространства по Эйнштейну.

Рис. А. Эксцентриситет вращения Земли [72]

Рис. Б. Схема смещения жидкости при движении тела:
1 – неподвижное тело; 2 – подвижное тело

Рис. В. Схема гравитационной линзы

В настоящее время искривление пространства подтверждается искривлением луча света под действием гравитации, т.е. фактически речь идет о траектории движения луча света.

Полагая, что луч света — это распространение колебаний «темных нейтрино», можно заключить следующее.

Электромагнитное колебание распространяется в среде темной материи. Этот импульс, проходя через плотный вихрь темной материи, окружающий небесное образование (планету, звезду, «черную дыру» и т.п.), вовлекается центростремительной силой во вращательное движение и тем самым изменяет траекторию движения (рис. Г).

Аналогично для элементарных частиц: изменение их траектории движения связано с перемещением частицы от одного вихря заряда к другому (рис. Г).

Рис. Г. Схема траектории частицы между зарядами

9. *Темная материя* везде и всюду и то, что называется вакуумом, и есть темная материя, из которой образуется *светлая материя*. Это положение не противоречит существующим моделям, в частности, квантовая механика позволяет частицам появляться и исчезать в вакууме. Другим примером, подтверждающим это следствие, является эксперимент в ЦЕРНе: при разгоне протона в коллайдере его масса-энергия возрастает от 2...3 ГэВ до 4000 ГэВ, образно говоря, из «сливы» вырастает «арбуз».

10. *Темная энергия* — часть темной материи, в которой центробежная сила вихревого движения превышает центростремительную

$$F_{\text{цб}} > F_{\text{цс}}.$$

Это положение также не противоречит существующим моделям, т.к. силу, которая заставляет Вселенную расширяться, назвали темной энергией.

11. Движение *темной материи* — источник энергии *светлой материи*. В частности, вращение атомов поддерживается движением окружающей его движущейся *темной материи*. При этом осцилляция атомов вызвана наличием эксцентриситета центра масс относительно оси вращения.

12. Электромагнитные волны — это колебания частиц темной материи (*темных нейтрино*). Скорость распространения колебаний *темных нейтрино* равна скорости света.

13. Магнитное поле есть вихрь темной материи повышенной плотности вокруг рассматриваемого объекта, в частности Земли. Плотные слои вихря темной материи — магнитосфера Земли — препятствует проникновению через нее частиц или

колебательных импульсов различных уровней энергии. Тем самым обеспечивается защита поверхности Земли от космического излучения.

Причем плотность темной материи по радиусу определяется по тем же формулам, что и электронная плотность атома (см. п. 2.2.4).

14. На основе электростатической модели межатомного взаимодействия выведены системы расчетных зависимостей упругих, прочностных и теплофизических характеристик материалов: модуль упругости с учетом анизотропии; коэффициент Пуассона; предел упругости, предел текучести с учетом анизотропии; коэффициент теплопроводности; коэффициент теплового расширения; модуль упругости и коэффициент теплового расширения в зависимости от температуры; плотность. Это позволило заложить основу для *конструирования* материалов.

Полученные результаты являются начальным этапом оценки напряженно-деформированного состояния элементов конструкций, в частности, рабочей лопатки турбины. Исходные расчетные данные формируются в условиях существенного сокращения дорогостоящих экспериментов, что значительно снижает экономические и временные затраты в процессе проектирования, в частности, лопаток газовых турбин.

На основе вихревой модели межатомного взаимодействия получены результаты расчета модуля упругости для двойных соединений, которые невозможно обоснованно получить по электростатической модели. Кроме того, вихревая модель атома позволила полуэмпирически определить предел текучести для жаропрочных сплавов в области высоких температур, когда начинается процесс растворения фаз.

Таким образом, разработанная вихревая модель раскрывает физическую сущность существующих моделей явлений, дополняя их расчетами, но не отрицая их работоспособность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бадамшин И. Х. Способ определения коэффициента линейного теплового расширения: пат. 2271534 РФ, МКИ6 G 01 M 25/00. Заявл. 01.11.2004; Оpubл. 10.03.2006, Бюл. № 7.
2. Савицкий Е. М. Бурханов Г. С. Монокристаллы тугоплавких и редких металлов и сплавов. М.: Наука, 1972. 257 с.
3. Бадамшин И. Х. Способ определения модуля упругости: пат. 2226266 РФ, МПК7 G 01 № 3/00; Заявл. 06.05.2002; Оpubл. 27.03.2004, Бюл. № 9.
4. Бадамшин И. Х. Моделирование упругих характеристик нанокompозитов и нанотрубок // Композиты и наноструктуры. 2011. № 1. С. 18–23.
5. Бадамшин И. Х. Формула расчета модуля упругости // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2005. № 1. С. 50–52.
6. Бадамшин И. Х. Расчет модуля упругости монокристаллов тугоплавких металлов и их карбидов // Изв. вузов. Сер. Авиационная техника. 2006. № 3.
7. Свойства элементов. В 2 ч. Ч. 1. Физические свойства: справочник. М.: Металлургия, 1976. 600 с.
8. Химушин Ф. Ф. Жаропрочные стали и сплавы. М.: Металлургия, 1964. 672 с.
9. Бадамшин И. Х. Расчет модуля упругости поликристаллов // Вестник УГАТУ. Уфа, 2007. Т. 9, № 1(19). С. 180–181.
10. Бадамшин И. Х. Способ определения модуля упругости поликристаллических материалов: пат. 2277703 РФ, МКИ6 G 01 N 3/00; Заявл. 09.07.2004; Оpubл. 10.01.2006, Бюл. № 16.
11. Андриевский Р. А., Ланин А. Г., Рымашевский Г. А. Прочность тугоплавких соединений. М.: Металлургия, 1974. 232 с.
12. Самсонов Г.В. Эпик А. П. Тугоплавкие покрытия. М.: Металлургия, 1973. 400 с.
13. Каблов Е. Н. Ломберг Б. С., Бунтушкин В. П., Голубовский Е. Р., Мубояджан С.А. Сплав на основе интерметаллида Ni_3Al – перспективный материал для лопаток турбин // Металловедение и термическая обработка. 2002. № 7. С. 16–19.
14. Ножницкий Ю. А., Голубовский Е. Р. Обеспечение прочностной надежности монокристаллических рабочих лопаток высокотемпературных турбин перспективных ГТД // Научные идеи С. Т. Кишкина и современное материаловедение: тр. Международ. науч.-техн. конф. М.: ВИАМ, 2006. 378 с.
15. Гецов Л. Б. Материалы и прочность деталей газовых турбин. Л.: Машиностроение, 1996. 450 с.

-
16. Бадамшин И. Х. Моделирование свойств конструируемых жаропрочных сплавов для газовых турбин // Вестник РГТУ им. П.А. Соловьева. Рыбинск, 2015. № 2(33). С. 33–39.
17. Бадамшин И. Х. Результаты моделирования упругих свойств наноструктур на основе углерода и кремния // Нанотехнологии функциональных материалов: тр. Междунар. науч.-техн. конф. 24–28 июня 2014г. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. 460 с.
18. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы 21 века. М. Техносфера, 2003. 336 с.
19. <http://www.nkj.ru/news/20641/>
20. Бережкова Г. В. Нитевидные кристаллы. М.: Наука, 1969. 160 с.
21. Светлов И. Л. Машина для механических испытаний нитевидных кристаллов (усов) // Заводская лаборатория. 1964. № 9. С.1133–1136.
22. Гольдштейн М.И., Литвинов В.С., Бронфин Б.М. Металлофизика высокопрочных сплавов. М.: Металлургия, 1986. 312 с.
23. Келли А. Высокопрочные материалы / пер. с англ. М.: Мир, 1976. 216 с.
24. Киттель Ч. Элементарная физика твердого тела. М.: Наука, 1965. 368 с.
25. Котрелл А. Прочность материалов // Механические свойства новых материалов. М.: Мир, 1966. С.7–20.
26. Пат. № 2339931 РФ, МКИ⁶ G 01 N 3/00 Способ определения предела упругости монокристаллов / Бадамшин И.Х.; заявитель и патентообладатель ГОУ ВПО УГАТУ; заявка № 2007110288; заявл. 20.03.2007г; опубл. 27.11.2008г, Бюл. № 33. 4 с.
27. Бадамшин И. Х. Расчет предела упругости бездефектных монокристаллов в составе эвтектических композитов // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. 2011. № 4. С. 39–44.
28. Бокштейн С.З., Кишкин С.Т., Назарова М.П., Светлов И.Л. Особенности упрочнения металлических и неметаллических нитевидных кристаллов // Процессы диффузии, дефекты структуры и свойства металлов. Под ред. А.Т. Туманова. М.: Металлургия, 1972. С. 222–225.
29. Бадамшин И. Х. Способ определения коэффициента Пуассона монокристаллов: пат. 2289114 РФ, МКИ⁶ G 01 N 3/00; Заявл. 22.04.2005; Опубл. 10.12.2006, Бюл. № 34.
30. Бадамшин И. Х. Расчет коэффициента поперечной деформации (Пуассона) монокристаллов на основе электростатической природы упругости // Вестник УГАТУ. 2008. Т. 10. № 1(26). С. 57–59.
31. Писаренко Г. С., Яковлев А. П., Матвеев В. В. Справочник по сопротивлению материалов. Киев: Наук. Думка, 1988. 736 с.
32. Механические и технологические свойства металлов: справ. изд. / А. В. Бобылев. М.: Металлургия, 1987. 208 с.

-
33. Материаловедение: учебник для вузов / Ю.М. Лахтин, В.П. Леонтьева 3-е изд. М.: Машиностроение, 1990. 528 с.
34. Бадамшин И. Х. Способ определения предела текучести: пат. 2235986 РФ, МПК7 G 01 N 3/00. Заявл. 16.12.2002; Оpubл. 10.09.2004, Бюл. № 25.
35. Бадамшин И. Х. Расчет предела текучести бездефектных монокристаллов // Вестник УГАТУ. 2006. Т 7. № 2(15). С. 154–156.
36. Павлов П. В. Хохлов А. Ф. Физика твердого тела. 3-е изд., стер. М.: Высш. шк., 2000. 494 с.
37. Белоусов А. И., Бадамшин И. Х. Выбирать или конструировать материалы для деталей турбомашин / Разработка, производство и эксплуатация турбо-, электронасосных агрегатов и систем на их основе: тр. VII Междунар. науч.-техн. конф. «СИНТ'15». Воронеж: Изд.-полигр. Центр «Научная книга», 2015. 420 с.
38. Бадамшин, И. Х. Способ определения скорости звука в моно- и поликристаллах: пат. 2354940 РФ, МПК7 G 01 H 5/00. Заявл. 09.10.2007; Оpubл. 10.05.2009, Бюл. № 13.
39. Таблицы физических величин / под ред. акад. И. К. Кикоина: справочник. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
40. Бадамшин И. Х. Способ определения коэффициента теплопроводности твердых тел: пат. 2277235 РФ, МКИ6 G 01 N 25/20. Заявл. 14.02.2005; Оpubл. 27.05.2006, Бюл. № 15.
41. Бадамшин И. Х. Прочность элементов конструкций из эвтектических композиций на основе электростатической природы упругости: автореф. дис. ... д-ра техн. наук. Уфа, 2010.
42. Кир Б. Х. Перспективные металлы // В мире науки. Москва, 1986. № 12. С. 98–108.
43. Новиков И. И., Розин К. М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки: учебник для вузов. М.: Металлургия, 1990. 336 с.
44. Бадамшин И. Х. Способ определения плотности монокристаллов твердых тел: пат. 2289116 РФ, МКИ6 G 01 N 9/00. Заявл. 03.02.2005; Оpubл. 10.07.2006, Бюл. № 34.
45. Пестриков В. М., Морозов Е. М. Механика разрушения твердых тел: курс лекций. СПб: Профессия, 2002. 320 с.
46. Лахтин Ю. М., Леонтьева В. П. Материаловедение: учебник для вузов. 2-е изд. М.: Машиностроение, 1980. 493 с.
47. Партон В. З., Морозов Е. М. Механика упругопластического разрушения. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1985. 504 с.

-
48. Кишкина С. И. Механические свойства // БСЭ. М.: Сов. энциклопедия, 1973. С. 535.
49. Болтон У. Конструкционные материалы, металлы, сплавы, полимеры, керамика, композиты: карманный справочник / пер. с англ. М.: Изд. дом «Додэка-XXI», 2004. 320 с.
50. Третьяченко Г.Н., Кравчук Л.В., Куриат Р.И., Волощенко А.П. Долговечность лопаток газовых турбин при теплосменах в газовом потоке: препринт. Киев. Институт проблем прочности АН УССР. 1981. 87 с.
51. Биргер И. А., Мавлютов Р. Р. Сопротивление материалов: учеб. пособие. М.: Наука, 1986. 560 с.
52. Прочность материалов и элементов конструкций в экстремальных условиях. В 2 т. / под ред. Г. С. Писаренко. Т. 2. Киев. Наукова думка, 1980. 771 с.
53. Каблов Е. Н., Голубовский Е. Р. Жаропрочность никелевых сплавов. М.: Машиностроение, 1998. 464 с.
54. Бадамшин И. Х. Способ определения характеристик пластической деформации при сдвиге: пат. 2267112 РФ, МПК7 G 01 № 3/24. Заявл. 31.05.2004; Оpubл. 27.12.2005, Бюл. № 36.
55. Бадамшин И. Х. Расчет характеристик пластической деформации и ползучести монокристаллов // Полет. 2007. № 5. С. 43–45.
56. Биргер И. А. Остаточные напряжения. М.: Машиностроение. 1963. 232 с.
57. Каблов Е. Н. Литые лопатки ГТД (сплавы, технология, покрытия). М.: МИСИС, 2001. 632 с.
58. Тихомирова Е. А., Сидохин Е. Ф. Зависимость термической усталости жаропрочных сплавов от максимальной температуры нагрева в цикле испытаний // Вестник СГАУ. 2014. № 5(47). С. 82–87.
59. Гецов Л. Б. Материалы и прочность деталей газовых турбин. Л.: Машиностроение, 1973. 296 с.
60. Солнцев Ю. П., Ермаков Б. С., Слепцов О. И. Материалы для низких и криогенных температур: Энциклопедический справочник. СПб.: ХИМИЗДАТ, 2008. 768 с.
61. Диаграммы состояния двойных металлических систем: справочник. В 3 т. Т.1/ под общ. ред. Н. П. Лакишева. М.: Машиностроение, 1996. 992 с.
62. Самсонов Г. В., Дворина Л. А., Рудь Б. М. Силициды. М., Металлургия, 1979.
63. Самсонов Г. В., Портной К. И. Карбиды // БСЭ. М.: Сов. Энциклопедия, 1973. С. 403–404.
64. Каблов Е. Н., Петрушин Н. В. Компьютерный метод конструирования литейных жаропрочных никелевых сплавов // Литейные жаропрочные сплавы. Эффект С. Т. Кишкина: науч.-техн. сб. М.: Наука, 2006. 272 с.

-
65. Моделирование и разработка новых жаропрочных сплавов / А. В. Логунов, Ю. Н. Шмотин, И. А. Лещенко, Р. Ю. Старков // Двигатель. 2013. № 5, ч. 1. С. 24–27.
66. Белоусов А. И. Бадамшин И. Х. Принципы конструирования материалов для лопаток турбин авиационных ГТД // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. Казань, 2014. № 4. С. 20–30.
67. Бадамшин И. Х. От четырех к одному. Силы внутриатомного взаимодействия и прочность материалов. М.: Изд. дом Академии естествознания, 2014. 90 с.
68. Светлов И. Л. Высокотемпературные Nb-Si композиты – замена монокристаллическим никелевым жаропрочным сплавам // Двигатель. 2010. № 5. С. 36–37.
69. Белоусов А. И., Бадамшин И. Х. Концептуальные подходы к конструированию материалов для лопаток турбин авиационных ГТД // Изв. вузов. Авиационная техника. 2015. № 3. С. 73–79.
70. Трофимова Т. И. Курс физики: учеб. пособие для вузов. 7-е изд., стер. М.: Высш. шк., 2003. 542с.
71. Аллен К. У. Астрофизические величины / пер. с англ. Х. Ф. Халиуллина. М.: Мир. 1977. 460 с.
72. Кикоин И. К., Кикоин А. К. Физика. М.: Просвещение. 1998. 191 с.
73. Тарг С. М. Краткий курс теоретической механики. М.: Высш.шк., 1986. 240 с. (с. 329)
74. Иродов И.Е. Основные законы механики. М.: Высш.шк., 1997. 240 с. (с. 84)
75. Голубева О.В. Теоретическая механика. М.: Высш.шк., 1968. 240 с. (с. 57)
76. Кошкин Н. И. Ширкевич М. Г. Справочник по элементарной физике. М.: Наука, 1982. С. 73.
77. Бадамшин И. Х. Моделирование сил, действующих на газотурбинный двигатель // Вестник УГАТУ. Уфа, 2011. Т. 15, № 3. С. 28–32.
78. Бадамшин И. Х. Влияние эволюций летательного аппарата на усилия, действующие в ГТД // Фундаментальные исследования. 2013, № 6 (2). С. 257–262.
79. http://www.mediagnosis.ru/history/html/liter/hrestom/K/Kavendish_01.htm
80. Сагитов М. У. Постоянная тяготения и масса Земли. М., 1969.
81. Филонович С. Р. Генри Кавендиш // Квант. 1981. № 10. С. 17– 22.
82. Голин Г. М. и Филонович С. Р. Классики физической науки. М., 1989. С. 255–268.
83. Конструкция и проектирование авиационных газотурбинных двигателей / С. А. Вьюнов, Ю. И. Гусев, А. В. Карпов и др.; под общ. ред. Д. В. Хролина. М.: Машиностроение, 1989. 568 с.
84. Энциклопедия. Т. 8. Астрономия. 2-е изд., испр. / глав. ред. М. Д. Аксенова. М.: Аванта + , 1999. 688 с.

-
85. Абрамович Г. Н. Прикладная газовая динамика. В 2 ч. Ч. 1. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит. 1991. 600 с.
86. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Параметры атомов и атомных ионов: справочник. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 1986. 344 с.
87. Структура и свойства металлов и сплавов. Справочник в 6-ти томах. Т. 1. Барабаш О. М., Коваль Ю. Н. Кристаллическая структура металлов и сплавов. Киев. Наукова думка. 1986. 599 с.
88. Прочность и долговечность материалов при циклических тепловых воздействиях / Третьяченко Г. Н., Карпинос Б. С.; отв. ред. Лебедев А. А.; АН УССР. Ин-т проблем прочности. Киев: Наук. думка, 1990. 256 с.
89. Шалин Р. Е., Булыгин И. П., Голубовский Е. Р. Жаропрочность сплавов для ГТД. М.: Металлургия, 1981. 120 с.
90. Каблов Е. Н., Оспенникова О. Г., Базылева О. А. Литейные конструкционные сплавы на основе алюминидов никеля // Двигатель. 2010. № 4. С. 22–24.
91. Михайлов В. М., Крафт О. Е. Ядерная физика. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1988. 328 с.
92. Капитонов И. М. Введение в физику ядра и частиц. М.: Едиториал УРСС, 2002. 384 с.
93. Бадамшин И. Х. Модель установившейся ползучести жаропрочных сплавов // Вестник УГАТУ. 2010. Т 14, № 1(36). С. 40–42.

Научное издание

Бадамшин Ильдар Хайдарович

**ОТ ЧЕТЫРЕХ К ОДНОМУ.
СИЛЫ ВНУТРИАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
И ПРОЧНОСТЬ МАТЕРИАЛОВ**

Монография

Издание второе, переработанное и дополненное

Компьютерный набор, корректура
и форматирование автора
Технический редактор Кулакова Г.А.
Подписано в печать 29.07.2016

Бумага офсетная.

Гарнитура NewtonC

Формат 60×84 1/8

Печать трафаретная. Печ. л. 16,75.

Тираж 500 экз. Заказ № 036-16.

Отпечатано в типографии ИД «Академия Естествознания»,
440026, г. Пенза, ул. Лермонтова, 3