ЭНИВЕРСИТЕТ ИТМО

А.М. Смирнов, А.В. Кремлева, В.Е. Бугров, А.Е. Романов

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ МАТЕРИАЛОВ



Санкт-Петербург 2021

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

А.М. Смирнов, А.В. Кремлева, В.Е. Бугров, А.Е. Романов

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ МАТЕРИАЛОВ

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО по направлению подготовки 16.04.01 «Техническая физика» в качестве учебнометодического пособия для реализации основных профессиональных образовательных программ высшего образования магистратуры

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Санкт-Петербург 2021 А.М. Смирнов, А.В. Кремлева, В.Е. Бугров, А.Е. Романов. Современные проблемы физики материалов. – СПб: Университет ИТМО, 2021. – 76 с.

Рецензент(ы):

Станислав Андреевич Красницкий, кандидат физико-математических наук, доцент (квалификационная категория "доцент практики") факультета лазерной фотоники и оптоэлектроники, Университета ИТМО.

Лабораторные работы, представленные в настоящем учебнопособие, предлагаются для выполнения методическом студентам, обучающимся по направлению подготовки 16.04.01 «Техническая физика», закрепления и применения знаний, полученных на лекциях, для практических занятиях и во время самостоятельной работы. Настоящие численному моделированию работы посвящены механических И физических свойств функциональных материалов, которые используются в современных полупроводниковых приборах и устройствах. Студентам напряжённопровести компьютерное моделирование предлагается деформированного состояния различных гетероструктур, в том числе в присутствии внешних воздействий, а также изучить поведение дефектов в гетероструктурах. В учебно-методическом пособие дана теоретическая справка к лабораторным работам.

Учебно-методические пособие к выполнению лабораторных работ подготовлен на факультете лазерной фотоники и оптоэлектроники.

Университет ИТМО – ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских

университет итмо

вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди мировых научно-образовательных центров, известной как ведущих проект «5 100». Университета ИТМО-Цель В становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

© Университет ИТМО, 2021

© А.М. Смирнов, А.В. Кремлева, В.Е. Бугров, А.Е. Романов, 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение
Лабораторная работа №1. Плоские задачи теории упругости. Задача Ламе 5
Лабораторная работа №2. Плоские задачи теории упругости. Задача Кир- ша
Лабораторная работа №3. Контактные задачи механики. Задача Герца 27
Лабораторная работа №4. Термоупругие задачи механики. Гетероструктуры сферической и цилиндрической геометрии
Лабораторная работа №5. Термоупругие задачи механики. Нитевидные кристаллы с огранёнными ядрами
Лабораторная работа №6. Релаксация напряжений несоответствия. Призматические дислокационные петли в гетероструктурах
Используемые литературные источники
Приложение А Пример оформления отчёта71

В настоящем учебно-методическом пособие представлены лабораторные работы, предлагаемые студентам факультета лазерной фотоники и оптоэлектроники для освоения методов компьютерного моделирования в области физического материаловедения, в частности, моделирования напряжённо-деформированного состояния и дефектов в различных материалах и структурах с помощью программного пакета ANSYS.

ANSYS – это универсальный программный пакет, применяемый для компьютерного моделирования различных инженерных конструкций, деталей машин, электронных приборов и пр. с целью анализа прочности, напряжений, деформаций, распределения температурных и электрических полей и других физических свойств с использованием метода конечных элементов (МКЭ). На протяжении последних 30 лет МКЭ активно используется в сфере автоматизированных инженерных расчётов при решении различных дифференциальных и интегральных уравнений, описывающих физические явления. Суть метода заключается в поиске решения необходимых уравнений в некоторой области, которая разбивается на конечное количество подобластей – элементов. В каждом из элементов выбирается вид аппроксимирующей функции формы (интерполяционного полинома). используемой для решения поставленной задачи. Интерполяционные полиномы строятся с помощью базисных функций, каждая из которых имеет значения, отличное от нуля, только в конкретном одном узле элемента. Как правило, в качестве базисных функций выбираются сплайны – кусочно-полиномиальные конечные функции. При выборе типа конечного элемента и системы базисных функций следует учитывать особенности решаемой задачи, например, вид дифференциального уравнения, геометрию задачи, начальные и граничные условия. Коэффициенты базисной функции определяются из условий равенства значения соседних функций на границах между элементами – в узлах. В итоге составляется система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных значений искомой функции в узлах элементов; количество уравнений системы равно количеству неизвестных значений в Данная система решается ОДНИМ ИЗ известных узлах. методов вычислительной математики. Программный пакет ANSYS позволяет автоматизировать данный процесс.

Представленные в учебно-методическом пособие лабораторные работы помогут студентам овладеть базовыми навыками компьютерного моделирования физических задач в программном пакете ANSYS: постановка задачи, построение геометрии, построение сетки, постановка начальных и граничных условий, обработка результатов численных расчётов, оценка адекватности полученного решения.

4

Лабораторная работа №1. Плоские задачи теории упругости. Задача Ламе

1. Цель работы

Знакомство с программным пакетом ANSYS и его использование для решения инженерных задач. Постановка задачи о плоском напряжённом состоянии и о плоской деформации. Развитие навыков построения двумерной области, создание сеток конечных элементов, задание граничных условий, обработки полученных результатов. Исследование влияния количества элементов и узлов в сетке на точность численного решения.

2. Краткое описание задачи

Кольцевая пластина толщиной 0,05 мкм подвергается действию равномерно распределённого давления на внутренней и внешней поверхности (*a* и *b* – внутренний и внешний радиус кольца; p_a и p_b – внутреннее и внешнее давление, см. рисунок 1). Материалу пластины соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга *E* = 181 ГПа, коэффициент Пуассона v = 0,35. a = 20 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 15$ МПа.



Рисунок 1– Полая кольцевая пластина под действием распределённого давления: *p*_a – внутреннее, *p*_b – внешнее давление; *a*– внутренний, *b* – внешний радиус кольца

С помощью программного пакета конечно-элементного анализа ANSYS Mechanical APDL необходимо получить напряжённодеформированное состояние кольца, построить графики зависимостей радиальной и окружной компонент тензора напряжений, а также радиальных перемещений от радиуса. Сравнить полученные зависимости с аналитическим решением. Исследовать сходимость решения по сетке.

3. Аналитическое решение

По условию задачи толщина кольца много меньше остальных его размеров, поэтому будем решать задачу в приближении плоского напряжённого состояния. В этом случае деформации могут быть выражены по следующим формулам в цилиндрической системе координат [1]:

$$\varepsilon_r = \frac{du}{dr}, \ \varepsilon_{\varphi} = \frac{u}{r}, \ \varepsilon_z = \frac{dw}{dz},$$
 (1)

где *и* и *w* – смещения вдоль оси *r* и *z* соответственно.

Напряжения могут быть определены из деформаций с помощью закона Гука [1]:

$$\sigma_{r} = \frac{2G(1-v)}{1-2v} \left(\frac{du}{dr} + \frac{v}{1-v} \frac{u}{r} + \frac{v}{1-v} \frac{dw}{dz} \right),$$
(2)
$$\sigma_{\varphi} = \frac{2G(1-v)}{1-2v} \left(\frac{u}{r} + \frac{v}{1-v} \frac{du}{dr} + \frac{v}{1-v} \frac{dw}{dz} \right), \quad \sigma_{z} = \sigma_{rz} = \sigma_{\varphi z} = 0,$$

где G – модуль сдвига, а v – коэффициент Пуассона. Модуль сдвига G и модуль Юнга E связаны следующим соотношением: G = E/(1 + v)/2.

Так как объёмные силы в рассматриваемой задачи равны нулю, то уравнение равновесия в перемещениях имеет следующий вид [1]:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} = 0.$$
 (3)

Уравнение (3) – это линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка типа Эйлера, его решение имеет вид

$$u = C_1 r + \frac{C_2}{r},\tag{4}$$

где C_1 и C_2 – константы интегрирования, которые определяются из граничных условий: $\sigma_r|_{r=a} = p_a$ и $\sigma_r|_{r=b} = p_b$.

Таким образом, определены радиальная и окружная компоненты тензора напряжений, а также радиальные перемещения [1,2]:

$$u_{r} = \frac{1}{E(b^{2} - a^{2})} \bigg((1 - v) (a^{2} p_{a} - b^{2} p_{b}) r - \frac{a^{2} b^{2}}{r} (p_{b} - p_{a}) (1 + v) \bigg),$$

$$\sigma_{r} = \frac{1}{b^{2} - a^{2}} \bigg(a^{2} p_{a} - b^{2} p_{b} + \frac{a^{2} b^{2}}{r^{2}} (p_{b} - p_{a}) \bigg),$$

$$\sigma_{\varphi} = \frac{1}{b^{2} - a^{2}} \bigg(a^{2} p_{a} - b^{2} p_{b} - \frac{a^{2} b^{2}}{r^{2}} (p_{b} - p_{a}) \bigg).$$
(5)

Рассмотрим полый цилиндр. В случае, если условия нагружения полого цилиндра таковы, что продольная деформация $\varepsilon_z = 0$, например, полый цилиндр с жёстко закреплёнными концами, то в цилиндре реализуется плоская деформация, причём формулы (5) для напряжений остаются верными, кроме того, напряжение $\sigma_z \neq 0$ принимает вид [2]

$$\sigma_{z} = \frac{a^{2} p_{a} - b^{2} p_{b}}{b^{2} - a^{2}}.$$
 (6)

В случае полой сферы, нагруженной постоянным внутренним и внешним давлением, ненулевые компоненты вектора прещений и тензора напряжений в сферической системе координат имеют вид [3]

$$u_{r} = \frac{1}{E(b^{3} - a^{3})} \bigg((1 - 2\nu) (a^{3}p_{a} - b^{3}p_{b}) r - \frac{a^{3}b^{3}}{2r^{2}} (1 + \nu) (p_{b} - p_{a}) \bigg),$$

$$\sigma_{r} = \frac{1}{b^{3} - a^{3}} \bigg(a^{3}p_{a} - b^{3}p_{b} + \frac{a^{3}b^{3}}{r^{3}} (p_{b} - p_{a}) \bigg),$$

$$\sigma_{\varphi} = \sigma_{\theta} = \frac{1}{b^{3} - a^{3}} \bigg(a^{3}p_{a} - b^{3}p_{b} - \frac{a^{3}b^{3}}{r^{3}} (p_{b} - p_{a}) \bigg).$$
(7)

4. Порядок выполнения работы

Исходя из симметрии геометрии и приложенных нагрузок задачи, в расчётной модели будем рассматривать четверть кольца. Значения всех констант и нагрузок следует вводить в единицах системы СИ. Для решения задачи теории упругости удобно использовать модуль Structural, который исключает излишние опции программного пакета: Main Menu > Preferences > Structural.

4.1. Ввод параметров материалов

По условию задачи материал является упругим и изотропным (так как заданы только две упругие константы – модуль Юнга и коэффициент Пуассона). Чтобы задать изотропный упругий материал в ANSYS, необходимо перейти в окно Materials Models: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Material Props** > **Material Model** и выбрать: **Structural** > **Linear** > **Elastic** > **Isotropic**, затем ввести модуль Юнга (EX) и коэффициент Пуассона (PRXY), см. рисунок 2.



Рисунок 2 – Ввод параметров материала

4.2. Выбор элементов и их свойств

Для решения задачи МКЭ необходимо выбрать тип элемента. В нашем случае используем квадратный четырёхузловой элемент: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Element Type** > **Add/Edie/Delete** > **Add**, выбрать группу элементов Structural, solid и в ней Quad 4node 182 (см. рисунок 3,а). Чтобы задать приближение плоского напряжённого состояния с учётом толщины пластины, в оставшемся окне необходимо нажать Options и выбрать Element behavior K3 – plane strs w/thk (см. рисунок 3,б); plane strain соответствует плоской деформации, axisymmetric – сферической геометрии. Для того чтобы задать толщину кольцевой пластины, необходимо выбрать **Main Menu** > **Preprocessor** > **Real Constants** > **Add/Edie/Delete** > **Add** > **OK** и ввести Thickness THK (см. рисунок 3,в).



Рисунок 3 – Выбор элементов и их свойств. (а) выбор элемента (б) выбор свойств элемента, (в) выбор толщины кольцевой пластины

4.3. Построение геометрической модели

Исходя из симметрии задачи, построим только четверть кольца: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Circle > By Dimensions. RAD1 – радиус внешнего кольца, RAD2 – радиус внутреннего кольца, THETA1 и THETA2 необходимы для создания четверти кольца (см. рисунок 4).



Рисунок 4 – Построение геометрической модели

4.4. Создание сетки конечных элементов

Для создания сетки переходим в Main Menu > Preprocessor > Meshing > Mesh Tool. Для каждой задачи подбирается индивидуальная сетка, отвечающая всем требованиям решаемой задачи. В нашем случае геометрия модели не имеет концентраторов напряжений, а внешняя и внутренняя нагрузки распределены равномерно по поверхности кольца. Таким образом, можно задать элементы одного размера: Mesh Tool > Global > Set. В появившемся окне необходимо указать размер элемента (SIZE Element edge length) и нажать ОК. Отметим, что размер элемента должен соответствовать размерам построенной геометрической модели.

Создаём сетку: **Mesh Tool** > **Quad** > **Mapped** > **Mesh** (см. рисунок 5). Команда Quad соответствует выбору четырёхугольных элементов. Команда Марреd используется для построения регулярной сетки.

Чтобы узнать количество элементов и узлов сетки, необходимо, находясь в Main Menu > Preprocessor, выбрать в ленте Utility Menu > List > Elements > Nodes + Attributes.



Рисунок 5 - Создание регулярной сетки

4.5. Граничные условия и нагрузки

Данная задача решается в симметричной постановке, следовательно, необходимо задать следующие условия – запрет нормальных перемещений на границах разреза. Для этого используется команда Displacement: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > Displacement > On Lines. После чего следует выбрать необходимые линии, а в списке DOFs to be constrained – фиксируемые степени свободы. По умолчанию задаётся нулевое перемещение.

Давление прикладывается аналогичным образом с помощью команды Pressure: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > Pressure > On Lines (см. рисунок 6). Отметим, что в случае растяжения необходимо указать отрицательное значение давления.

4.6. Решение задачи и обработка результатов

После того как заданы все граничные условия и выбраны все нагрузки, можно перейти к решению задачи. Для это используем команду Solve: **Main Menu** > **Solution** > **Solve** > **Current LS**.

Для обработки полученных результатов используется вкладка General Postproc. Чтобы вывести на экран радиальную или окружную компоненты тензора напряжений, необходимо изменить глобальную систему координат с декартовой на цилиндрическую (или сферическую, в зависимости от условий задачи). Для этого воспользуемся командой Options for Outp: Main Menu > General Postproc > Options for Outp > Results coordinate system и выбираем Global Cylindric (Global Spherical). Теперь ось X (декартовой системы координат) будет соответствовать оси r (цилиндрической системы координат), ось Y – оси φ , а ось Z – оси z.

Для вывода радиальной компоненты тензора напряжений воспользуемся командой Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Stress> X-Component of stress (см. рисунок 7). Карта радиальных перемещений и карта окружных напряжений выводятся аналогичным образом.



Рисунок 6 – Выбор внешней нагрузки



Рисунок 7 – Радиальная компонента тензора напряжений

Чтобы получить зависимость радиальных перемещений от радиусвектора, например, на границе разреза при $\varphi = 0^{\circ}$, необходимо создать область на этой границе: **Main Menu** > **General Postproc** > **Path Operations** > **Define Path** > **By Nodes**, и выбрать первый и последний узел, название области и количество разбиений (нет смысла задавать количество разбиений меньше, чем шаг сетки).

После того как область определена, в неё необходимо записать интересующие нас значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Map Onto Paths. Затем вводим имя нашей области и выбираем радиальные перемещения (Item, Comp Item to be mapped > DOF solution > Translation UX).

После записи значений в нашу область мы можем вывести график или записанные значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Plot Path Item > On Graph или List Path Item (см. рисунок 8).

Зависимости радиальных и окружных напряжений от радиус-вектора могут быть получены аналогичным образом.



Рисунок 8 – Зависимость радиальных перемещений от радиус-вектора

Для исследования сходимости численного решения по сетке конечных элементов необходимо выбрать некоторую точку, привязанную к геометрии объекта расчётов, и записать значение исследуемой функции в данной точке. Затем увеличить количество элементов сетки, повторить расчёт и снова записать полученное значение исследуемой функции в данной точке. С увеличением числа элементов сетки различия между значениями функции в конкретной точке должны уменьшаться. Измельчение сетки (увеличение числа элементов сетки) необходимо проводить до тех пор, пока разница между значениями не выйдет на насыщение. Для исследования сходимости решения по сетке рекомендуется проводить не менее пяти расчётов на сетках с различным количеством элементов.

5. Требования к отчёту

Отчёт должен содержать исходные данные, постановку задачи, обоснование расчётной модели, иллюстрацию сетки конечных элементов, результаты расчётов. Должны быть представлены карты и графики перемещений u_r и напряжений σ_r , σ_{φ} , причём на графиках, полученных с помощью аналитического решения, должны быть отмечены точки, полученные с помощью МКЭ. Должно быть приведено сравнение численного и аналитического решения с указанием погрешности и сделаны соответствующие выводы. Должна быть исследована сходимость численного решения по сетке конечных элементов в зависимости от количества элементов или узлов сетки. Пример отчёта приведён в приложении А.

6. Варианты задания

Задача 1. Для тонкой полой кольцевой пластины (толщина пластины 0,5 мкм), подвергающейся действию равномерно распределённого давления на внутренней и внешней поверхности (a – внутренний и b – внешний радиус кольца, p_a – внутреннее и p_b – внешнее давление), построить карты поля напряжений для радиальной и окружной компоненты тензора напряжений и карты поля перемещений для радиальных перемещений, радиальных и окружных напряжений вдоль радиуса кольца. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалу пластины соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга E = 181 ГПа и коэффициент Пуассона v = 0,35.

Вариант 1. a = 10 мкм, b = 14 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 10$ МПа. Вариант 2. a = 15 мкм, b = 30 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 0$. Вариант 3. a = 30 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 25$ МПа. Вариант 4. a = 20 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 0$, $p_b = 15$ МПа. Задача 2. Для полого нитевидного кристалла значительной длины, подвергающегося действию равномерно распределённого давления на внутренней и внешней поверхности (a – внутренний и b – внешний радиус цилиндра, p_a – внутреннее p_b – внешнее давление), построить карты поля напряжений для радиальной, окружной и нормальной компоненты тензора напряжений и карты поля перемещений для радиальной компоненты вектора перемещений. Построить зависимости радиальных перемещений, радиальных, окружных и нормальных напряжений вдоль радиуса цилиндра. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалу нитевидного кристалла соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга $E = 308 \ \Gamma \Pi a$, коэффициент Пуассона v = 0,29.

Вариант 1. a = 10 мкм, b = 14 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 10$ МПа. Вариант 2. a = 15 мкм, b = 30 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 0$. Вариант 3. a = 30 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 20$ МПа, $p_b = 25$ МПа. Вариант 4. a = 20 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 0$, $p_b = 15$ МПа.

Задача 3. Для полой сферической частицы, подвергающейся действию равномерно распределённого давления на внутренней и внешней поверхности (a – внутренний и b – внешний радиус частицы, p_a – внутреннее и p_b – внешнее давление), построить карты поля напряжений для радиальной и окружной компоненты тензора напряжений и карты поля перемещений для радиальной компоненты вектора перемещений. Построить зависимости радиальных перемещений, радиальных и окружных напряжений вдоль радиуса частицы. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалу частицы соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга E = 121 ГПа, коэффициент Пуассона v = 0,39.

Вариант 1. a = 10 мкм, b = 14 мкм, $p_a = 10$ МПа, $p_b = 5$ МПа. Вариант 2. a = 15 мкм, b = 30 мкм, $p_a = 10$ МПа, $p_b = 0$. Вариант 3. a = 30 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 10$ МПа, $p_b = 15$ МПа. Вариант 4. a = 20 мкм, b = 40 мкм, $p_a = 0$, $p_b = 7$ МПа.

Лабораторная работа №2. Плоские задачи теории упругости. Задача Кирша

1. Цель работы

Знакомство с программным пакетом ANSYS и его использование для решения инженерных задач. Постановка задачи о плоском напряжённом состоянии. Развитие навыков построения двумерной области, создание сеток конечных элементов, задание граничных условий, обработки полученных результатов. Исследование влияния количества элементов и узлов в сетке на точность численного решения.

2. Краткое описание задачи

Пластина значительной ширины с круговым отверстием в центре радиусом R = 25 мм подвергается равномерному одноосному растяжению напряжениями p = 10 МПа параллельными оси x (см. рисунок 9). Материалу пластины соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга E = 121 ГПа, коэффициент Пуассона v = 0,39. Требуется найти распределение напряжений в пластине.



Рисунок 9 – Пластина с круговым отверстием в центре под действие растягивающих напряжений *р*

С помощью программного пакета конечно-элементного анализа ANSYS Mechanical APDL необходимо получить напряжённодеформированное состояние пластины, определить коэффициент интенсивности напряжений. Сравнить полученные зависимости с аналитическим решением. Исследовать сходимость решения по сетке.

3. Аналитическое решение

Задача Кирша о напряжённом состоянии плоской бесконечной пластины с круговым отверстием, подвергнутой равномерному одноосному растяжению, была решена в 1898 г. Напряжения, вызванные наличием отверстия, локализованы вблизи отверстия, а на достаточно большом расстоянии от него становятся теми же, что и в сплошной пластине.

Известно, что напряжениям в сплошной пластине соответствует функция напряжений $f_0 = 0.5pr^2 \sin^2 \varphi = 0.25 pr^2 - 0.25 \cos 2\varphi$, записанная в полярной системе координат [1]. Искомая функция напряжений f для пластины с отверстием при больших значениях r должна давать те же напряжения, что и функция f_0 , а на контуре отверстия (при r = R и $\varphi = 0$) – $\partial f/\partial r = 0$. Поэтому будем искать функцию f в виде $f = g(r)\cos 2\varphi$.

Подставляя полученное выражение для функции f в уравнение совместности $\Delta\Delta f = 0$, получаем следующее дифференциальное линейное уравнение типа Эйлера для g(r) [1]:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{4}{r^2}\right)\left(\frac{\partial^2 g}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial g}{\partial r} - \frac{4g}{r^2}\right) = 0.$$
(8)

Общее решение этого уравнения имеет вид

$$g(r) = Ar^{2} + Br^{4} + \frac{C}{r^{2}} + D,$$
(9)

а соответствующие компоненты тензора напряжений, определяются формулами [1]

$$\sigma_{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial^{2} f}{\partial \varphi^{2}} = -\left(2A + \frac{6C}{r^{4}} + \frac{4D}{r^{2}}\right) \cos 2\varphi,$$

$$\sigma_{\varphi} = \frac{\partial^{2} f}{\partial r^{2}} = \left(2A + 12Br^{2} + \frac{6C}{r^{4}}\right) \cos 2\varphi,$$

$$(10)$$

$$\sigma_{r\varphi} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \varphi}\right) = \left(2A + 6Br^{2} - \frac{6C}{r^{4}} - \frac{2D}{r^{2}}\right) \sin 2\varphi.$$

Постоянные интегрирования определяются из условий для сплошной пластины $\sigma_r|_{r\to\infty} = p\cos^2\varphi$, $\sigma_{r\varphi}|_{r\to\infty} = -0.5p\sin^2\varphi$ и из условия, что край отверстия свободен от внешних усилий.

В итоге ненулевые компоненты тензора напряжений в полярной системе координат имеют вид [1,4]

$$\sigma_{r} = \frac{p}{2} \left[\left(1 - \frac{R^{2}}{r^{2}} \right) + \left(1 - \frac{4R^{2}}{r^{2}} + \frac{3R^{4}}{r^{4}} \right) \cos 2\varphi \right],$$

$$\sigma_{\varphi} = \frac{p}{2} \left[\left(1 + \frac{R^{2}}{r^{2}} \right) - \left(1 + \frac{3R^{4}}{r^{4}} \right) \cos 2\varphi \right],$$

$$\sigma_{r\varphi} = -\frac{p}{2} \left[\left(1 + \frac{2R^{2}}{r^{2}} - \frac{3R^{4}}{r^{4}} \right) \sin 2\varphi \right].$$
(11)

На границе отверстия (при r = R) $\sigma_r = 0$, $\sigma_{\varphi} = p(1 - 2\cos 2\varphi)$. В этом случае коэффициент концентрации напряжений K_{φ} равен

$$K_{\varphi} = \frac{(\sigma_{\varphi\varphi})_{\max}}{p} = 3, \, \text{при } \varphi = \pm \pi/2.$$
(12)

Из формул выше видно, что окружные напряжения на границе отверстия в три раза превосходят напряжения в сплошной пластине, а при удалении от отверстия напряжения быстро спадают к значению приложенного давления.

Если давление *p* приложено в направлении оси *y*, то радиальная, окружная и касательная компоненты тензора напряжений могут быть получены из формулы (11) путём замены угла φ на угол $\varphi - \pi/2$. Решение задачи в случае одновременного растяжения пластины по одной оси и сжатия по другой (случай чистого сдвига) может быть получено с использованием принципа суперпозиции:

$$\sigma_{r} = p \left(1 - \frac{4R^{2}}{r^{2}} + \frac{3R^{4}}{r^{4}} \right) \cos 2\varphi,$$

$$\sigma_{\varphi} = -p \left(1 + \frac{3R^{4}}{r^{4}} \right) \cos 2\varphi,$$
(13)

В этом случае $\sigma_{\varphi} = -4p\cos 2\varphi$, а коэффициент концентрации напряжений K_{φ} равен

$$K_{\varphi} = \frac{(\sigma_{\varphi\varphi})_{\max}}{p} = 4, \, \text{при } \varphi = \pm \pi/2$$
(14)

Значение коэффициента концентрации для случая растяжения пластины конечной ширины с круговым отверстием было получено Хоулендом в 1930 г., а для случая эллиптического отверстия – Исида в 1953 г. [1,4–6]. Отметим, что коэффициенты концентрации для пластин с отверстием различной формы можно найти в соответствующих справочниках, например, в [7].

4. Порядок выполнения работы

Исходя из симметрии геометрии задачи и приложенных нагрузок, в расчётной модели будем рассматривать четверть пластины. Значения всех констант и нагрузок следует вводить в единицах системы СИ. Для решения задачи теории упругости удобно использовать модуль Structural, который исключает излишние опции программного пакета: Main Menu > Preferences > Structural.

4.1. Ввод параметров материалов

По условию задачи материал является упругим и изотропным (так как заданы только две упругие константы). Чтобы задать в ANSYS изотропный упругий материал, необходимо перейти в окно Materials Models: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Material Props** > **Material Model** и выбрать: **Structural** > **Linear** > **Elastic** > **Isotropic**, затем ввести модуль Юнга (EX) и коэффициент Пуассона (PRXY), см. рисунок 2.

4.2. Выбор элементов и их свойств

Для решения задачи МКЭ необходимо выбрать тип элемента. В данной задаче диаметр отверстия значительно меньше размеров пластины, поэтому для повышения точности численного решения обычно используют четырёхугольные элементы с 8-ю узлами: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Element Type** > **Add/Edie/Delete** > **Add**, выбрать группу элементов Structural, solid и в ней Quad 8 node 183 (см. рисунок 10,а). Чтобы задать приближение плоского напряжённого состояния, в оставшемся окне необходимо нажать Options и выбрать Element behavior K3 – plane stress (см. рисунок 10,б).

Main Menu 🛞	Λ	Element Types	*	□ (a)
Preferences Prepresences				(u)
Flement Type	Defined Element Types:			
Add/Edit/Delete	NONE DEFINED	Λ	Library of Element Types	×
Switch Elem Type		Only structural element types are shown	n	
Add DOF		Library of Element Types	Structural Mass 🔺 Quad 4 n	ode 182 🔺
Remove DOFs			Link Brode	183
Elem Tech Control			Pipe 20nod	e 186
Material Props			Solid concre	et 65 🗸 🗸
Sections			Solid-Shell V 8 nod	e 183
Modeling		Floren the second second second second		
Meshing		Element type reference number	1	
Checking Ctrls				
Numbering Ctrls		ОК	Apply Cancel	Help
Archive Model Gupling / Cean				
Multi-field Set Up				
⊞ Loads				
Physics	Add	Options Delete	1	
Path Operations			1	
General Postproc TimeHist Postpro	Close	Help		
B ROM Tool				
🗉 Prob Design	1			I
Main Menu	III			
Preferences	1			$(\mathbf{\tau})$
Preprocessor	Λ	Element 1	Types	× (0)
Add/Edit/Delete	Defined Ele	ment Tunce:		
Switch Elem Type	Delined Ele	inent rypes.		
Add DOF	Type 1	PLANE183		
Elem Tech Control	Δ	PLANE183 ele	ement type options	
Elem Tech Control				
Real Constants	Options for PLAN	IE183, Element Type Ref. No. 1		
Material Props				
Sections	Element shape	К1	Quadrilateral 🔹	
Modeling				
	Element behavior	r K3	Diama da constructione de la construcción de la con	
		10	Plane stress	
Checking Ctrls				
Numbering Ctrls	Element formula	tion K6	Pure displacemnt 🔹	
Archive Model	(NOTE: Mixed for	mulation is not valid with plane	stress)	
	(NOTE: MIXED TO	malation is not valid with planes	50.555	
Coupling / Ceqn				
Multi-field Set Up		ОК	Cancel Help	
Loads			- The p	

Рисунок 10 – Выбор элементов и их свойств. (а) выбор элемента (б) выбор свойств элемента

4.3. Построение геометрии модели

Исходя из симметрии задачи, построим только четверть пластины, для этого необходимо:

1) Создать квадрат – четверть рассматриваемой области. Для этого используем функцию построения прямоугольника, задав координаты двух вершин: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Rectangle > By 2 Corners (см. рисунок 11, а).

2) Создать окружность для последующего моделирования отверстия: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Circle > Solid Circle (см. рисунок 11, б).

3) Создать отверстие с помощью операции вычитания объекта. Для этого вычтем из квадратной поверхности созданную окружность: Main Menu > Preprocessor > Modelling > Operate > Booleans > Divide > Area by Area. В появившемся окне нужно выбрать поверхность, из которой

происходит вычитание, нажать ОК, затем выбрать вычитаемую поверхность – построенную окружность (см. рисунок 11,в).



Рисунок 11 – Построение геометрической модели: (а) построение квадрата, (б) построение окружности, (в) создание отверстия

4.4. Создание сетки конечных элементов

Для создания сетки переходим в Main Menu > Preprocessor > Meshing > Mesh Tool. Для каждой задачи подбирается индивидуальная сетка, отвечающая всем требованиям решаемой задачи. В нашем случае напряжений, вблизи ожидаются отверстия высокие градиенты следовательно, в этой области сетка должна быть мельче (т.е. содержать большее количество элементов), чем на периферии, где ожидается однородное поле напряжений характерное для пластины без отверстия. Таким образом, необходимо создать элементы разного размера. Для этого определим количество элементов на границах пластины: MeshTool > Size **Controls** > Lines > Set, выберем линию и укажем NDIV No of element divisions – число элементов на линии. Для границ пластины, прилегающих к отверстию, необходимо дополнительно задать параметр сгущения: SPACE Spacing ratio. Для остальных сторон это поле следует оставить пустым (или равным 1).

В качестве примера рассмотрим следующие параметры: для границ пластины, прилежащих к отверстию, выберем NDIV = 60, SPACE = 1,25 (см. рисунок 12); для двух оставшихся границ выберем NDIV = 40, SPACE = 1; для дуги окружности выберем NDIV = 40, SPACE = 1.

После того как количество разбиений указано для каждой линии, можно создать сетку: **Mesh Tool** > **Tri** > **Free** > **Mesh**. Команда Tri соответствует выбору треугольных элементов. Команда Free используется для построения нерегулярной сетки.



Рисунок 12 – Создание нерегулярной сетки

4.5. Граничные условия и нагрузки

Так как данная задача решается в симметричной постановке, то необходимо поставить соответствующие граничные условия – запрет

нормальных перемещений на границах разреза. Для этого используется команда Displacement: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > Displacement > On Lines. После этого следует выбрать необходимые линии, а в списке DOFs to be constrained – фиксируемые степени свободы. По умолчанию задаётся нулевое перемещение.

Растягивающие напряжения прикладываются аналогичным образом с помощью команды Pressure: **Main Menu** > **Solution** > **Define Loads** > **Apply** > **Structural** > **Pressure** > **On Lines**. Для растяжения необходимо задать отрицательную величину (см. рисунок 13).



Рисунок 13 – Выбор внешней нагрузки

4.6. Решение задачи и обработка результатов

После того как заданы все граничные условия и выбраны все нагрузки, можно перейти к решению задачи. Для это используем команду Solve: **Main Menu** > **Solution** > **Solve** > **Current LS**.

Для обработки полученных результатов используется вкладка General Postproc. Чтобы вывести на экран радиальную, окружную или касательную компоненты тензора напряжений, необходимо изменить глобальную систему координат с декартовой на цилиндрическую. Для этого воспользуемся командой Options for Outp: **Main Menu** > **General Postproc** > **Options for Outp** > **Results coordinate system** и выбираем Global Cylindric. Теперь ось *X* (декартовой системы координат) будет соответствовать оси *r* (цилиндрической системы координат), ось *Y* – оси φ , а ось *Z* – оси *z*.

Для вывода окружной компоненты тензора напряжений воспользуемся командой Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Stress> Y-Component of stress (см. рисунок 14).



Рисунок 14 – Окружная компонента тензора напряжений

Чтобы получить зависимость окружных напряжений от координаты на одной из сторон пластины, необходимо создать область на этой стороне: **Main Menu** > **General Postproc** > **Path Operations** > **Define Path** > **By Nodes**, и выбрать первый и последний узел, название области и количество разбиений (нет смысла задавать количество разбиений меньше, чем шаг сетки).

После того как область определена, в неё необходимо записать интересующие нас значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Map Onto Paths. Затем вводим имя нашей области и выбираем окружные напряжения (Item, Comp Item to be mapped > Stress > Y-direction SY).

После записи значений в нашу область мы можем вывести график или записанные значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Plot Path Item > On Graph или List Path Item (см. рисунок 15).



Рисунок 15 – Зависимость окружных напряжений от координаты

Для исследования сходимости численного решения по сетке конечных элементов необходимо выбрать некоторую точку, привязанную к геометрии объекта расчётов, и записать значение исследуемой функции в данной точке. Затем увеличить количество элементов сетки, повторить расчёт и снова записать полученное значение исследуемой функции в данной точке. С увеличением числа элементов сетки различия между функции в конкретной значениями точке должны уменьшаться. Измельчение сетки (увеличение числа элементов сетки) необходимо проводить до тех пор, пока разница между значениями не выйдет на насыщение. Для исследования сходимости решения по сетке рекомендуется проводить не менее пяти расчётов на сетках с различным количеством элементов.

5. Требования к отчёту

Отчёт должен содержать исходные данные, постановку задачи, обоснование расчётной модели, иллюстрацию сетки конечных элементов, результаты расчётов. Должны быть представлены карты и графики напряжений σ_r , σ_{a} , σ_{ra} , причём на графиках, полученных с помощью аналитического решения, должны быть отмечены точки, полученные с помощью МКЭ. Должны быть вычислены коэффициенты концентрации напряжений К. Должно быть приведено сравнение численного и аналитического решения указанием погрешности с И сделаны быть соответствующие выводы. Должна исследована сходимость численного решения по сетке конечных элементов в зависимости от количества элементов или узлов сетки.

6. Варианты задания

Задача 1. Пластина значительной ширины и малой толщины с круговым отверстием в центре радиуса R подвергается действию сил p_x и p_y вдоль осей x и y соответственно. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений. Построить зависимости радиальных, окружных и касательных напряжений вдоль поверхности отверстия или вдоль направления, примыкающего к отверстию и параллельного стороне пластины. Определить коэффициент концентрации напряжений $K = \sigma_{max}/p$. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалу пластины соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга E = 121 ГПа, коэффициент Пуассона v = 0,39.

Вариант 1. R = 15 мм, $p_x = 20$ МПа, $p_y = 0$. Вариант 2. *R* = 5 мм, *p_x* = -20 МПа, *p_y* = 0. Вариант 3. *R* = 15 мм, *p_x* = *p_y* = 20 МПа. Вариант 4. *R* = 5 мм, *p_x* = 20 МПа, *p_y* = -20 МПа.

Задача 2. Полубесконечная пластина толщины h = 1 мм с круговым отверстием радиуса R, расположенным на расстоянии c от свободного края пластины, подвергается действию одноосных растягивающих напряжений р, параллельных границе пластины. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений. Построить зависимости радиальных, окружных и напряжений вдоль поверхности отверстия касательных или вдоль направления, примыкающего к отверстию и параллельного стороне Определить коэффициент концентрации пластины. напряжений $K_A = (\sigma_A)_{\text{max}}/p$ и $K_B = (\sigma_B)_{\text{max}}/p$, где точка A – ближайшая точка к краю пластины на контуре отверстия; точка В – точка, диаметрально противоположная точке А. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалу пластины соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга E = 121 ГПа, коэффициент Пуассона v = 0,39.

Вариант 1. *R* = 5 мм, *R*/*c* = 0,35, *p* = 10 МПа. Вариант 2. *R* = 10 мм, *R*/*c* = 0,25, *p* = 10 МПа. Вариант 3. *R* = 15 мм, *R*/*c* = 0,3, *p* = 15 МПа. Вариант 4. *R* = 20 мм, *R*/*c* = 0,4, *p* = 15 МПа.

Задача 3. Полубесконечная пластина малой толщины с эллиптическим отверстием (a, b – полуоси эллипса), расположенным на расстоянии c от свободного края пластины, подвергается действию одноосных растягивающих напряжений *p*, параллельных малой полуоси эллипса. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений. Построить зависимости радиальных, окружных и касательных напряжений вдоль поверхности отверстия или вдоль направления, примыкающего к отверстию параллельного стороне пластины. Определить коэффициент И концентрации напряжений $K_a = (\sigma_a)_{\text{max}}/p$ и $K_b = (\sigma_b)_{\text{max}}/p$. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалу пластины соответствуют следующие упругие константы: модуль Юнга E = 121 ГПа, коэффициент Пуассона v = 0,39.

Вариант 1. b = 5 мм, a/b = 2, a/c = 0,1, p = 10 МПа. Вариант 2. b = 10 мм, a/b = 4, a/c = 0,2, p = 10 МПа. Вариант 3. b = 15 мм, a/b = 6, a/c = 0,3, p = 15 МПа. Вариант 4. b = 20 мм, a/b = 8, a/c = 0,4, p = 15 МПа.

Лабораторная работа №3. Контактные задачи механики. Задача Герца

1. Цель работы

Знакомство с программным пакетом ANSYS и его использование для решения инженерных задач. Постановка контактной задачи механики. Развитие навыков построения двумерной области, создание сеток конечных элементов, задание граничных условий, обработки полученных результатов. Исследование влияния количества элементов и узлов в сетке на точность численного решения.

2. Краткое описание задачи

Определить максимальные напряжения при вдавливании полусферы радиусом R = 20 мм в закрепленную опору в виде пластины толщиной h = 5мм и длиной L = 30 мм. На полусферу действует сила F = 200 H (см. рисунок 16). Упругие константы полусферы и пластины принять следующими: модуль Юнга полусферы $E_1 = 210$ МПа, коэффициент Пуассона $v_1 = 0,3$, модуль Юнга пластины $E_2 = 151$ ГПа, коэффициент Пуассона $v_2 = 0,3$.



Рисунок 16 – Схематичное изображение полусферы и контактной области

С помощью программного пакета конечно-элементного анализа ANSYS Mechanical APDL необходимо получить напряжённодеформированное состояние полусферы и пластины. Сравнить результаты численного расчёта с аналитическим решением. Исследовать сходимость по сетке.

3. Аналитическое решение

Классическая задача Герца посвящена исследованию распределения давления между двумя соприкасающимися шарами радиусов R_1 и R_2 с одинаковыми упругими константами под действием силы *F*. Считается, что контакт между шарами происходит без трения [4]. Данная задача была решена в 1881 г. В 1949 г. Миндлин получил решение, учитывающее касательные усилия и крутящие моменты в области контакта. В 1962 г. Гудмэн нашёл решение данной задачи при отсутствии проскальзывания между шарами.

Радиус контакта *а* и максимальное давление на поверхности контакта *р*_{max} определяются по следующим формулам [4]:

$$a = 1,11\sqrt[3]{\frac{F}{E}\frac{R_1R_2}{R_1 + R_2}},$$
(15)

$$p_{\rm max} = 0,388 \sqrt[3]{FE^2 \frac{\left(R_1 + R_2\right)^2}{R_1^2 R_2^2}}.$$
 (16)

Рассмотрим частный случай контакта сферы и плоскости, когда сфера радиуса R прижимается силой F. Для этого устремим радиус одного из шаров к нулю, например, $R_1 \rightarrow 0$, а радиус второго шара обозначим R, т.е. $R_2 = R$. Если пластина и полусфера имеют разные упругие модули, будем использовать в наших расчётах эффективный модуль Юнга E^* . В конечном итоге формулы (15) и (16) примут следующий вид [4]:

$$a = 1,11\sqrt[3]{\frac{FR}{E^*}},$$
 (17)

$$p_{\rm max} = 0.388 \sqrt[3]{\frac{F(E^*)^2}{R^2}},$$
(18)

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - v_1^2}{E_1} + \frac{1 - v_2^2}{E_2}.$$
(19)

Считая R_1 отрицательным, можно выписать формулы для радиуса контакта a и максимального давления на поверхности контакта p_{\max} для шара, вдавливаемого в сферическую выемку.

4. Порядок выполнения работы

Исходя из симметрии геометрии и приложенных нагрузок задачи, в расчётной модели будем рассматривать четверть сферы и половину пластины. Значения всех констант и нагрузок следует вводить в единицах системы СИ. Для решения задачи теории упругости удобно использовать модуль Structural, который исключает излишние опции программного пакета: Main Menu > Preferences > Structural.

4.1. Ввод параметров материалов

По условию задачи оба материала являются упругими и изотропными (так как заданы только две константы). Чтобы задать изотропный упругий материал в ANSYS, необходимо перейти в окно Materials Models: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Material Props** > **Material Model** и выбрать: **Structural** > **Linear** > **Elastic** > **Isotropic**, затем ввести модуль Юнга (EX) и коэффициент Пуассона (PRXY). Чтобы задать второй материал, во вкладке Material Models необходимо выбрать **Material** > **New Model**. (см. рисунок 17).



Рисунок 17 – Добавление второго материала

4.2. Выбор элементов и их свойств

Для решения задачи МКЭ необходимо выбрать тип элемента. Для повышенной точности выберем квадратный восьмиузловой элемент: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Element Type** > **Add/Edie/Delete** > **Add**, выберем группу элементов Structural, solid и в ней Quad 8 node 183 (см. рисунок 18,а).

Чтобы задать приближение осесимметричной задачи, в оставшемся окне необходимо нажать Options и выбрать Element behavior K3 – axisymmetric (см. рисунок 18,б).

Main Menu 🛞	Λ	Element Types	*			
Preferences					(2)	
Preprocessor					(a)	
Element Type	Defined Element Type	es:				
Add/Edit/Delete	NONE DEFINED	<u>^</u>	Library of	f Element Types	^	
Switch Elem Type		Only structural element ty	ypes are shown			
Add DOF		Library of Element Types		Structural Mass	Quad 4 node 182 🔨	
Remove DOFs				Link	8 node 183 Brick 8 node 185	
Elem Tech Control Real Constants				Pipe	20node 186	
Material Props				Solid	concret 65 V	
Sections				Solid-Shell	8 node 183	
Modeling		Floren the second second				
Meshing		Element type reference n	umber	1		
Checking Ctrls						
Numbering Ctrls		ОК	Apply	Cancel	Help	
Archive Model Germ						
⊞ Coupling / Ceqn ⊞ Multi-field Set Up		1				
Loads						
Physics	Add	Options	Delete			
Path Operations	/ 100	optiono	Delete			
Solution						
General Postproc	Close	н	lelp			
ImeHist Postpro DOM Teal			icip			
ROM 1001 Prob Design						
Main Menu	(A)				(റ്റ)	
		A Element Types			(0)	
	_					
Preprocessor						
Element Type	Defined Element Types:					
Add/Edit/Delete		Type 1 P	LANE183			
Switch Elem Type						
Add DOF	A PLANE183 element type options					
Remove DOFs						
Elem Tech Control	Options for PLANE183, Element Type Ref. No. 1					
Real Constants		Element shares 1/1				
Material Props		Element shape KI		Quadrilateral	•	
H Sections		Element behavior K3	}	Axisymmetric	•	
Modeling				,		
Meshing		Element formulation k	K6	Pure displacem	nt 🔻	
Checking Ctrls		(NOTE Mixed formulation is not valid with place stress)				
Numbering Ctrls		(NOTE: Mixed formulation is not valid with plane stress)				
Archive Model						
		OK	Ca	ancel	Help	
Multi field Set Un						
mulu-neid Set Op						
H Loads						
T Dhusias						

Рисунок 18 – Выбор элементов и их свойств. (а) выбор элемента (б) выбор свойств элемента

4.3. Построение геометрии модели

Исходя из симметрии задачи, построим только четверть сферы и половину пластины, для этого необходимо:

1) Создать прямоугольник – плоскости опоры. Для этого используем функцию построения прямоугольника на плоскости Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Rectangle > By Dimensions (см. рисунок 19, а).

2) Создать сектор – четверть рассматриваемой области. Для этого используем функцию построения окружности на плоскости: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Circle > Partial Annulus (см. рисунок 19, б).



Рисунок 19 – Построение геометрической модели: (а) построение опоры, (б) построение сектора

4.4. Создание сетки конечных элементов

Для создания сетки переходим в Main Menu > Preprocessor > Meshing > Mesh Tool. Для каждой задачи подбирается индивидуальная сетка, отвечающая всем требованиям решаемой задачи. В данном случае будем использовать регулярную сетку. С помощью команды Mesh Tool > Global > Set выбираем размер элемента, который должен соответствовать размерам построенной геометрической модели. Затем создаём сетку для первой области (прямоугольник), которая будет соответствовать материалу 1 по умолчанию: Mesh Tool > Quad > Mapped > Mesh. Команда Quad

соответствует выбору квадратных элементов. Команда Mapped используется для построения регулярной сетки.

Теперь необходимо создать сетку для второй области – сектора. Для этого выбираем **Mesh Tool** > **Element Attributes** > **Global** > **Set** и выбираем Material number 2. Затем создаём сетку **Mesh Tool** > **Quad** > **Mapped** > **Mesh** (см. рисунок 20).



Рисунок 20 – Создание регулярной сетки

4.5. Создание контактной пары

Для создания контактной пары выбираем Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Contact Pair > Contact Wizard > Pick Target (см. рисунок 21), после чего панель исчезает и программа предлагает выбрать линию контакта поверхности опоры. Далее панель Add Contact Pair восстанавливается на экране. Выбираем команду Next > Pick Contact и указываем линию на контактирующем теле, выбираем команду Next. Затем открываем панель Optional setting, выбираем окно Initial Adjustment > Automatic Contact adjustment > Close gap > OK > Create > Finish. Закрываем Contact Manager.

Отметим, что в качестве мишени/опоры (Target) обычно выбирают тело с плоской или вогнутой поверхностью. Если оба контактирующих тела являются выпуклыми, то в качестве опоры выбирается менее выпуклое тело. Для одинаковых контактирующих тел выбор мишени/опоры произволен.



Рисунок 21 – Создание контактной пары

4.6. Граничные условия и нагрузки

Так как данная задача решается в симметричной постановке, то следующие условия: запрет необходимо поставить нормальных перемещений на границе разреза. Для этого используется команда Displacement: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > **Displacement** > **On Lines**. После этого следует выбрать необходимые линии, а в списке DOFs to be constrained – фиксируемые степени свободы. По умолчанию задаётся нулевое перемещение. По условию задачи опора жёстко закреплена, поэтому необходимо ограничить перемещение опоры, т.е. закрепить нижнюю линию прямоугольника, зафиксировав все степени свободы: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > **Displacement** > **On Lines**.

Для того чтобы приложить силу к четверти сферы, необходимо выбрать и связать узлы верхней линии сектора: Utility Menu > Select > Entities > Lines > By Num/Pick > Apply (выбираем верхнюю линию сектора) > OK, затем Utility Menu > Select > Entities > Nodes > Attached to > Lines, all > OK. Теперь узлы, принадлежащие верхней линии сектора, выбраны. Для связывания узлов выбираем Main Menu > Preprocessor > Coupling/Ceqn > Couple DOFs > Pick All > NSET (указываем цифру 1), Lab UY > OK. Выбираем все объекты: Utility Menu > Select > Everything.

Для того чтобы приложить силу, сосредоточенную в центре полусферы, необходимо: Main Menu > Preprocessor > Loads > Define Loads

> Apply > Structural > Force/Moment > On Keypoints (выбрать левый верхний узел) > OK > Lab (выбрать FY) > VALUE (указать значение) > OK.

4.7. Решение задачи и обработка результатов

После того как заданы все граничные условия и выбраны все нагрузки, можно перейти к решению задачи. Для это используем команду Solve: Main Menu > Solution > Analysis Type > Sol'n Controls > Basic Analysis Options (выбираем Large Displacement Static) > Time at end of loadstep (выбираем цифру 1) > Number of substeps (выбираем число 20) > Frequency Write (выбираем every substep) > OK, затем выбираем Main Menu > Solution > Solve > Current LS.

Для обработки полученных результатов используется вкладка General Postproc. Чтобы вывести на экран поле напряжений по Мизесу, необходимо использовать команду Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Stress> von Mises stress (см. рисунок 22).



Рисунок 22 – Поле напряжений по Мизесу

Чтобы отобразить решение задачи с учётом симметрии, используется команда Symmetry Expansion: Utility Menu > PlotCtrls > Style > Symmetry Expansion > 2D Axi-Symmetric (см. рисунок 23).

Чтобы вывести на экран поле деформаций по Мизесу, необходимо использовать команду Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Elastic Strain> von Mises stress (см. рисунок 24).

Чтобы вывести на экран контактное давление, необходимо использовать команду Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Contact > Contact pressure. С помощью данной команды можно определить максимальное давление в области контакта.



Рисунок 23 – Поле напряжений по Мизесу с учётом симметрии задачи



Рисунок 24 – Поле деформаций по Мизесу
Для исследования сходимости численного решения по сетке конечных элементов необходимо выбрать некоторую точку, привязанную к геометрии объекта расчётов, и записать значение исследуемой функции в данной точке. Затем увеличить количество элементов сетки, повторить расчёт и снова записать полученное значение исследуемой функции в данной точке. С увеличением числа элементов сетки различия между функции в конкретной точке должны значениями уменьшаться. Измельчение сетки (увеличение числа элементов сетки) необходимо проводить до тех пор, пока разница между значениями не выйдет на насыщение. Для исследования сходимости решения по сетке рекомендуется проводить не менее пяти расчётов на сетках с различным количеством элементов.

5. Требования к отчёту

Отчёт должен содержать исходные данные, постановку задачи, обоснование расчётной модели, иллюстрацию сетки конечных элементов, результаты расчётов. Должны быть представлены карты напряжений по Мизесу, деформаций по Мизесу, распределение давления в месте контакта. Должно быть приведено сравнение численного и аналитического решения с указанием погрешности и сделаны соответствующие выводы. Должна быть исследована сходимость численного решения по сетке конечных элементов в зависимости от количества элементов или узлов сетки.

6. Варианты задания

Задача 1. Определить максимальные напряжения при вдавливании полусферы радиусом R = 22 мм в закреплённую опору в виде пластины толщиной h = 8 мм и длиной L = 30 мм. На полусферу действует сила F = 250 Н. Построить карты напряжений по Мизесу, деформаций по Мизесу, распределение давления в месте контакта. Определить локализацию максимальных напряжений. Упругие константы полусферы (1) и пластины (2) принять следующими:

Вариант 1. Модуль Юнга $E_1 = 151$ МПа, коэффициент Пуассона $v_1 = 0,3, E_2 = 210$ ГПа, $v_2 = 0,3$. Вариант 2. $E_1 = 151$ ГПа, $v_1 = 0,39, E_2 = 210$ ГПа, $v_2 = 0,3$. Вариант 3. $E_1 = E_2 = 151$ ГПа, $v_2 = v_1 = 0,39$. Вариант 4. $E_1 = 210$ ГПа, $v_1 = 0,3, E_2 = 151$ МПа, $v_2 = 0,3$. Задача 2. Определить максимальные напряжения при взаимодействии двух полусфер радиусом $R_1 = 30$ и $R_2 = 20$ мм под действием силы F = 250 Н. Построить карты напряжений по Мизесу, деформаций по Мизесу, распределение давления в месте контакта. Определить локализацию максимальных напряжений. Упругие константы полусферы (1) и полусферы (2) принять следующими:

Вариант 1. Модуль Юнга $E_1 = 151$ МПа, коэффициент Пуассона $v_1 = 0,3, E_2 = 210$ ГПа, $v_2 = 0,3$. Вариант 2. $E_1 = 151$ ГПа, $v_1 = 0,39, E_2 = 210$ ГПа, $v_2 = 0,3$. Вариант 3. $E_1 = E_2 = 151$ ГПа, $v_2 = v_1 = 0,39$. Вариант 4. $E_1 = 210$ ГПа, $v_1 = 0,3, E_2 = 151$ МПа, $v_2 = 0,3$.

Задача 3. Определить максимальные напряжения при взаимодействии полусферы радиусом $R_1 = 20$ и вогнутой пластины радиусом $R_2 = 60$ мм под действием силы F = 250 Н. Толщина пластины много больше её радиуса. Построить карты напряжений по Мизесу, деформаций по Мизесу, распределение давления в месте контакта. Определить локализацию максимальных напряжений. Упругие константы полусферы (1) и пластины (2) принять следующими:

Вариант 1. Модуль Юнга $E_1 = 151$ МПа, коэффициент Пуассона $v_1 = 0,3, E_2 = 210$ ГПа, $v_2 = 0,3$. Вариант 2. $E_1 = 151$ ГПа, $v_1 = 0,39, E_2 = 210$ ГПа, $v_2 = 0,3$. Вариант 3. $E_1 = E_2 = 151$ ГПа, $v_2 = v_1 = 0,39$. Вариант 4. $E_1 = 210$ ГПа, $v_1 = 0,3, E_2 = 151$ МПа, $v_2 = 0,3$.

Лабораторная работа №4. Термоупругие задачи механики. Гетероструктуры сферической и цилиндрической геометрии

1. Цель работы

Знакомство с программным пакетом ANSYS и его использование для решения инженерных задач. Постановка задачи о напряжённодеформированном состоянии в гетероструктурах. Развитие навыков построения двумерной области, создание сеток конечных элементов, задание граничных условий, обработки полученных результатов. Исследование влияния количества элементов и узлов в сетке на точность численного решения.

2. Краткое описание задачи

Определить напряжённо-деформированное состояние сферически симметричной гетероструктуры типа «ядро-оболочка» с несоответствием f = 0,04. Материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга (E = 150 ГПа) и коэффициенты Пуассона (v = 0,39). Внешний радиус гетероструктуры R = 3 мкм, радиус ядра $r_0 = 2,5$ мкм (см. рисунок 25).



Рисунок 25 – Схематичное изображение поперечного сечения гетероструктуры с ядром радиуса *r*₀ и внешним радиусом *R*

С помощью программного пакета конечно-элементного анализа ANSYS Mechanical APDL найти напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры. Сравнить полученные зависимости с аналитическим решением. Исследовать сходимость решения по сетке. При решении задачи использовать термоупругую аналогию. Необходимо рассмотреть случай, когда материалы ядра и оболочки имеют разные коэффициенты линейного теплового расширения, например, $\alpha_1 = 0,05$ 1/K, $\alpha_2 = 0,01$ 1/K. Таким образом, напряжённо-деформированное состояние в системе создаётся температурным полем, например, T = 1 К. Описанные выше параметры выбраны не случайно, они эквивалентны случаю механического несоответствия f = 4%.

3. Аналитическое решение

Рассмотрим наиболее общий случай – поле напряжений несоответствия в гетероструктуре в виде длинного полого цилиндрического нитевидного кристалла типа «ядро-оболочка» (см. рисунок 26).



Рисунок 26 – Схематичное изображение поперечного сечения полого нитевидного кристалла с радиусом поры r_p , радиусом ядра r_0 и внешним радиусом R

В качестве модели гетероструктуры радиально-неоднородного нитевидного кристалла рассмотрим составной цилиндр, состоящий из соосных полого цилиндрического ядра 1 с внутренним радиусом r_p и внешним радиусом r_0 и оболочки 2 с радиусом R. Будем считать, что ядро и оболочка упруго-изотропны и имеют одинаковые модули сдвига $G_1 = G_2 = G$ и равные коэффициенты Пуассона $v_1 = v_2 = v$. Однако кристаллические решётки ядра и оболочки имеют разные периоды a_1 и a_2 , а граница между ними в исходном состоянии когерентна. Параметр несоответствия определим следующим образом: $f = 2(a_1 - a_2) / (a_1 + a_2)$.

Следуя подходу, изложенному в работах [8,9], определим следующие деформации в цилиндрической системе координат:

$$\varepsilon_{rr}^{t(i)} = \frac{\partial u_r^{(i)}}{\partial r}, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi}^{t(i)} = \frac{u_r^{(i)}}{r}, \quad \varepsilon_{zz}^{t(i)} = \frac{\partial u_z^{(i)}}{\partial z}, \tag{20}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^{*(i)} = \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^{*(i)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^{(i)}, \qquad (21)$$

$$\varepsilon_{kl}^{*(1)} = f \delta_{kl}, \quad \varepsilon_{kl}^{*(2)} = 0.$$
 (22)

где ε_{k}^{t} – полная деформация, ε_{k}^{*} – собственная деформация, ε_{k} – упругая деформация структуры.

Из симметрии задачи и граничного условия $u_z^{(1)}(r = r_0) = u_z^{(2)}(r = r_0)$ получаем:

$$\varepsilon_{kl}^{t(1)} = \varepsilon_{kl}^{t(2)} = const , \qquad (23)$$

Принимая во внимание, что $\frac{\partial \mathcal{E}_{zz}^{(i)}}{\partial r} = 0$, запишем уравнение равновесия структуры в перемещениях [9]:

$$\frac{d^2 u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{u_r^{(i)}}{r^2} = 0.$$
(24)

Уравнение (24) — это линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка. Его решение имеет вид

$$u_r^{(i)} = Q_i r + \frac{P_i}{r},$$
 (25)

Константы найдём из граничных условий [9]:

$$\sigma_{rr}^{(2)}(r=R) = \sigma_{rr}^{(1)}(r=r_p) = 0, \ u_r^{(1)}(r=r_0) = u_r^{(2)}(r=r_0),$$
(26)

$$\sigma_{rr}^{(1)}(r=r_0) = \sigma_{rr}^{(2)}(r=r_0), \ 2\pi \int_{r_p}^{r_0} \sigma_{zz}^{(1)} r dr + 2\pi \int_{r_0}^{R} \sigma_{zz}^{(2)} r dr = 0$$
(27)

В итоге ненулевые компоненты тензора напряжений в цилиндрической системе координат имеют вид [9]

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = -G \frac{1+\nu}{1-\nu} f \frac{(r^2 - r_p^2)(R^2 - r_0^2)}{r^2(R^2 - r_p^2)}, \qquad (28)$$

$$\sigma_{zz}^{(1)} = -G \frac{1+\nu}{1-\nu} f \frac{R^2 - r_0^2}{R^2 - r_p^2},$$
(29)

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -G \frac{1+\nu}{1-\nu} f \frac{(r_0^2 - r_p^2)(R^2 - r^2)}{r^2(R^2 - r_p^2)},$$
(30)

$$\sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = G \frac{1+\nu}{1-\nu} f \frac{(r_0^2 - r_p^2)(R^2 + r^2)}{r^2(R^2 - r_p^2)},$$
(31)

$$\sigma_{zz}^{(2)} = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} f \frac{r_0^2 - r_p^2}{R^2 - r_p^2}.$$
(32)

Очевидно, если устремить радиус поры к нулю, то получим поле напряжений несоответствия для сплошного нитевидного кристалла типа «ядро-оболочка» в цилиндрической системе координат:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = -G \frac{1+\nu}{1-\nu} f\left(1 - \frac{r_0^2}{R^2}\right),$$
(33)

$$\sigma_{zz}^{(1)} = -2G \frac{1+\nu}{1-\nu} f\left(1 - \frac{r_0^2}{R^2}\right), \tag{34}$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -G \frac{1+\nu}{1-\nu} f r_0^2 \left(\frac{1}{r^2} - \frac{1}{R^2} \right), \tag{35}$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = G \frac{1+\nu}{1-\nu} f r_0^2 \left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{R^2} \right), \tag{36}$$

$$\sigma_{zz}^{(2)} = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} f \frac{r_0^2}{R^2}.$$
(37)

Напряжённо-деформированное состояние полой сферически симметричной гетероструктуры типа «ядро-оболочка» определяется аналогичным образом и имеет следующий вид в сферической системе координат (приведены только ненулевые компоненты тензора напряжений) [10]:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \frac{4G(1+\nu)f}{3(1-\nu)} \frac{R^3 - r_0^3}{R^3 - r_p^3} \left(\left(\frac{r_p}{r}\right)^3 - 1 \right),$$
(38)

$$\sigma_{\theta\theta}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = -\frac{2G(1+\nu)f}{3(1-\nu)} \frac{R^3 - r_0^3}{R^3 - r_p^3} \left(\left(\frac{r_p}{r}\right)^3 + 2 \right),$$
(39)

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -\frac{4G(1+\nu)f}{3(1-\nu)} \frac{r_0^3 - r_p^3}{R^3 - r_p^3} \left(\left(\frac{R}{r}\right)^3 - 1 \right), \tag{40}$$

$$\sigma_{\theta\theta}^{(2)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = \frac{2G(1+\nu)f}{3(1-\nu)} \frac{r_0^3 - r_p^3}{R^3 - r_p^3} \left(\left(\frac{R}{r}\right)^3 + 2 \right).$$
(41)

Если устремить радиус поры к нулю, то получим поле напряжений несоответствия для сплошной сферически симметричной частицы типа «ядро-оболочка» в сферической системе координат:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{4G}{3} \frac{(1+\nu)}{(1-\nu)} f\left(1 - \frac{r_0^3}{R^3}\right),\tag{42}$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -\frac{4Gr_0^3}{3R^3} \frac{1+\nu}{1-\nu} f\left(\frac{R^3}{r^3} - 1\right),\tag{43}$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = \sigma_{\theta\theta}^{(2)} = \frac{2Gr_0^3}{3R^3} \frac{1+\nu}{1-\nu} f\left(\frac{R^3}{r^3} + 2\right).$$
(44)

4. Порядок выполнения работы

Исходя из симметрии геометрии задачи, в расчётной модели будем рассматривать четверть гетероструктуры. Значения всех констант и нагрузок следует вводить в единицах системы СИ. Для решения задачи теории упругости удобно использовать модуль Structural, который исключает излишние опции программного пакета: Main Menu > Preferences > Structural.

4.1. Ввод параметров материалов

По условию задачи оба материала являются упругими и изотропными (так как заданы только две константы). Чтобы задать изотропный упругий материал в ANSYS, необходимо перейти в окно Materials Models: Main Menu > Preprocessor > Material Props > Material Model и выбрать: Structural > Linear > Elastic > Isotropic, затем ввести модуль Юнга (EX) и

коэффициент Пуассона (PRXY). Для того чтобы задать второй материал, во вкладке Material Models необходимо выбрать **Material** > **New Model**. (см. рисунок 17).

Чтобы задать коэффициент линейного теплового расширения, необходимо выбрать **Main Menu** > **Preprocessor** > **Material Props** > **Material Models**. В появившемся окне выбрать: **Structural** > **Thermal Expansion** > **Secant Coefficient** > **Isotropic** и ввести необходимые значения (ALPX) (см. рисунок 27). Коэффициент линейного теплового расширения для второго материала задаётся аналогичным образом. Напомним, что выбор значений данных коэффициентов осуществляется таким образом, чтобы выполнялось равенство $f = (\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T$.



Рисунок 27 – Ввод коэффициента линейного теплового расширения

4.2. Выбор элементов и их свойств

Для решения задачи МКЭ необходимо выбрать тип элемента. Для повышенной точности выберем четырёхугольный восьмиузловой элемент: **Main Menu > Preprocessor > Element Type > Add/Edie/Delete > Add**, выберем группу элементов Structural, solid и в ней Quad 8 node 183 (см. рисунок 18,а). Чтобы задать приближение осесимметричной задачи, в оставшемся окне необходимо нажать Options и выбрать Element behavior K3 – axisymmetric (см. рисунок 18,б).

4.3. Построение геометрии модели

Исходя из симметрии задачи, построим только четверть гетероструктуры, для этого необходимо:

1) Создать сектор – четверть рассматриваемой области. Для этого используем функцию построения окружности на плоскости: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Circle > By Dimensions (см. рисунок 28,а).

2) Создать дугу для моделирования границы раздела: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Circle > By Dimensions. Затем

необходимо удалить плоскость, чтобы остались только линии и кривые: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Delete > Areas Only и выбираем построенный ранее сектор. Теперь необходимо удалить лишние линии и кривые: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Delete > Line and Below.

3) Создать границу раздела при помощи операции вычитания объектов. Разделим исходный сектор на две области: Main Menu > **Preprocessor** > **Modelling** > **Operate** > **Booleans** > **Divide** > **Area by Line**. В появившемся окне нужно выбрать поверхность, из которой происходит вычитание, нажать OK, затем выбрать вычитаемую линию или кривую (см. рисунок 28,6).



Рисунок 28 – Построение геометрической модели: (а) построение сектора, (б) добавление границы раздела

4.4. Создание сетки конечных элементов

Для создания сетки переходим в Main Menu > Preprocessor > Meshing > Mesh Tool. Для каждой задачи подбирается индивидуальная сетка, отвечающая всем требованиям решаемой задачи. В нашем случае геометрия модели не имеет концентраторов напряжений, а температурное поле распределено равномерно по поверхности. Таким образом, можно создать регулярную сетку.

С помощью команды Mesh Tool > Global > Set выбираем размер элемента. Создаём сетку для первого материала: Mesh Tool > Quad > Mapped > Mesh. Команда Quad соответствует выбору квадратных элементов. Команда Марреd используется для построения регулярной сетки. Теперь необходимо создать сетку для второго материала. Для этого выбираем Mesh Tool > Element Attributes > Global > Set и выбираем Material number 2. Затем создаём сетку Mesh Tool > Quad > Mapped > Mesh (см. рисунок 29).



Рисунок 29 – Создание регулярной сетки

4.5. Граничные условия и нагрузки

Поскольку данная задача решается в симметричной постановке, то необходимо запретить нормальные перемещения на границах разреза. Для этого используется команда Displacement: **Main Menu** > **Solution** > **Define** Loads > Apply > Structural > Displacement > On Lines. После этого следует выбрать необходимые линии, а в списке DOFs to be constrained – фиксируемые степени свободы. По умолчанию задаётся нулевое перемещение.

Затем нужно приложить температурное поле: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > Temperature > On Areas и ввести соответствующее значение.

4.6. Решение задачи и обработка результатов

После того как заданы все граничные условия и задано температурное поле, можно перейти к решению задачи. Для это используем команду Solve: **Main Menu** > **Solution** > **Solve** > **Current LS**.

Для обработки полученных результатов используется вкладка General Postproc. Чтобы вывести на экран радиальную компоненту тензора напряжений, необходимо изменить глобальную систему координат с декартовой на сферическую. Для этого воспользуемся командой Options for Outp: Main Menu > General Postproc > Options for Outp > Results coordinate system и выбираем Global Spherical.

Для вывода радиальной компоненты тензора напряжений воспользуемся командой Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Stress> X-Component of stress (см. рисунок 30).



Рисунок 30 – Радиальная компонента тензора напряжений

Чтобы получить зависимость радиальных напряжений от радиусвектора гетероструктуры, необходимо создать область вдоль радиусвектора: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Define Path > By Nodes, и выбрать первый и последний узел, название области и количество разбиений (нет смысла задавать количество разбиений меньше, чем шаг сетки). После того как область определена, в неё необходимо записать интересующие нас значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Map Onto Paths. Затем вводим имя нашей области и выбираем радиальные напряжения (Item, Comp Item to be mapped > Stress > X-direction SX).

После записи значений в нашу область мы можем вывести соответствующий график или сами записанные значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Plot Path Item > On Graph или List Path Item (см. рисунок 31).



Рисунок 31– Зависимость радиальных напряжений от радиус-вектора в оболочке гетероструктуры

Для исследования сходимости численного решения ПО сетке конечных элементов необходимо выбрать некоторую точку, привязанную к геометрии объекта расчётов, и записать значение исследуемой функции в данной точке. Затем увеличить количество элементов сетки, повторить расчёт и снова записать полученное значение исследуемой функции в данной точке. С увеличением числа элементов сетки различия между функции конкретной значениями В точке должны уменьшаться. Измельчение сетки (увеличение числа элементов сетки) необходимо проводить до тех пор, пока разница между значениями не выйдет на насыщение. Для исследования сходимости решения по сетке рекомендуется проводить не менее пяти расчётов на сетках с различным количеством элементов.

5. Требования к отчёту

Отчёт должен содержать исходные данные, постановку задачи, обоснование расчётной модели, иллюстрацию сетки конечных элементов, результаты расчётов. Должны быть представлены карты и графики компонент тензора напряжений, причём на графиках, ненулевых полученных с помощью аналитического решения, должны быть отмечены точки, полученные с помощью МКЭ. Должно быть приведено сравнение численного и аналитического решения с указанием погрешности и сделаны Должна быть соответствующие выводы. исследована сходимость численного решения по сетке конечных элементов в зависимости от количества элементов или узлов сетки.

6. Варианты задания

Задача 1. Определить напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры в виде длинного полого цилиндрического нитевидного кристалла типа «ядро-оболочка» с несоответствием f = 0,1. R – внешний радиус цилиндра, r_0 – радиус ядра, r_p – радиус полости. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений и зависимости ненулевых компонент тензора напряжений от радиус-вектора. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга E = 79 ГПа и коэффициенты Пуассона v = 0,4.

Вариант 1. R = 10 мкм, $r_0 = 5$ мкм, $r_p = 0$. Вариант 2. R = 10 мкм, $r_0 = 2$ мкм, $r_p = 0$. Вариант 3. R = 10 мкм, $r_0 = 8$ мкм, $r_p = 0$. Вариант 4. R = 10 мкм, $r_0 = 6$ мкм, $r_p = 4$ мкм. Вариант 5. R = 10 мкм, $r_0 = 8$ мкм, $r_p = 2$ мкм. Вариант 6. R = 10 мкм, $r_0 = 4$ мкм, $r_p = 2$ мкм.

Задача 2. Определить напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры в виде сферически симметричной полой частицы типа «ядро-оболочка» с несоответствием f = 0,15. R – внешний радиус сферы, r_0 – радиус ядра, r_p – радиус полости. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений и зависимости ненулевых компонент тензора

напряжений от радиус-вектора. Определить максимальные значения напряжений и место их локализации.

Материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга *E* = 61 ГПа и коэффициенты Пуассона *v* = 0,38.

Вариант 1. R = 10 мкм, $r_0 = 5$ мкм, $r_p = 0$. Вариант 2. R = 10 мкм, $r_0 = 2$ мкм, $r_p = 0$. Вариант 3. R = 10 мкм, $r_0 = 8$ мкм, $r_p = 0$. Вариант 4. R = 10 мкм, $r_0 = 6$ мкм, $r_p = 4$ мкм. Вариант 5. R = 10 мкм, $r_0 = 8$ мкм, $r_p = 2$ мкм. Вариант 6. R = 10 мкм, $r_0 = 4$ мкм, $r_p = 2$ мкм.

Лабораторная работа №5. Термоупругие задачи механики. Нитевидные кристаллы с огранёнными ядрами

1. Цель работы

Знакомство с программным пакетом ANSYS и его использование для решения инженерных задач. Постановка задачи о напряжённодеформированном состоянии в гетероструктурах. Развитие навыков построения двумерной области, создания сеток конечных элементов, обработки выбора граничных условий, полученных результатов. Исследование влияния количества элементов и узлов в сетке на точность численного решения.

Знакомство с математическим пакетом MatLab и его использование для обработки аналитических решений физических и механических задач. Развитие навыков обработки полученных результатов, построение графиков и карт.

2. Краткое описание работы

Определить напряжённо-деформированное состояние цилиндрического нитевидного кристалла с ядром в виде длинного параллелепипеда квадратного поперечного сечения. Несоответствие между материалами ядра и оболочки принять следующим: f = 0,04. Считается, что материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга (E = 150 ГПа) и коэффициенты Пуассона (v = 0,39). Внешний радиус цилиндра R = 10 мкм, половина стороны ядра a = 5 мкм (см. рисунок 32).



Рисунок 32 – Схематичное изображение поперечного сечения гетероструктуры с ядром 2*a* × 2*a* и внешним радиусом *R*

С помощью программного пакета конечно-элементного анализа ANSYS Mechanical APDL найти напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры. Сравнить полученные зависимости с аналитическим решением. Исследовать сходимость решения по сетке. При решении задачи использовать термоупругую аналогию.

С помощью математического пакета MatLab и аналитического решения задачи построить карты напряжений несоответствия и зависимости напряжений несоответствия от координаты.

3. Аналитическое решение

Искомое поле упругих напряжений σ_{ij} , в нитевидном кристалле, вызванное собственной дилатацией включения *f*, определяется как сумма двух напряжений [9]:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{\infty} + \sigma_{ij}^{*}, \qquad (45)$$

где σ_{ij}^{∞} – известное поле напряжений такого включения в бесконечной упругой среде [11], σ_{ij}^{*} – дополнительное поле напряжений необходимое для выполнения граничных условий на свободной поверхности цилиндра:

$$\sigma_r(r=R) = 0 \quad \text{if} \quad \sigma_{r\sigma}(r=R) = 0. \tag{46}$$

В цилиндрической системе σ_{ij}^{∞} определяются следующими выражениями [11]:

$$\sigma_{ij}^{\infty} = C \Psi_{ij}^{\infty} |_{x_0 = -a}^{x_0 = a} |_{y_0 = -a}^{y_0 = a},$$
(47)

где $C = Gf(1+\nu)/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, одинаковые для материалов ядра и цилиндрической оболочки, f – параметр несоответствия. Функции Ψ_{ij}^{∞} определяются следующими соотношениями:

$$\Psi_r^{\infty} = \cos 2\varphi \tan^{-1}\Theta + \sin 2\varphi \ln \Lambda - \frac{\pi}{2}\cos^2\varphi \operatorname{sgn}\Theta, \qquad (48)$$

$$\Psi_{\varphi}^{\infty} = -\cos 2\varphi \tan^{-1}\Theta - \sin 2\varphi \ln \Lambda - \frac{\pi}{2}\sin^2\varphi \operatorname{sgn}\Theta, \qquad (49)$$

$$\Psi_{r\varphi}^{\infty} = \left(\frac{\pi}{4}\operatorname{sgn}\Theta - \tan^{-1}\Theta\right)\sin 2\varphi + \cos 2\varphi \ln\Lambda, \qquad (50)$$

$$\Psi_z^{\infty} = -\frac{\pi}{2} \operatorname{sgn} \Theta, \qquad (51)$$

где $\Lambda^2 = r^2 - 2\sqrt{2}ra\cos(\varphi - \theta) + 2a^2$, $r^2 = x^2 + y^2$, $\varphi = \tan^{-1}(y/x)$, $\theta = \tan^{-1}(y_0/x_0)$, $\Theta = \frac{r\sin\varphi - a\sqrt{2}\sin\theta}{r\cos\varphi - a\sqrt{2}\cos\theta}$.

Компоненты дополнительного поля напряжений в цилиндрической системе координат могут быть определены с помощью комплексных потенциалов [12]:

$$\sigma_r^* + \sigma_{\varphi}^* = 2[F'(\xi) + \overline{F'(\xi)}], \qquad (52)$$

$$\sigma_{\varphi}^{*} - \sigma_{r}^{*} + 2i\sigma_{r\varphi}^{*} = 2[\overline{\xi}F'(\xi) + \chi''(\xi)]e^{2i\varphi}, \qquad (53)$$

$$\sigma_r^* - i\sigma_{r\varphi}^* = F'(\xi) + \overline{F'}(\overline{\xi}) - [\overline{\xi}F'(\xi) + \chi''(\xi)]e^{2i\varphi},$$
(54)

где $i = \sqrt{-1}$, $F'(\xi)$ и $\chi''(\xi)$ неизвестные комплексные потенциалы зависящие от $\xi = x + iy = re^{i\varphi}$; $\overline{F'(\xi)}$ и $\overline{\chi''(\xi)}$ функции сопряжённые с $F'(\xi)$ и $\chi''(\xi)$, соответственно.

Комплексный вектор напряжений на наружной поверхности цилиндра при r = R имеет вид

$$\sigma_r^* - i\sigma_{r\varphi}^* = -4C\rho^2 \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} (\rho)^{4n} \exp 4n\varphi,$$
(55)

где $\rho = \sqrt{2}a/R, \rho < 1.$

С другой стороны, учитывая, что напряжения ограничены при $r \to 0$, запишем неизвестные функции $F'(\xi)$ и $\chi''(\xi)$ в виде степенных рядов:

$$F'(\xi) = \sum_{n=1}^{+\infty} A_n \xi^n, \qquad \chi''(\xi) = \sum_{n=1}^{+\infty} B_n \xi^n , \qquad (56)$$

где A_n и B_n – в общем случае комплексные постоянные. Таким образом, окончательное выражение для граничных условий на поверхности цилиндра принимает вид

$$-4C\rho^{2}\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{n}}{2n+1}(\rho)^{4n}e^{-4ni\varphi} = A_{0} + \overline{A_{0}} + \sum_{n=1}^{+\infty}\overline{A_{4n}}R^{4n}e^{-4ni\varphi}$$

$$-\sum_{n=1}^{+\infty}(4n-1)A_{4n}R^{4n}e^{4ni\varphi} - \frac{1}{R^{2}}\sum_{n=1}^{+\infty}B_{4n-2}R^{4n}e^{4ni\varphi}.$$
(57)

Приравнивая коэффициенты при $e^{4in\phi}$ в выражении (57), найдём неизвестные константы:

$$A_{0} = \overline{A_{0}} = 2C\rho^{2}; \quad A_{4n} = \overline{A_{4n}} = 4C\rho^{2} \frac{(-1)^{n}}{2n+1} \left(\frac{\rho}{R}\right)^{4n},$$

$$B_{4n-2} = -4C\rho^{2}(-1)^{n} \frac{4n-1}{2n+1} \frac{\rho^{4n}}{R^{4n-2}}.$$
(58)

В конечном итоге дополнительные компоненты поля напряжений σ_{ij}^* в цилиндрической системе координат имеют вид (приведены только ненулевые компоненты) [9]

$$\sigma_r^* = 4C\rho^2 \left[1 - \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} \left(2(2n-1) - (4n-1)\frac{R^2}{r^2} \right) \left(\frac{\rho r}{R}\right)^{4n} \cos 4n\varphi \right],$$
(59)

$$\sigma_{r\varphi}^{*} = 4C\rho^{2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n}}{2n+1} \left(4n - (4n-1)\frac{R^{2}}{r^{2}} \right) \left(\frac{\rho r}{R}\right)^{4n} \sin 4n\varphi,$$
(60)

$$\sigma_{\varphi}^{*} = 4C\rho^{2} \left[1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n}}{2n+1} \left(2(2n+1) - (4n-1)\frac{R^{2}}{r^{2}} \right) \left(\frac{\rho r}{R}\right)^{4n} \cos 4n\varphi \right], \quad (61)$$

$$\sigma_z^* = 16C\rho^2 \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{2n+4} \left(\frac{\rho r}{R}\right)^{4n} \cos 4n\varphi.$$
(62)

Поле напряжений в цилиндрическом нитевидном кристалле с ядром в виде длинной прямой призмы треугольного и шестиугольного поперечного сечения можно найти, например, в работе [13].

4. Порядок выполнения работы

Исходя из симметрии геометрии задачи, в расчётной модели будем рассматривать четверть гетероструктуры. Значения всех констант и нагрузок следует вводить в единицах системы СИ. Для решения задачи теории упругости удобно использовать модуль Structural, который исключает излишние опции программного пакета: Main Menu > Preferences > Structural.

4.1. Ввод параметров материалов

По условию задачи оба материала являются упругими и изотропными (так как заданы только две константы). Чтобы задать изотропный упругий материал в ANSYS, необходимо перейти в окно Materials Models: **Main Menu > Preprocessor > Material Props > Material Model** и выбрать: **Structural > Linear > Elastic > Isotropic**, затем ввести модуль Юнга (EX) и коэффициент Пуассона (PRXY). Для того чтобы задать второй материал во вкладке Material Models, необходимо выбрать **Material > New Model**. (см. рисунок 17).

Чтобы задать коэффициент линейного теплового расширения, необходимо выбрать **Main Menu** > **Preprocessor** > **Material Props** > **Material Models**. В появившемся окне выбрать: **Structural** > **Thermal Expansion** > **Secant Coefficient** > **Isotropic** и ввести необходимые значения (ALPX) (см. рисунок 27). Коэффициент линейного теплового расширения для второго материала задаётся аналогичным образом. Напомним, что выбор значений данных коэффициентов осуществляется таким образом, чтобы выполнялось равенство $f = (\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T$.

4.2. Выбор элементов и их свойств

Для решения задачи МКЭ необходимо выбрать тип элемента. Для повышенной точности выберем квадратный восьмиузловой элемент: **Main Menu** > **Preprocessor** > **Element Type** > **Add/Edie/Delete** > **Add**, выберем группу элементов Structural, solid и в ней Quad 8 node 183 (см. рисунок 18,а). Чтобы задать приближение плоской деформации, в оставшемся окне необходимо нажать Options и выбрать Element behavior K3 – plane strain).

4.3. Построение геометрии модели

Исходя из симметрии задачи, построим только четверть гетероструктуры, для этого необходимо:

1) Создать сектор – четверть рассматриваемой области. Для этого используем функцию построения окружности на плоскости: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Circule > By Dimensions (см. рисунок 28,33 а).

2) Создать квадрат для моделирования границы раздела: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Create > Areas > Rectangle > By Dimensions. Затем необходимо удалить плоскость, чтобы остались только линии: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Delete > Areas Only, и выбираем построенный ранее квадрат. Теперь необходимо удалить лишние линии: Main Menu > Preprocessor > Modeling > Delete > Line and Below.

3) Создать границы раздела при помощи операции вычитания объектов. Разделим исходный сектор на две области: Main Menu > **Preprocessor** > **Modelling** > **Operate** > **Booleans** > **Divide** > **Area by Line**. В появившемся окне нужно выбрать поверхность, из которой происходит вычитание, нажать ОК, затем выбрать вычитаемую линию (см. рисунок 33).



Рисунок 33 – Построение геометрической модели и добавление границы раздела

4.4. Создание сетки конечных элементов

Для создания сетки переходим в Main Menu > Preprocessor > Meshing > Mesh Tool. Для каждой задачи подбирается индивидуальная сетка, отвечающая всем требованиям решаемой задачи. В нашем случае геометрия модели имеет концентратор напряжений – вершину ядра, температурное поле распределено равномерно. Таким образом, необходимо использовать регулярную сетку; возможно сгущение сетки у вершины ядра.

С помощью команды Mesh Tool > Global > Set выбираем размер элемента. Создаём сетку для первого материала: Mesh Tool > Quad > Mapped > Mesh. Команда Quad соответствует выбору квадратных элементов. Команда Марреd используется для построения регулярной сетки. Теперь необходимо создать сетку для второго материала. Для этого выбираем Mesh Tool > Element Attributes > Global > Set и выбираем Material number 2. Затем создаём сетку Mesh Tool > Quad > Mapped > Mesh (см. рисунок 34).



Рисунок 34 – Создание регулярной сетки

4.5. Граничные условия и нагрузки

Поскольку данная задача решается в симметричной постановке, то необходимо запретить нормальные перемещения на границах разреза. Для этого используется команда Displacement: **Main Menu** > **Solution** > **Define Loads** > **Apply** > **Structural** > **Displacement** > **On Lines**. После этого следует выбрать необходимые линии, а в списке DOFs to be constrained – фиксируемые степени свободы.

Затем нужно приложить температурное поле: Main Menu > Solution > Define Loads > Apply > Structural > Temperature > On Areas и ввести соответствующее значение.

4.6. Решение задачи и обработка результатов

После того как заданы все граничные условия и выбраны все нагрузки, можно перейти к решению задачи. Для это используем команду Solve: **Main Menu** > **Solution** > **Solve** > **Current LS**.

Для обработки полученных результатов используется вкладка General Postproc. Чтобы вывести на экран сдвиговую компоненту тензора напряжений, необходимо использовать Contour Plot: Main Menu > General Postproc > Plot Results > Contour Plot > Nodal Solution > Stress> XY Shear stress (см. рисунок 35).



Рисунок 35 – Сдвиговая компонента тензора напряжений

Чтобы получить зависимость сдвиговых напряжений от координаты на одной из сторон гетероструктуры, необходимо создать область на этой стороне: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Define Path > By Nodes, и выбрать первый и последний узел, название области и количество разбиений (нет смысла задавать количество разбиений меньше, чем шаг сетки).

После того как область определена, в неё необходимо записать интересующие нас значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Map Onto Paths. Затем вводим имя нашей области и выбираем

сдвиговые напряжения (Item, Comp Item to be mapped > Stress > XY-shear SY).

После записи значений в нашу область мы можем вывести график или записанные значения: Main Menu > General Postproc > Path Operations > Plot Path Item > On Graph или List Path Item (см. рисунок 36).



Рисунок 36 – Зависимость сдвиговых напряжений от координаты в оболочке нитевидного кристалла

Для исследования сходимости численного решения по сетке конечных элементов необходимо выбрать некоторую точку, привязанную к геометрии объекта расчётов, и записать значение исследуемой функции в данной точке. Затем увеличить количество элементов сетки, повторить расчёт и снова записать полученное значение исследуемой функции в данной точке. С увеличением числа элементов сетки различия между функции в конкретной точке значениями должны уменьшаться. Измельчение сетки (увеличение числа элементов сетки) необходимо проводить до тех пор, пока разница между значениями не выйдет на насыщение. Для исследования сходимости решения по сетке рекомендуется проводить не менее пяти расчётов на сетках с различным количеством элементов.

5. Использование MatLab для анализа аналитического решения

Поскольку аналитическое решение данной задачи значительно сложнее предыдущих, приведём текст программы для математического

пакета MatLab, позволяющей получить карты напряжений и зависимости напряжений от координаты по аналитическому решению. Программа состоит из тела (ввод начальных параметров, построение карт и графиков) и вспомогательной функции для расчёта напряжений.

Тело программы имеет следующий вид:

```
clear all% обнуление всех переменных
R = 10; % радиус цилиндрической оболочки
а = 5;% половина стороны ядра
Rho = a*sqrt(2)/R;
f = 0.04;% несоответствие
v = 0.3;%коэффициент Пуассона
G = 210/2/(1+v);% модуль сдвига
C=G*f*(1+v)/(2*pi*(1-v))
X = [0:R/250:R/2];
Y=a-0.01;
%X=[0:R/100:R]; % переменная для построения карты
%Y=[0:R/100:R]; % переменная для построения карты
for i=1:length(X)
    for j=1:length(Y)
Gxy(i,j) = Stressxy(X(i),Y(j),R,Rho,a,C);
    end:
end;
X1=[0:a/30:a];
X2=[0.29707E-05;-0.96980E-01;-0.19428;-0.29218;-0.39113;-0.49135;-0.59316;-
0.69719;-0.80360;-0.91277;-1.0256;-1.1423;-1.2632;-1.3899;-1.5224;-1.6615;-
1.8094; -1.9665; -2.1341; -2.3159; -2.5129; -2.7283; -2.9693; -3.2398; -3.5478; -
3.9144;-4.3582;-4.9183;-5.7200;-7.0274;-12.229];% численное решение,
полученное в ANSYS
hold on
plot(X1,X2,'go') % вывод численного решения
plot(X,Gxy)% вывод аналитического решения
% ПОСТРОЕНИЕ КАРТЫ
% hold on
% axis square
% colormap('winter')
%q=[5,4,3,2,1,0.5,0.25,0,-1,-2,-3,-4,-5,-0.25,-0.5,-8,-12];% выбор изолиний
% contour(X,Y, Gxy,q,'ShowText','on')% команда для построения карты
```

Вызываемая функция Stressxy имеет следующий вид:

58

```
function Gxy=Stressxy(X,Y,R,Rho,a,C)
r=sqrt(X^{2}+Y^{2});
o=atan(X/Y);
Gro=0;Grr=0;Goo=0;
for n=1:50 %количество слагаемых в ряде
    Grol=((-1)^{(n+1)}/(2*n+1))*(4*n-(4*n-1))
1)*(R/r)^2)*(Rho*r/R)^(4*n)*sin(4*n*o);
    Grr1=((-1)^(n)/(2*n+1))*((4*n-1)*(R/r)^2-2*(2*n-
1))*(Rho*r/R)^(4*n)*cos(4*n*o);
    Gool=((-1)^(n)/(2*n+1))*((4*n-1)*(R/r)^2-
2*(2*n+1))*(Rho*r/R)^(4*n)*cos(4*n*o);
    Gro=Gro+Gro1;
    Grr=Grr+Grr1;
    Goo=Goo+Goo1;
    Gro1=0;Grr1=0;Goo1=0;
end
```

```
GRO=4*C*Rho^2*Gro;% сдвиговая компонента тензора напряжений
GRR=4*C*Rho^2*(1+Grr);% радиальная компонента тензора напряжений
GOO=4*C*Rho^2*(1-Goo);% окружная компонента тензора напряжений
Gxyinf=C*log(((X-a)^2+(Y-a)^2)/((X+a)^2+(Y-
a)^2))+log(((X+a)^2+(Y+a)^2)/((X-a)^2+(Y+a)^2));
Gxy=(GRR-GOO)*X*Y/(X^2+Y^2)+GRO*((X^2-Y^2)/(X^2+Y^2))+Gxyinf;% сдвиговая
компонента тензора напряжений
```

В программе используются специальные символы и функции:

«+» – сложение;

«-» – вычитание;

«*» – умножение;

«/» – деление;

«.*» или «./» – точка ставится для умножения или деления матриц; «^» – возведение в степень;

«sqrt» – извлечение квадратного корня;

«log» – натуральный логарифм;

«%» – комментарий.

Для запуска программы необходимо нажать кнопку «Run» во вкладке «EDITOR».

Поле сдвиговых напряжений (а) и зависимость сдвиговых напряжений от координаты вдоль стороны включения (б), полученные с помощью описанной выше программы, даны на рисунке 37.



Рисунок 37 – Зависимости, полученные в математическом пакете MatLab. (а) карта сдвиговой компоненты тензора напряжений, (б) зависимость сдвиговой компонента тензора напряжений от координаты

6. Требования к отчёту

Отчёт должен содержать исходные данные, постановку задачи, обоснование расчётной модели, иллюстрацию сетки конечных элементов,

результаты расчётов. Должны быть представлены карты и графики ненулевых компонент тензора напряжений (кроме σ_z), причём на графиках, полученных с помощью аналитического решения, должны быть отмечены точки, полученные с помощью МКЭ. Должно быть приведено сравнение численного и аналитического решения с указанием погрешности и сделаны соответствующие выводы. Должна быть исследована сходимость численного решения по сетке конечных элементов в зависимости от количества элементов или узлов сетки.

7. Варианты задания

Задача 1. Определить напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры в виде цилиндрического нитевидного кристалла с ядром в виде длинного параллелепипеда квадратного поперечного сечения, расположенного в центре цилиндрической оболочки. f – несоответствие между параметрами кристаллических решёток материалов ядра и оболочки, R – внешний радиус цилиндра, a – половина стороны ядра. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений (кроме σ_z) и зависимости ненулевых компонент тензора напряжений от радиус-вектора.

Материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга *Е* и коэффициенты Пуассона *v*.

Вариант 1. R = 15 мкм, a = 9 мкм, f = 0,1, E = 121 ГПа, v = 0,39. Вариант 2. R = 15 мкм, a = 7 мкм, f = 0,2, E = 121 ГПа, v = 0,39. Вариант 3. R = 15 мкм, a = 5 мкм, f = 0,3, E = 121 ГПа, v = 0,39. Вариант 4. R = 15 мкм, a = 3 мкм, f = 0,25, E = 121 ГПа, v = 0,39.

Задача 2. Определить напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры в виде цилиндрического нитевидного кристалла с ядром в виде длинной прямой призмы треугольного поперечного сечения, расположенного в центре цилиндрической оболочки. f – несоответствие между параметрами кристаллических решёток материалов ядра и оболочки, R – внешний радиус цилиндра, a – сторона ядра. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений (кроме σ_z) и зависимости ненулевых компонент тензора напряжений от радиус-вектора.

Материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга *E* и коэффициенты Пуассона *v*.

Вариант 1. R = 15 мкм, a = 22 мкм, f = 0,1, E = 83 ГПа, v = 0,37. Вариант 2. R = 15 мкм, a = 18 мкм, f = 0,2, E = 83 ГПа, v = 0,37. Вариант 3. R = 15 мкм, a = 14 мкм, f = 0,3, E = 83 ГПа, v = 0,37. Вариант 4. R = 15 мкм, a = 10 мкм, f = 0,25, E = 83 ГПа, v = 0,37.

Задача 3. Определить напряжённо-деформированное состояние гетероструктуры в виде цилиндрического нитевидного кристалла с ядром в виде длинной прямой призмы шестиугольного поперечного сечения, расположенного в центре цилиндрической оболочки. f – несоответствие между параметрами кристаллических решёток материалов ядра и оболочки, R – внешний радиус цилиндра, a – сторона ядра. Построить карты ненулевых компонент тензора напряжений (кроме σ_z) и зависимости ненулевых компонент тензора напряжений от радиус-вектора.

Материалы ядра и оболочки имеют одинаковые модули Юнга *Е* и коэффициенты Пуассона *v*.

Вариант 1. R = 15 мкм, a = 13 мкм, f = 0,1, E = 83 ГПа, v = 0,37. Вариант 2. R = 15 мкм, a = 10 мкм, f = 0,2, E = 83 ГПа, v = 0,37. Вариант 3. R = 15 мкм, a = 7 мкм, f = 0,3, E = 83 ГПа, v = 0,37. Вариант 4. R = 15 мкм, a = 4 мкм, f = 0,25, E = 83 ГПа, v = 0,37.

Лабораторная работа №6. Релаксация напряжений несоответствия. Призматические дислокационные петли в гетероструктурах

1. Цель работы

Знакомство с математическим пакетом MatLab и его использование для обработки аналитических решений физических и механических задач. Постановка задачи о релаксации напряжений несоответствия. Развитие навыков обработки полученных результатов, построение графиков и карт.

2. Краткое описание задачи

Определить критические параметры сферической гетероструктуры типа «ядро-оболочка», влияющие на образование призматических

дислокационных петель (ПДП). Построить карты изменения полной энергии гетероструктуры при формировании прямоугольной ПДП. *R* – внешний радиус гетероструктуры, *r*₀ – радиус ядра, $2a \times 2c$ – размеры прямоугольной ПДП (см. рисунок 38).



Рисунок 38 – Гетероструктура типа «ядро-оболочка» в виде сферически симметричной частицы с прямоугольными ПДП на внутренней и внешней границах раздела в гетероструктуре. (а) сферическая геометрия и (б) плоская геометрия задачи

С помощью математического пакета MatLab необходимо получить зависимости критического несоответствия f_c от толщины оболочки гетероструктуры h, а также построить карты изменения полной энергии системы ΔW при зарождении прямоугольной ПДП.

3. Аналитическое решение

Рассмотрим модель сферически симметричной гетероструктуры типа «ядро-оболочка» со сплошным ядром, с внешним радиусом R и толщиной оболочки h, на внутренней или внешней границе которой образуется ПДП, прорастающая либо в ядро, либо в оболочку (см. рисунок 38). Формирование такой ПДП энергетически выгодно, когда сопутствующее изменение полной энергии гетероструктуры ΔW отрицательно. Полное изменение энергии ΔW состоит из упругой энергии ПДП W_{el} , энергии её ядра W_c и энергии взаимодействия ПДП с упругим полем несоответствия гетероструктуры W_{int} [14]:

$$\Delta W = W_{el} + W_c + W_{int} \,. \tag{63}$$

Обычно подобные задачи решаются в приближении классической линейной теории упругости. В данном случае допустим, что толщина оболочки намного меньше внешнего радиуса гетероструктуры: h << R. Последнее допущение позволит нам перейти от сферической геометрии задачи к плоской при расчёте W_{el} и W_{int} и рассматривать прямоугольную ПДП с размерами $2a \times 2c$ (см. рисунок 38,б). В этом случае W_{int} определяется по формуле [15]:

$$W_{el} = \frac{Db^2 L}{2},\tag{64}$$

где $D = G/[2\pi(1-v)], G - модуль сдвига, v - коэффициент Пуассона, b$ модуль вектора Бюргерса ПДП, L – эффективная длина периметра ПДП, определяемая следующими выражениями:

$$\begin{split} L &= S_1 + 2S_2 + S_3 + [3 - 4\nu(3 - 2\nu)]S_4 + 2\frac{1 - 2\nu(6 - 11\nu + 8\nu^3)}{(1 - 2\nu)^2}S_5 \\ &- \frac{129 - 2\nu\{234 - \nu[245 - 4\nu(5 + 16\nu)]\}}{3(1 - 2\nu)^2}S_6, \\ S_1 &= c \bigg(2ln\frac{K_3 + c}{K_3 - c} - \ln\frac{\sqrt{c^2 + (d - a + b/2)^2} + c}{\sqrt{c^2 + (d - a + b/2)^2} - c} - \ln\frac{K_2 + c}{K_2 - c}\bigg), \\ S_2 &= 2c\ln\frac{4c}{r_0} + 2a\ln\frac{4a}{r_0} - c\ln\frac{K_4 + c}{K_4 - c} - a\ln\frac{K_4 + a}{K_4 - a} - 4(c + a - K_4), \\ S_3 &= \frac{8(1 - \nu)(1 - 2\nu)a^2d}{c^2} + \frac{3a^2}{d} - \frac{2a^2(c^2 + d^2)K_3}{c^2d^2}, \\ S_4 &= \frac{2d^2K_3 - (d - a)^2K_1 - (d + a)^2K_2}{3c^2}, \\ S_5 &= 2d\ln\frac{d + K_3}{c} - (d - a)\ln\frac{d - a + K_1}{c} - (d + a)\ln\frac{d + a + K_2}{c^2d^2}, \end{split}$$

$$S_5 = 2d \ln \frac{d+K_3}{d} - (d-a) \ln \frac{d-a+K_1}{d-a} - (d+a) \ln \frac{d+a+K_2}{d+a},$$

$$S_6 = 2K_3 - K_1 - K_2, \quad K_{1,2}^2 = c^2 + (d \mp a)^2, \quad K_3^2 = c^2 + d^2, \quad K_4^2 = c^2 + a^2,$$

где параметр *d* принимает различные значения в зависимости от положения ПДП в системе: $d = d_1 = h - a$ для ПДП, зародившейся на границе раздела и растущей в оболочку (петля типа 1); $d = d_2 = a$ для ПДП, зародившейся на свободной поверхности оболочки (петля типа 2); $d = d_3 = h + a$ для ПДП, зародившейся на границе раздела и растущей в ядро (петля типа 3).

Энергии ядер этих петель, соответственно W_{c1} , W_{c2} и W_{c3} , аппроксимируются стандартным образом [16]:

$$W_{c1} = W_{c3} \approx 4(a+c)\frac{Db^2}{2},$$
 (65)

$$W_{c2} \approx 4 \left(a + \frac{c}{2} \right) \frac{Db^2}{2}.$$
 (66)

Энергии взаимодействия указанных петель с упругим полем несоответствия в сферически симметричной гетероструктуре типа «ядрооболочка» могут быть определены как работа по зарождению ПДП в поле напряжения гетероструктуры [14]:

$$W_{int1} = -\frac{4G(1+\nu)f(R-h)^{3}b}{3(1-\nu)} \left(\frac{4ac}{R^{3}} - \frac{\sqrt{c^{2} + (R-h+2a)^{2}}}{c(R-h+2a)} + \frac{\sqrt{c^{2} + (R-h)^{2}}}{c(R-h)}\right),$$
(67)

$$W_{int2} = -\frac{4G(1+\nu)f(R-h)^{3}b}{3(1-\nu)} \left(\frac{4ac}{R^{3}} - \frac{\sqrt{c^{2}+R^{2}}}{cR} + \frac{\sqrt{c^{2}+(R-2a)^{2}}}{c(R-2a)}\right), \quad (68)$$

$$W_{int3} = -\frac{16G(1+\nu)f\,cab}{3(1-\nu)} \left(1 - \frac{(R-h)^3}{R^3}\right)$$
(69)

В случае образования ПДП в гетероструктуре цилиндрической геометрии энергии взаимодействия примут следующий вид [9]:

$$W_{int1} = W_{int2} = -8abcGf \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{r_0^2}{R^2},$$
(70)

$$W_{int3} = -8abcGf \frac{1+\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{r_0^2}{R^2}\right)$$
(71)

4. Порядок выполнения работы

Для построения карт изменения полной энергии системы и зависимостей критического несоответствия от толщины оболочки гетероструктуры при зарождении ПДП необходимо внести соответствующие аналитические формулы в математический пакет MatLab.

Для примера рассмотрим зарождение квадратной ПДП на границе раздела ядра и оболочки с последующим ростом ПДП в ядро гетероструктуры (петля типа 3 на рисунке 38).

Построим карты изменения полной энергии системы для следующих параметров задачи: R = 100 нм, h = 5 нм, $r_0 = b$, v = 0,25, f = 0,042, b = 0,38 нм.

Тело программы для построения карт изменения полной энергии системы в пространстве размеров петли и в единицах *Gb*³ имеет вид:

```
clear all % обнуление всех переменных
hold on % данная команда позволяет исполнять все графические команды на
одном графике
%grid on % отрисовка сетки
v = 0.25 % коэффициент Пуассона
bb = 0.38 % модуль вектора Бюргерса
h=5 % толщина оболочки в нм
R = 100 % радиус наночастицы в нм
f = 0.042 \hat{\$} параметр несоответствия
x1 = [2:0.5:13]; % координата петли
y1 = [2:0.5:13]; % координата петли
[x,y] = meshqrid(x1,y1) % пространство размеров петли
r0 = bb; % радиус ядра дислокации
D = h+bb*y/2;
K2c=sqrt((bb*x/2).^2 + (D+bb*y/2).^2);
Klc=sqrt((bb*x/2).^2 + (D-(bb*y)/2).^2);
K3c=sqrt((bb*x/2).^2 + (D).^2);
K4c=sqrt((bb*x/2).^2 + (bb*y/2).^2);
S6c=2*K3c-K1c-K2c;
S5c=2*D.*log(((D)+K3c)./(D))-
 (D+(bb*y)/2).*log(((D+(bb*y)/2)+K2c)./(D+(bb*y)/2))-(D-(bb*y)/2).*log(((D-(bb*y)/2))))
 (bb*y)/2)+K1c)./(D-(bb*y)/2));
S4c=(2*(D).^2.*K3c-(D+(bb*y)/2).^2.*K2c-(D-
(bb*y)/2).^2.*K1c)/3./(bb*x/2).^2;
S3c=(8*(1-v)*(1-2*v)*(bb*y/2).^2.*(D))./(bb*x/2).^2+3*(bb*y/2).^2./(D)-
 (2*(bb*y/2).^2.*((bb*x/2).^2 + (D).^2).*K3c)./((bb*x/2).^2.*(D).^2);
S2c=2*(bb*x/2).*log(4*(bb*x/2)/r0)+2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2).*log(4*(bb*y/2)/r0)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(bb*y/2)-2*(b
 (bb*x/2).*log((K4c+(bb*x/2))./(K4c-(bb*x/2)))-
 (bb*y/2).*log((K4c+(bb*y/2))./(K4c-(bb*y/2)))-4*((bb*x/2) + (bb*y/2)-K4c);
S1c=(bb*x/2).*(2*log((K3c + (bb*x/2))./(K3c - (bb*x/2)))-
log((sqrt(bb*x/2).^2 + ((D-(bb*y)/2) +
r0/2).^2)+(bb*x/2))./(sqrt((bb*x/2).^2 + ((D-(bb*y)/2) + r0/2).^2)-
 (bb*x/2)))-log((K2c + (bb*x/2))./(K2c - (bb*x/2))));
```

```
L1=S1c+2*S2c+S3c+(3-4*v*(3-2*v))*S4c+2*S5c*(1-2*v*(6-11*v+8*v^3))/(1-
2*v)^2-S6c*(129-2*v*(234-v*(245-4*v*(5+16*v))))/(3*(1-2*v)^2);
CC = (R - h)^3*f*(1/1.8); % вспомогательная константа
Wint = (4*CC/(bb^2*(R - h)^3))*(1-((R-h)/R)^3)*4.*(bb*x/2).*(bb*y/2); %
Энергия взаимодействия, в единицах Gb^3
Wel = L1/(4*pi*(1-v)*bb); % упругая энергия петли, в единицах Gb^3
Wc = ((bb*x/2) + (bb*y/2))/((1-v)*bb*pi); % энергия ядра дислокации, в
единицах Gb^3
AA = Wel-Wint+Wc;
axis square % создания квадратной рамки
n = [0,1,2,4,6,8,10,12,14]; % выбор изолиний
contour(x,y,AA,n,'ShowText','on') % команда для построения карты
```

Для запуска программы необходимо нажать кнопку «Run» во вкладке «EDITOR». Результатом выполнения программы является карта энергий (см. рисунок 39):



Рисунок 39 – Карты изменения энергии ΔW в пространстве относительных размеров ПДП (2*a*/*b*, 2*c*/*b*) в единицах Gb^3

Теперь построим зависимости критического несоответствия f_c от толщины оболочки h при зарождении квадратной ПДП в ядре гетероструктуры для следующих параметров задачи: R = 60 нм, $r_0 = b$, v = 0.25, f = 0.042, b = 0.3 нм, a/c = 1.

Критическое несоответствие f_c можно найти из равенства $\Delta W = 0$ (см. выражение (63), которое сразу даёт

$$f_{c} = \frac{W_{el} + W_{c(i)}}{W_{int(i)}^{*}},$$
(72)

где $W_{int(i)}^* = W_{int(i)} / f$.

Тело программы имеет следующий вид:

```
clear all
hold on
grid on
v = 0.25 % коэффициент Пуассона
А = 1 % отношение размера петли а к размеру петли с
В = 0.5 % отношение модуля вектора Бюргерса к размеру петли с
b = 0.3 % модуль вектора Бюргерса
RR = 100 % отношение радиуса нанопроволоки к размеру петли с
Н = [4:0.5:60]; % отношение толщины оболочки наночастицы к размеру петли с
R = 1/B*b*RR; % радиус наночастицы в нм
h = 1/B*b*H; % толщина оболочки наночастицы в нм
D=H+A;
K2c=sqrt(1+(D+A).^{2});
K1c=sqrt(1+(D-A).^2);
K3c=sqrt(1+(D).^2);
K4c=sqrt(1+A^2);
S6c=2*K3c-K1c-K2c;
S5c=2*(D).*log(((D)+K3c)./(D))-(D+A).*log(((D+A)+K2c)./(D+A))-(D-
A).*log((D-A+K1c)./(D-A));
S4c=(2*(D).^2.*K3c-(D+A).^2.*K2c-(D-A).^2.*K1c)/3;
S3c=8*(1-v)*(1-2*v)*A^2*(D)+3*A^2./(D)-(2*A^2*(1+(D).^2).*K3c)./(D).^2;
S2c=2*log(4/B)+2*A*log(4*A/B)-log((K4c+1)./(K4c-1))-A*log((K4c+A)./(K4c-
A))-4*(1+A-K4c);
S1c=2*log((K3c+1)./(K3c-1))-log((sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2).^2)+1)./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2)))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2)))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2))./(sqrt(1+(D-A+B/2)))./(sqrt(1+(D-A+B/
A+B/2).^2)-1))-log((K2c+1)./(K2c-1));
L1=S1c+2*S2c+S3c+(3-4*v*(3-2*v))*S4c+2*S5c*(1-2*v*(6-11*v+8*v^3))/(1-
2*v) ^2-S6c* (129-2*v* (234-v* (245-4*v* (5+16*v)))) / (3* (1-2*v) ^2);
Wint=(4/(1.8*В^2)).*(1-((R-h)/R).^3)*4*А; % энергия взаимодействия, в
единицах Gb3
Wel=L1/(4*pi*(1-v)*В); % упругая энергия петли, в единицах Gb<sup>3</sup>
Wc=(A+1)/((1-v)*B*pi); % энергия ядра дислокации, в единицах Gb<sup>3</sup>
f=(Wel+Wc)./Wint; % определение критического несоответствия
plot(h,f,'r') % команда для построения графика
```

Для запуска программы необходимо нажать кнопку «Run» во вкладке «EDITOR». Результатом выполнения программы является следующий график (см. рисунок 40):



Рисунок 40 – Зависимость критического несоответствия f_c от толщины оболочки h

5 Требования к отчёту

Отчёт должен содержать исходные данные, постановку задачи, обоснование расчётной модели, результаты расчётов. Должны быть представлены карты изменения энергии гетероструктуры при зарождении соответствующей петли. Должны быть представлены зависимости критического несоответствия от толщины оболочки при зарождении соответствующей петли. Должны быть сделаны выводы о возможности образования соответствующей петли.

6. Варианты задания

Задача 1. Найдите критическое несоответствие и постройте карты изменения полной энергии гетероструктуры сферической геометрии при формировании прямоугольной ПДП типа (i) (см. рисунок 38). R – радиус частицы, h – толщина оболочки частицы, v – коэффициент Пуассона = 0,25, f – несоответствие, b – модуль вектора Бюргерса, a и c – размеры петли.

Вариант 1 *i* =2, *R* = 100 нм, *h* = 5 нм, *f* = 0,11, *b* = 0,3 нм, *a*/*c* = 0,2, *c*/*b* = 10, *v* = 0,3. Вариант 2 i=2, R=100 нм, h=15 нм, f=0,04, b=0,3 нм, a/c=0,2, c/b=10, v=0,3. Вариант 3 i=1, R=100 нм, h=5 нм, f=0,11, b=0,3 нм, a/c=5, c/b=2, v=0,3. Вариант 4 i=1, R=100 нм, h=15 нм, f=0,04, b=0,3 нм, a/c=5, c/b=2, v=0,3. Вариант 5 i=3, R=100 нм, h=5 нм, f=0,11, b=0,3 нм, a/c=0,2, c/b=10, v=0,3. Вариант 6 i=3, R=100 нм, h=15 мкм, f=0,04, b=0,3 нм, a/c=5, c/b=2, v=0,3.

Задача 1. Найдите критическое несоответствие и постройте карты изменения полной энергии гетероструктуры цилиндрической геометрии при формировании прямоугольной ПДП типа (i) (см. рисунок 38). R – радиус частицы, h – толщина оболочки частицы, v – коэффициент Пуассона = 0,25, f – несоответствие, b – модуль вектора Бюргерса, a и c – размеры петли.

Вариант 1 i=2, R=100 нм, h=5 нм, f=0,11, b=0,3 нм, a/c=0,2, c/b=10, v=0,3. Вариант 2 i=2, R=100 нм, h=15 нм, f=0,04, b=0,3 нм, a/c=0,2, c/b=10, v=0,3. Вариант 3 i=1, R=100 нм, h=5 нм, f=0,11, b=0,3 нм, a/c=5, c/b=2, v=0,3. Вариант 4 i=1, R=100 нм, h=15 нм, f=0,04, b=0,3 нм, a/c=5, c/b=2, v=0,3. Вариант 5 i=3, R=100 нм, h=5 нм, f=0,11, b=0,3 нм, a/c=0,2, c/b=10, v=0,3. Вариант 6 i=3, R=100 нм, h=15 мкм, f=0,04, b=0,3 нм, a/c=5, c/b=2, v=0,3.

Используемые литературные источники

- 1. Кац А. М. Теория упругости. Санкт-Петербург: Лань, 2002. 208 с.
- 2. Окопный Ю. А., Радин В. П., Чирков В. П. Механика материалов и конструкций. Москва: Машиностроение, 2001. 407 с.
- 3. Хан Х. Теория упругости. Основы линейной теории и её применения. Москва: Мир, 1988. 344 с.
- 4. Тимошенко С. П., Гудьер Д. Теория упругости. Москва: Наука, 1975. 576 с.
- 5. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела. Москва: Наука, 1977. 416 с.

- 6. Нотт Д. Ф. Основы механики разрушения. Москва: Металлургия, 1978. 256 с.
- 7. Петерсон Р. Коэффициенты концентрации напряжений. Москва: Мир, 1977. 302 с.
- Sheinerman A. G., Gutkin M. Y. Misfit Disclinations and Dislocation Walls in a Two-Phase Cylindrical Composite // Phys. status solidi. 2001. T. 184. № 2. C. 485–505.
- 9. Смирнов А. М. Дислокационные модели релаксации напряжений несоответствия в цилиндрических, сферических и плоских композитных структурах: дис. ... канд. физ.-мат. наук Санкт-Петербург, 2017. 174 с.
- 10.Gutkin M. Y. и др. Misfit dislocation loops in hollow core-shell nanoparticles // Scr. Mater. 2014. T. 83. C. 1–4.
- 11. Малышев К. Л. и др. Поля напряжений и дифракционный контраст стержнеобразных дефектов в кремнии // Физика Твёрдого Тела. 1988. Т. 30. № 7. С. 2040–2045.
- 12. Мусхелишвили Н. И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. Москва: Издательство Наука, 1966. 709 с.
- 13.Красницкий С. А. Дислокационные механизмы релаксации остаточных напряжений в неоднородных наноструктурах пониженной размерности: дис. ... канд. физ.-мат. наук Санкт-Петербург, 2019. 147 с.
- 14.Гуткин М. Ю., Смирнов А. М. Зарождение прямоугольных призматических дислокационных петель в оболочках и ядрах композитных наночастиц // Физика Твёрдого Тела. 2014. Т. 56. № 4. С. 703–710.
- 15.Gutkin M. Y., Ovid'ko I. A., Sheinerman A. G. Misfit dislocations in composites with nanowires // J. Physics-Condensed Matter. 2003. T. 15. № 21. C. 3539–3554.
- 16.Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. Москва: АТОМИЗДАТ, 1972. 600 с.

Приложение А Пример оформления отчёта

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «Национальный исследовательский университет ИТМО»

Отчёт о лабораторной работе № 1

«Название лабораторной работы»

Задача А. Вариант В

Выполнили: А.М. Смирнов А.В. Кремлёва

Проверил А.Е. Романов

Санкт-Петербург 2021
1. Постановка задачи

Указываются цель и задачи лабораторной работы. Приводится описание решаемой проблемы.

2. Аналитическое решение задачи

Приводятся формулы, используемые в расчётах в пункте 5.

3. Конечно-элементная постановка задачи

Обосновывается выбор геометрии, тип элемента, постановка граничных и начальных условий. Приводится иллюстрация сетки, например:



Рисунок Х Конечно-элементная постановка задачи

4. Конечно-элементное решение задачи

Приводятся рассчитанные карты и их описание, например:



Рисунок У Карты (а) радиальных напряжений σ_{rr} , (б) окружных напряжений σ_{qq} и (в) перемещений u_r в кольцевой пластине



Рисунок У (продолжение) Карты (а) радиальных напряжений σ_{rr} , (б) окружных напряжений $\sigma_{\varphi\varphi}$ и (в) перемещений u_r в кольцевой пластине

5. Сравнение аналитического и численного решений

численное решение аналитическое решение

Приводится сравнение аналитического и численного решения с указанием переносностей, например:





х, м	$\delta(u_r)$, %	$\delta(\sigma_r)$, %	$\delta(\sigma_{artheta})$, %
0,2000	0,0011	0,0300	0,0895
0,2100	0,0082	0,0299	0,0751
0,2200	0,0133	0,0320	0,0715

Таблица 1 – погрешности численного решения для *u_r*, *σ_{rr}* и *σ_{φφ}* в кольцевой пластине

6. Сходимость метода конечных элементов

Приводится анализ сходимости численного решения, например:



Рисунок ХХ – Сходимость метода конечных элементов

гиолици 2 Сходимость методи коне шых элементов			
Количество узлов сетки	$\sigma_{\varphi\varphi}\big _{r=(b-a)/2}$, MПa	δ, %	
341	-10,353	0,164	
1281	-10,366	0,038	
4961	-10,369	0,009	
30401	-10,370	0	
Аналитическое решение	-10,37	70	

Таблица 2 – Сходимо	сть метода конечных элементов
---------------------	-------------------------------

7. Заключение

Раздел заключение должен содержать краткое описание всех результатов выполненной работы и обобщающий вывод.

8. Список используемых источников Список источников приводится согласно Гост 7.32-2017.

Андрей Михайлович Смирнов Арина Валерьевна Кремлева Владислав Евгеньевич Бугров Алексей Евгеньевич Романов

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ МАТЕРИАЛОВ

Учебно-методическое пособие

В авторской редакции Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО Зав. РИО Н.Ф. Гусарова Подписано к печати Заказ № Тираж Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49 А