



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures



http://dream-journal.org



ISSN 2410-9908

Editor-in-Chief: Sergey V. Smirnov Deputy Editors-in-Chief: Sergey V. Gladkovsky Deputy Editors-in-Chief: Evgenii Yu. Prosviryakov

Editorial Council

Anatoly A. Burenin (Russia) Irina G. Goryacheva (Russia) Janez Grum (Slovenia) Mikhail P. Lebedev (Russia) Leopold I. Leontiev (Russia) Evgeny V. Lomakin (Russia) Valery P. Matveenko (Russia) Nikolay A. Makhutov (Russia) Nikita F. Morozov (Russia) Vladimir V. Moskvichev (Russia) Sergey V. Panin (Russia) Vasily M. Fomin (Russia) Shao Wen-zhu (China)

http://dream-journal.org

Editorial Board

Boris V. Artemyev (Moscow) Vladimir A. Bataev (Novosibirsk) Aleksandr K. Belyaev (St.-Peterburg) Sergey V. Burov (Ekaterinburg) Vladimir O. Vaskovsky (Ekaterinburg) Dmitry I. Vichuzhanin (Ekaterinburg) Vladimir G. Degtyar (Miass) Igor G. Emelyanov (Ekaterinburg) Sergey M. Zadvorkin (Ekaterinburg) Alexander G. Zalazinsky (Ekaterinburg) Anatoly V. Konovalov (Ekaterinburg) Vladimir N. Kostin (Ekaterinburg) Aleksey V. Makarov (Ekaterinburg) Vladimir A. Mironov (Ekaterinburg) Radik R. Mulyukov (Ufa) Vitaly V. Muravyov (Izhevsk) Aleksandr P. Nichipuruk (Ekaterinburg) Oleg A. Plekhov (Perm) Anna M. Povlotskaya (Ekaterinburg) Nataliya B. Pugacheva (Ekaterinburg) Igor Yu. Pyshmintsev (Chelyabinsk) Anatoly B. Rinkevich (Ekaterinburg) Roman A. Savray (Ekaterinburg) Alexander S. Smirnov (Ekaterinburg) Alexander I. Ulyanov (Izhevsk) Yulia V. Khudorozhkova (Ekaterinburg)

Eelena E. Verstakova, editor of the English translation Irina M. Tsiklina, editor of Russian texts Anna V. Garieva, maker-up Galina V. Torlopova, associate editor Raul N. Shakirov, site admin

Postal address: Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 34 Komsomolskaya st., 620049, Ekaterinburg, Russian Federation phone: +7 (343) 375-35-83, fax: +7 (343) 374-53-30 e-mail: dream-journal@mail.ru http://dream-journal.org



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

ISSN 2410-9908

http://dream-journal.org

Главный редактор: Смирнов Сергей Витальевич, д.т.н. Заместитель главного редактора: Сергей Викторович Гладковский, д.т.н. Заместитель главного редактора: Евгений Юрьевич Просвиряков, д.ф-м.н.

Редакционный совет:

Буренин Анатолий Александрович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия) Горячева Ирина Георгиевна, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия) Грум Янез, Рh.D, (Республика Словения) Лебедев Михаил Петрович, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия) Леонтьев Леопольд Игоревич, академик РАН, д.т.н. (Россия) Ломакин Евгений Викторович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия) Матвеенко Валерий Павлович, академик РАН, д.т.н. (Россия) Матвеенко Валерий Павлович, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия) Махутов Николай Андреевич, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия) Морозов Никита Федорович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия) Москвичев Владимир Викторович, д.т.н. (Россия) Панин Сергей Викторович, д.т.н. (Россия) Фомин Василий Михайлович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия) Шао Вэнь-чжу, профессор (Китай)

Редакционная коллегия:

Артемьев Борис Викторович, д.т.н., (Москва) Батаев Владимир Андреевич, д.т.н. (Новосибирск) Беляев Александр Константинович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н., (Санкт-Петербург) Буров Сергей Владимирович, к.т.н. (Екатеринбург) Васьковский Владимир Олегович, д.ф.-м.н. (Екатеринбург) Вичужанин Дмитрий Иванович, к.т.н. (Екатеринбург) Дегтярь Владимир Григорьевич, академик РАН, д.т.н. (Миасс) Емельянов Игорь Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург) Задворкин Сергей Михайлович, к.ф-м.н. (Екатеринбург) Залазинский Александр Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург) Коновалов Анатолий Владимирович, д.т.н. (Екатеринбург) Костин Владимир Николаевич, д.т.н. (Екатеринбург) Макаров Алексей Викторович, член-корр. РАН, д.т.н. (Екатеринбург) Миронов Владимир Александрович, д.м.н. (Екатеринбург) Мулюков Радик Рафикович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Уфа) Муравьев Виталий Васильевич, д.т.н. (Ижевск) Ничипурук Александр Петрович, д.т.н. (Екатеринбург) Плехов Олег Анатольевич, д.ф.-м.н. (Пермь) Поволоцкая Анна Моисеевна, к.т.н. (Екатеринбург) Пугачева Наталия Борисовна, д.т.н. (Екатеринбург) Пышминцев Игорь Юрьевич, д.т.н. (Челябинск) Ринкевич Анатолий Брониславович, член-корр. РАН, д.ф-м.н. (Екатеринбург) Саврай Роман Анатольевич. к.т.н. (Екатеринбург) Смирнов Александр Сергеевич, к.т.н. (Екатеринбург) Ульянов Александр Иванович, д.т.н. (Ижевск) Худорожкова Юлия Викторовна, к.т.н. (Екатеринбург)

Верстакова Елена Евгеньевна – редактор перевода текста на английский язык Циклина Ирина Михайловна – редактор текста Гариева Анна Валерьевна – верстальщик текста Торлопова Галина Викторовна – помощник редактора Шакиров Рауль Нурович, к.т.н. – администратор сайта журнала

Адрес редакции: Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Комсомольская, д. 34., ИМАШ УрО РАН телефон: +7 (343) 375 35 83, факс +7 (343) 374-53-30 e-mail: dream-journal@mail.ru http://dream-journal.org



CONTENTS

Kopyrin M. M., Markov A. E., Dyakonov A. A., Tuisov A. G., Okhlopkova A. A., Kych- kin A. K. and Lazareva N. N. Investigation of butadiene-elastomer-based high modulus ma- terials reinforced by basalt, glass, and carbon fabrics				
Lebedev S. Yu. and Syzrantsev V. N. Calculating the probability of the failure-free opera- tion of spur gear transmissions	13			
Abdulmenova E. V., Buyakova S. P. and Kulkov S. N. Increasing hydrogen sorption by Ti ₂ Ni powder using mechanochemical alloying	25			
Mushankova K. A. and Stepanova L. V. Atomistic determination of stress fields in samples with defects	36			
Goruleva L. S. and Prosviryakov E. Yu. Unidirectional steady-state inhomogeneous Couette flow with a quadratic velocity profile along a horizontal coordinate	47			



ISSN 2410-9908

СОДЕРЖАНИЕ

Копырин М. М., Марков А. Е., Дьяконов А. А., Туисов А. Г., Охлопкова А. А., Кычкин А. К., Лазарева Н. Н. Исследование высокомодульных материалов на основе бутадиенового эластомера, армированных базальто-, стекло- и углетканью	6
Лебедев С. Ю., Сызранцев В. Н. К расчету вероятности безотказной работы зубчатых цилиндрических передач	13
Абдульменова Е. В., Буякова С. П., Кульков С. Н. Увеличение сорбции водорода порошком Ti ₂ Ni при механохимическом легировании	25
Мушанкова К. А., Степанова Л. В. Атомистическое определение полей напряжений в образцах с дефектами	36
Горулева Л. С., Просвиряков Е. Ю. Однонаправленное установившееся неоднородное течение типа Куэтта с квадратичным профилем скорости по горизонтальной координате	47



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

ISSN 2410-9908

http://dream-journal.org

Received: 28.04.2022 Revised: 30.05.2022 Accepted: 24.06.2022 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.006-012

INVESTIGATION OF BUTADIENE-ELASTOMER-BASED HIGH MODULUS MATERIALS REINFORCED BY BASALT, GLASS, AND CARBON FABRICS

M. M. Kopyrin^{1, a), *}, A. E. Markov^{1, b)}, A. A. Dyakonov^{1, 2, c)}, A. G. Tuisov^{1, d)}, A. A. Okhlopkova^{2, e)}, A. K. Kychkin^{3, f)}, and N. N. Lazareva^{2, g)}

 ¹Federal Research Center YaSC SB RAS, 2 Petrovskogo St., Yakutsk, 677000, Russian Federation
 ²North-Eastern Federal University, 58 Belinskogo St., Yakutsk, 677029, Russian Federation
 ³V. P. Larionov Institute of Physical-Technical Problems of the North, SB RAS, 1 Oktyabrskaya St., 677980, Yakutsk, Russian Federation

^{a)} bittps://orcid.org/0000-0002-6018-6391	mkopyrin91@gmail.com;
^{b)} bhttps://orcid.org/0000-0001-6853-6758	aital.markov@gmail.com;
^{c)} (D) https://orcid.org/0000-0002-6959-368X	🛿 afonya71185@mail.ru;
^{d)} D https://orcid.org/0000-0002-6819-1937	tagg@rambler.ru;
^{e)} D https://orcid.org/0000-0003-0691-7066	okhlopkova@yandex.ru;
^{f)} ttps://orcid.org/0000-0002-5276-5713	kychkinplasma@mail.ru;
^{g)} D https://orcid.org/0000-0001-5090-0793	lazareva-nadia92@mail.ru

*Corresponding author. E-mail: mkopyrin91@gmail.com Address for correspondence: Office 20, Avtodorozhnaya St., Yakutsk, 5677021, Russian Federation Tel.: +7 984 101 19 12

A relevant task in improving the properties of elastomers is to increase their strength and stiffness, which affect the reliability and durability of rubber products. The paper presents a technology for manufacturing high-modulus materials based on SKD-V butadiene rubber and reinforcing layers of fabrics from basalt, glass, and carbon fibers. The results of studying elastic strength properties reveal a significant increase in the ultimate strength of reinforced samples in comparison with an unmodified elastomer. The increase in tensile strength varies from 1.7 to 2.8 times. The addition of reinforcing layers reduced the elongation value by 25 to 47 times compared to rubber without reinforcement. High tensile strength and low elongation increase shear resistance. The wear resistance testing of elastomers coated with reinforcing fabrics shows a decrease in abrasion resistance reduced by a factor of 5.8. Abrasion wear and interaction between the reinforcing filler and the polymer are studied by electron microscopy. The study of the microstructure shows a weak contact between the fiber and the elastomeric matrix. Lack of contact during the abrasion process causes destruction of the fibers on the abrasive surface and their further separation. Due to the combination of high tensile strength and low elongation, the reinforced materials obtain high modulus properties combined with lateral mobility.

Keywords: elastomer, basalt fiber, carbon fiber, glass fiber, high modulus material, microstructure.

1. Introduction

In connection with the intensive development of various industries, the task is to search for and create new polymer composite materials (PCM) that meet technical requirements and have high performance. Polymeric materials have a number of advantages and a wide range of applications. The potential for improvement is almost limitless due to the possibility of modifying them by introducing fillers into the volume, applying coatings, joining with other materials, or reinforcing with



Issue 3, 2022 http://dream-journal.org

various types of fibers and fabrics [1, 2]. One of the areas of polymer materials science is development of high-modulus PCMs based on a combination of elastomers and reinforcing fabrics.

Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures

When developing composites based on elastomers, one must consider the possibility of their operation at low negative ambient temperatures. Winter temperature in some regions can drop below -40 °C, sometimes even below -50 °C, resulting in the failure of rubber products. To improve the reliability of products operating in these conditions, it is necessary to use materials with high frost resistance. Rubber is the main ingredient of the rubber compound responsible for the ability to operate elastomers at low temperatures [3]. It is known [4] that elastomers based on siloxane, butadiene, and isoprene rubbers have a high frost resistance. To create high-modulus frost-resistant PCMs, reinforcing basalt, glass, and carbon fabrics can be used, which retain the stability of properties over a wide temperature range [5, 6, 7, 8]. The advantage of reinforcing fabrics is their physical and mechanical properties; namely, the tensile strength of basalt fiber varies from 4.8 GPa and its elastic modulus is 89 GPa [9], the strength of glass fiber ranges from 1.5 to 5.0 GPa and its elastic modulus ranges from 50 to 90 GPa [10], the strength of carbon fiber is as high as 6-7 GPa and its elastic modulus reaches 600 GPa [11]. Another advantage of these fibers is their chemical resistance. Thus, basalt fiber forms a protective film on the surface due to partial dissolution of the fiber [12]; carbon fiber is chemically inert under normal conditions and in the absence of catalysts [13, 14]; when dissolving, glass fiber adsorbs water and an aggressive medium, with simultaneously slowly dissolving oxide components turning into highly porous silica [15]. The combination of a frost-resistant elastomer with high-modulus fibers will make it possible to obtain a PCM with the properties of two different materials.

The purpose of this research is to study the physical and mechanical properties and structure of high-modulus elastomers based on frost-resistant SKD-V butadiene rubber [16] and reinforcing basalt, carbon, and glass fabrics.

2. Materials and Methods

The objects of the study are elastomeric materials reinforced with fabrics by the layer-bylayer method. Fabrics made of basalt fiber brand BT-11 (100) (Factory of technical fabrics, Russia) with a surface density of 351 g/m² and a 5/3 twill weave, fiberglass brand TR-560-30A (100) (PolotskSteklovolokno, Belarus) with a surface density of 560 g/m² and a 2/2 twill weave, carbon fiber brand 2/2-1000-12K-400 (Prepreg-SKM, Russia) with a density of 407 g/m2 and a 2/2 twill weave were used as a reinforcing layer. A rubber compound based on frost-resistant butadiene rubber of the SKD-V brand (Sibur, Russia) was used as an elastomeric matrix. The ingredients were mixed in a PL-2200 closed rubber mixer (Brabender, Germany) for 20 min. The recipe and the time of introducing the ingredients into the rubber compound are shown in Table 1.

No.	Ingredients	MF	Introduction time, min		
1	SKD-V	100.0	0		
2	Stearic acid	2.0	0		
3	Technical Carbon N550	50.0	2		
4	Zinc oxide	3.0	5		
5	Sulfenamide C	0.9	10		
6	Sulfur	1.5	12		

TABLE 1. Recipe and time of introduction of rubber compound ingredients

Investigation of butadiene-elastomer-based high modulus materials reinforced by basalt, glass, and carbon fabrics / M. M. Kopyrin, A. E. Markov, A. A. Dyakonov, A. G. Tuisov, A. A. Okhlopkova, A. K. Kychkin, and N. N. Lazareva // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 6–12. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.006-012.



ISSN 2410-9908

The prototypes were produced by the layer-by-layer method, i.e. rubber mixture – reinforcing fabric layer – rubber mixture. A schematic representation of the stacking of the samples is shown in Fig. 1.



FIGURE 1. Reinforced material: elastomer layer - reinforcing fabric layer - elastomer

Vulcanization of rubber compounds and hybrid elastomeric composites was carried out in a PKMV-100 hydraulic press (Impulse, Russia) at 155 °C for 20 min under a pressure of 10 MPa.

The elastic-strength properties of the reinforced elastomers were determined by means of an Autograph AGS-JSTD testing machine (Shimadzu, Japan) according to ISO 37-2020; wear resistance was determined on an MI-2 friction machine (Polymermash group, Russia) using an abrasive surface with a grain size of 150 according to ISO 4649-85, the test time was 5 min; hardness was determined by the Shore A method according to ISO 7619-1-2009. The microstructure of low-temperature cleavages and the friction surface was studied in a JSM-7800F scanning electron microscope (JEOL, Japan) at a low accelerating voltage in the secondary electron mode.

3. Results

Fig. 2 shows the microstructures of the basalt fabric (BF), the glass fabric (GF), and the carbon fabric (CF).



FIGURE 2. Micrographs of the fabrics: BF (a); GF(b); CF (c)

The microphotographs show that the basalt fabric has a denser weave between fiber bundles relative to the fiberglass and carbon fabrics. Presumably, this is due to the fact that the ratio of the number of interlacing fibers of the basalt fabric is 5 to 3, while it is 2 to 2 for the fiberglass and carbon fabrics.

Figure 3 shows the comparison diagrams of relative elongation and ultimate strength for the original elastomer and the elastomers reinforced with BF, GF and CF layers.

Investigation of butadiene-elastomer-based high modulus materials reinforced by basalt, glass, and carbon fabrics / M. M. Kopyrin, A. E. Markov, A. A. Dyakonov, A. G. Tuisov, A. A. Okhlopkova, A. K. Kychkin, and N. N. Lazareva // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 6–12. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.006-012.



FIGURE 3. Diagrams of the physical and mechanical properties (a – elongation; b – tensile strength) of the elastomers based on rubber SKD-V, SKD-V with BF, SKD-V with GF, SKD-V with CF

It can be seen from the relative elongation diagram that the introduction of a reinforcing layer into the elastomer matrix leads to a significant decrease in elasticity, that the relative elongation decreases by a factor of $\sim 25-47$ compared to the original rubber, and that it is 15.5 % for the elastomer with BF, 8.4 % for the elastomer with GF, and 7.1 % for the elastomer with CF. The decrease in the elastic properties is due to the inability of the reinforcing layers to suffer large strain-induced changes. Thus, the reinforcement of the elastomer reduces its deformability.



FIGURE 4. Microphotographs of specimen cleavages: SKD-V (a); SKD-V with BF (b); SKD-V with GF (c); SKD-V with CF (d)

Investigation of butadiene-elastomer-based high modulus materials reinforced by basalt, glass, and carbon fabrics / M. M. Kopyrin, A. E. Markov, A. A. Dyakonov, A. G. Tuisov, A. A. Okhlopkova, A. K. Kychkin, and N. N. Lazareva // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 6–12. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.006-012.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

http://dream-journal.org

ISSN 2410-9908

The introduction of a reinforcing layer into the rubber compound significantly increases the strength properties of the elastomers (Fig. 3b). The strength increases 1.7 to 2.8 times from that of the original rubber. The specimen reinforced with BF has the highest strength properties (\sim 29 MPa). The introduction of a reinforcing layer of BF, CF, and GF into the rubber compound imparts high-modulus properties to the elastomeric composites by increasing the strength properties and significantly reducing elasticity.

Figure 4 shows micrographs of brittle fractures for the SKD-V elastomers and the composite elastomers with the addition of a reinforcing layer.

Figure 4 b-d shows the contact points of two different layers: reinforcing fabric and rubber. For example, in Fig. 4b one can see areas of tight contact of the basalt fibers *pressed* into the rubber mass. The fibers on the samples with GF and CF (Fig. 4c, d) adhere less closely to the rubber. These samples showed lower strength during testing. It follows from the analysis of the microstructure that the adhesion of BF, GF, and CF to the rubber is weak due to the chemical inertness of the fibers.

Figure 5 shows diagrams of Shore A hardness and wear resistance of the rubber samples based on the SKD-V rubber and the rubbers with reinforcing layers.



FIGURE 5. Diagrams of Shore A hardness (a) and wear resistance (b) for the elastomers based on the rubbers SKD-V, SKD-V with BF, SKD-V with GF, and SKD-V with CF

The hardness numbers of the elastomers with reinforcing layers (Fig. 5a) are on the same level with the original rubber, the variation being 1 arb. unit. Presumably, this is due to the fact that the reinforcing fabrics are soft materials, and thus they do not increase the hardness of the composites.

According to the results of studying the abrasive abrasion of the samples (Fig. 5b) coated with reinforcing surface layers of BF, GF, and CF, there is a tendency of a decrease in the wear resistance of the composites coated with fabrics. The volumetric abrasion of the specimens increases 4.1 to 5.8 times compared to the original elastomer, and it amounts to 0.131 cm³ for BF, 0.172 cm³ for GF, and 0.136 cm³ for CF. Reinforcing fabrics have inert properties when interacting with other materials and high hardness; this reduces the resistance to the abrasive action of large particles. Presumably, in the process of friction of the reinforcing fabrics on the abrasive surface, they become destroyed and peeled off from the elastomer surface.

Figure 6 shows micrographs of the surface of the samples after testing for abrasion resistance.







FIGURE 6. Micrographs of the samples tested for wear resistance: SKD-V (a); SKD-V with BF (b); SKD-V with GF (c); SKD-V with CF (d)

When comparing the micrographs of the friction surface of the original and reinforced samples, one can observe a looser surface of the SKD-V sample with traces of grooves from the abrasive and a wavy surface of the reinforced rubbers. In Fig. 6 b–d, fragments of BF, GF, and CF fibers are clearly visible. Conceivably, during abrasion, the fabrics made of carbon, glass, and basalt fibers become destroyed on the abrasive surface and subsequently fall off.

4. Conclusion

The study of the physical and mechanical properties of reinforced elastomers has shown the following results:

- the tensile strength of the reinforced elastomers is 1.7 to 2.8 times that of the original elastomer, the maximum increase in strength of 29 MPa being observed in the sample reinforced with basalt fabric;

- the relative elongation of the reinforced samples decreases significantly, 25 to 47 times, compared to the elastomer without a reinforcing layer, the decrease occurs by 25–47 times;

- the microstructure study shows a weak adhesive interaction of BF, CF, and GF with the elastomeric matrix;

- the formation of a surface layer of BF, CF, and GF on the rubber surface leaves wear resistance unincreased due to the low adhesion of the fibers with the elastomer and the fragility of the reinforcing fabrics.

High strength values in combination with low relative elongation provide reinforced materials with high resistance to shear deformations, i.e. high modulus properties.



Acknowledgment

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under state assignments Nos. FSRG-2020-0017 and FWRS-2022-0001. The research used the scientific equipment of the shared research facilities of the Federal Research Center of the Yakut Scientific Center, SB RAS; it was performed as part of the activities under grant No. 13.TsKP.21.0016.

References

1. Hollaway L.C. *Advanced polymer composites and polymers in the civil infrastructure*, Elsevier, 2001, 320 p.

2. Oladele I.O., Omotosho T.F., Adediran A.A. Polymer-Based Composites: An Indispensable Material for Present and Future Applications. *International Journal of Polymer Science*, 2020, vol. 2020, pp. 1–12. DOI: 10.1155/2020/8834518.

3. Bukhina M.F., Kurlyand S.K. *Low-temperature behavior of elastomers*, Leiden, VSP/Brill, 2007, vol. 31, 320 p.

4. Wang H., Yang L., Rempel G.L. Homogeneous Hydrogenation Art of Nitrile Butadiene Rubber: A Review. *Polymer Reviews*, 2013, vol. 53, No. 2, pp. 192–239. DOI: 10.1080/00914039608029377.

5. Balaji K.V., Shirvanimoghaddam K., Rajan G.S., Ellis A.V., Naebe M. Surface treatment of Basalt fiber for use in automotive composites. *Materials Today Chemistry*, 2020, vol. 17, pp. 1–28. DOI: 10.1016/j.mtchem.2020.100334.

6. Ali Z., Gao Y., Tang B., Wu X., Wang Y., Li M., Hou X., Li L., Jiang N., Yu J. Preparation, Properties and Mechanisms of Carbon Fiber/Polymer Composites for Thermal Management Applications. *Polymers*, 2021, vol. 13, No. 169, pp. 1–22. DOI: 10.3390/polym13010169.

7. Newcomb B.A. Processing, structure, and properties of carbon fibers. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2016, vol. 91, No. 1, pp. 262–282. DOI: 10.1016/j.compositesa.2016.10.018.

8. Tang X., Yan X. A review on the damping properties of fiber reinforced polymer. *Journal of Industrial Textiles*, 2020, vol. 49, No. 6, pp. 693–721. DOI: 10.1177/1528083718795914.

9. Liu Q., Shaw M.T., Parnas R.S., McDonnell A.M. Investigation of basalt fiber composite mechanical properties for applications in transportation. *Polymer Composites*, 2006, vol. 27, No. 1, pp. 41–48. DOI: 10.1002/pc.20162.

10. Lee C., Liu D. Tensile Strength of Stitching Joint in Woven Glass Fabrics. *J. Eng. Mater. Tech.*, 1990, vol. 112, No. 2, pp. 125–130. DOI: 10.1115/1.2903298.

11. Newcomb B.A. Processing, structure, and properties of carbon fibers. Composites Part A: *Applied Science and Manufacturing*, 2016, vol. 91, pp. 262–282. DOI: 10.1016/J.COMPOSITESA.2016.10.018.

12. Dalinkevich A.A., Gumargalieva K.Z., Marakhovskii S.S., Aseev A.V. Temperature– humidity corrosion behavior of basalt epoxy plastics. *Prot. Met. Phys. Chem. Surf.*, 2015, vol. 51, pp. 1176–1184. DOI: 10.1134/S2070205115070060.

13. Liu Y., Kumar S. Recent Progress in Fabrication, Structure, and Properties of Carbon Fibers. *Polymer Reviews*, 2012, vol. 52, No. 3, pp. 234–258. DOI: 10.1080/15583724.2012.705410.

14. Yang S., Cheng Y., Xiao X., Pang H. Development and application of carbon fiber in batteries. *Chemical Engineering Journal*, 2020, vol. 384, pp. 123294. DOI: 10.1016/j.cej.2019.123294.

15. Schutte C.L. Environmental durability of glass-fiber composites. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 1994, vol. 13, No. 7, pp. 265–323. DOI: 10.1016/0927-796x(94)90002-7.

16. Dias M.L., Schoene F.A., Ramirez C., Graciano I.A., Sirelli L., Gonsalves R.P. Thermal and crystallization behaviour of epoxidized high cis-polybutadiene rubber. *Journal of Rubber Research*, 2019, vol. 22, No. 4, pp. 195–201. DOI: 10.1007/s42464-019-00028-5.



Received: 14.04.2022 Revised: 16.05.2022 Accepted: 24.06.2022 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.013-024

CALCULATING THE PROBABILITY OF THE FAILURE-FREE OPERATION OF SPUR GEAR TRANSMISSIONS

S. Yu. Lebedev^{a)*} and V. N. Syzrantsev^{b)}

Industrial University of Tyumen, 38 Volodarskogo St., Tyumen, 625000, Russian federation

^{a)} https://orcid.org/0000-0001-7611-6884 lebedevsergey1995@gmail.com; ^{b)} syzrantsevvn@tyuiu.ru

*Corresponding author. E-mail: lebedevsergey1995@gmail.com Address for correspondence: ul. Melnikaite, 44, room 222, Tyumen, Russian Federation Tel.: +7 919 958 51 91

The article presents an improved method for calculating the probability of failure-free operation of case-hardened spur gear transmissions. The existing methods for calculating the probability of failure-free operation of gear transmissions are analyzed. The failure tree for a case-hardened spur gear transmission is presented. The probability of failure-free operation of case-hardened cylindrical gear transmissions is presented as the product of the probabilities of failure-free operation of the gear and the wheel according to the following criteria (failure types): contact endurance (pitting), bending endurance (tooth breakage), and tooth interior fatigue fracture (deep contact chipping). An algorithm has been developed for calculating the probability of failure-free operation of case-hardened spur gear transmissions. To restore the torque distribution density function in the proposed method, nonparametric statistics methods are implemented. In the calculation of contact stresses, the skew angle is taken into account, which is the sum of two angles: the skew angle due to deformations of the transmission elements and the housing; the total angle of technological misalignment of wheel tooth surfaces, caused by errors in the manufacture of the teeth and mounting errors during the assembly of the transmission. An example of a test calculation of the probability of failure-free operation of a case-hardened spur gear transmission according to the presented method is given. Based on the work performed, conclusions are formulated.

Keywords: probability of failure-free operation, nonparametric statistics methods, spur gear, machine reliability.

References

1. Reshchikov V.F. *Trenie i iznos tyazhelonagruzhennykh peredach* [Friction and wear in heavy-loaded transmissions]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1975, 232 p. (In Russian).

2. Kogaev V.P., Drozdov Yu.N. *Prochnost' i iznosostojkost' detaley mashin* [Strength and wear resistance of machine elements: a textbook for engineering high schools]. Moscow, Vysshaya Shko-la Publ., 1991, 318 p. (In Russian).

3. ISO 6336. *Calculation of load capacity of spur and helical gears*. International Organization for Standardization (ISO), 2007.

4. GOST 21354-87. *Cylindrical evolvent gears of external engagement. Strength calculation.* Moscow, Izd-vo standartov Publ., 1988, 125 p. (In Russian).

5. Sharma Vikas, Parey Anand. Gearbox fault diagnosis using RMS based probability density function and entropy measures for fluctuating speed conditions. *Structural Health Monitoring*, 2016, pp. 1–14. DOI: 10.1177/1475921716679802.



6. Sun YuanTao, Liu Chao, Zhang Qing, Qin XianRong. Multiple Failure Modes Reliability Modeling and Analysis in Crack Growth Life Based on JC Method. *Mathematical Problems in Engineering*, 2017, pp. 1–5. DOI: 10.1155/2017/2068620.

7. Prushak V.Ya., Chernous D.A., Volchek O.M. Influence of dynamic load on gear transmission durability of heavy-duty roadheading machines. *Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series. Vescì Nacyânal'naj akadèmìì navuk Belarusì. Seryâ fizìka-tèhnìčnyh navuk*, 2018, vol. 63, No. 2, pp. 192–200. DOI: 10.29235/1561-8358-2018-63-2-192-200. (In Russian).

8. Reshetov D.N., Ivanov A.S., Fadeev V.Z. *Nadezhnost' mashin* [Machine Reliability: Manual for Higher Education Institutions]. Moscow, Vysshaya Shkola Publ., 1988, 238 p. (In Russian).

9. Wu Ying, Xie Li-Yang, Wang De-Cheng, Gao Ji-Zhang. Reliability Analysis of Shiplift Gear Based on System-level Load-Strength Interference Model. *Advanced Materials Research*, 2010, vol. 118–120, pp. 354–358. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.118-120.354.

10. Ognjanović Milosav, Milutinović Miroslav S. Design for Reliability Based Methodology for Automotive Gearbox Load Capacity Identification. *Strojniški vestnik–Journal of Mechanical Engineering*, 2013, vol. 59 (5), pp. 311–322. DOI: 10.5545/sv-jme.2012.769.

11. Rudenko S.P. & Val'ko A. L. Features of analysis of gear wheels of transmissions on deep back-to-back endurance. *Vestnik Mashinostroeniya*, 2015, No. 11, pp. 5–11. ISSN 0042-4633. (In Russian).

12. Zhu Caichao, Chen Shuang, Liu Hua iju, Huang Huaqing, Li Guangfu, Ma Fei. Dynamic analysis of the drive train of a wind turbine based upon the measured load spectrum. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2014, vol. 28 (6), pp. 2033–2040. DOI: 10.1007/s12206-014-0403-0.

13. Syzrantsev V.N., Antonov M.D. An algorithm for determining the parameters of the distribution density function with the application of nonparametric statistics methods. *14th International Conference on MRDMS-2020, Ekaterinburg: AIP Conference Proceedings*, 2020, pp. 40–42. DOI: 10.1063/5.0037016.

14. Syzrantsev V.N., Nevelev Ya.P., Golofast S.L. *Raschet prochnostnoy nadezhnosti izdeliy na osnove metodov neparametricheskoy statistiki* [Calculation of strength reliability of products based on methods of nonparametric statistics]. Novosibirsk, Nauka Publ., 2008, 216 p. (In Russian).

15. Golofast S.L. *Diagnostika rabotosposobnosti peredach Novikova datchikami deformatsii integral'nogo tipa* [Serviceability diagnostics of Wildhaber-Novikov gearings by integral strain gauges]. Novosibirsk, Nauka Publ., 2004. 164 p. (In Russian).

16. Brecher Ch., Löpenhaus Ch., Brimmers J., Henser J. Influence of the Defect Size on the Tooth Root Load Carrying Capacity. *GEARTECHNOLOGY*, November/December 2017, pp. 92–100. Available at: https://www.geartechnology.com/issues/1117x/defect-size.pdf

17. Lebedev S.Yu. Analysis of methods for calculating tooth interior fatigue fracture, *OMSK SCIENTIFIC BULLETIN*, 2022, No. 2 (182). (In Russian).

18. *Reduktory energeticheskikh mashin: spravochnik* [Yu.L. Derzhavets, ed., Gearboxes of power machines: reference book]. St. Petersburg, Mashinostroenie Publ., 1985, 232 p. (In Russian).

19. Korotkin V.I., Kolosova E.M., Onishkov N.P. Forecasting of the contact endurance of hardened teeth and the load capacity of involute gear transmissions based on the limit state criterion of the material. *Vestnik Mashinostroeniya*, 2021, no. 12. pp. 35–37. DOI: 10.36652/0042-4633-2021-12-35-37. (In Russian).

20. Al Baydu, Patel R., Langlois P. Comparison of Tooth Interior Fatigue Fracture Load Capacity to Standardized Gear Failure Modes. *Gear solutions*, 2017, pp. 47–57.

21. Houyi B., Caichao Z., Ye Zh., Xiaojin Ch., Houbin F., Wei Ye. Study on Tooth Interior Fatigue Fracture Failure of Wind Turbine Gears. *Metals*, 2020, No. 10 (11), pp. 1497 (1–18). DOI: 10.3390/met10111497.



22. Lebedev S.Yu., Syzrantsev V.N. Probability of no-failure operation of cylindrical gears: tooth interior fatigue fracture. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mechanical Engineering Industry*, 2022, vol. 22, No. 2, pp. 20–32. DOI: 10.14529/engin220202. (In Russian).

23. Syzrantseva K.V. *Raschet prochnostnoi nadezhnosti detalei mashin pri sluchainom kharaktere vneshnikh nagruzok* [Calculation of strength reliability of machine parts at random nature of the external loads]. Tyumen, Tyumen State Oil and Gas University Publ., 2011.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

ISSN 2410-9908

Подана в журнал: 14.04.2022 УДК 621.83.053.3 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.013-024

http://dream-journal.org

К РАСЧЕТУ ВЕРОЯТНОСТИ БЕЗОТКАЗНОЙ РАБОТЫ ЗУБЧАТЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ПЕРЕДАЧ

С. Ю. Лебедев^{а)*}, В. Н. Сызранцев^{б)}

Тюменский индустриальный университет, г. Тюмень, 38, ул. Володарского, г. Тюмень, 625000, Российская Федерация

^{a)} D https://orcid.org/0000-0001-7611-6884 ⁱ lebedevsergey1995@gmail.com; ^{b)} syzrantsevvn@tyuiu.ru

^{*}Ответственный автор. Электронная почта: lebedevsergey1995@gmail.com Адрес для переписки: ул. Мельникайте, д. 44, к. 222, г. Тюмень, Российская Федерация Тел.: +7–919–958–51–91

В статье приведена усовершенствованная методика расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненных зубчатых цилиндрических передач. Выполнен анализ существующих методов расчета вероятности безотказной работы зубчатых цилиндрических передач. Представлено дерево отказов поверхностно упрочненной зубчатой цилиндрической передачи. Вероятность безотказной работы поверхностно упрочненных зубчатых цилиндрических передач представлена как произведение вероятностей безотказной работы шестерни и колеса по следующим критериям (видам отказов): контактная выносливость (питтинг), изгибная выносливости (поломка зуба) и глубинная контактная выносливость (глубинной контактное выкрашивание). Разработан алгоритм методики расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненных зубчатых цилиндрических передач. Для восстановления функции плотности распределения крутящего момента в предлагаемой методике реализованы методы непараметрической статистики. При расчете действующих контактных напряжений учитывался угол перекоса, являющийся суммой двух углов: угла перекоса, обусловленного деформациями элементов передачи и корпуса, и суммарного угла технологического перекоса поверхностей зубьев колес, вызванного погрешностями изготовления зубьев и ошибками монтажа при сборке передачи. Приведен пример тестового расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненной зубчатой прямозубой цилиндрической передачи по представленной методике. На основе выполненной работы были сформулированы выводы.

Ключевые слова: вероятность безотказной работы, методы непараметрической статистики, зубчатая цилиндрическая передача, надежность машин.

1. Введение

Зубчатые цилиндрические передачи являются неотъемлемой частью большинства технических систем: главной передачи электромобиля, верхнего привода буровой колонны, привода механизма судоподъемника и т. д. Отказ зубчатой передачи может повлечь за собой выход из строя всей технической системы, снизить ресурс или привести к отказу других элементов системы, создать аварийную ситуацию. Поэтому точная оценка надежности зубчатых передач так важна для современного мира.

Вероятность безотказной работы является показателем надежности и определяет вероятность того, что в пределах заданной наработки отказ объекта не возникнет. Под объектом подразумевается часть технической системы (конструктивный элемент, деталь, механизм, привод и т. д.) либо система в целом.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

http://dream-journal.org

ISSN 2410-9908

Вероятность безотказной работы зубчатой передачи оценивается по различным типам отказов. Так для поверхностно-упрочненных передач возможными отказами в процессе эксплуатации будут являться не только потеря контактной или изгибной прочности, но и отслаивание закаленного поверхностного слоя, вызванное потерей глубинной контактной прочности. На рис. 1 представлено дерево отказов поверхностно упрочненной зубчатой передачи. Возможными событиями, порождающими отказ передачи, являются контактное выкрашивание (питтинг), поломка зуба и глубинное контактное выкрашивание (отслаивание упрочненного слоя); при этом вероятность одного и того же события для колеса и шестерни может отличаться ввиду различий в геометрии, материале и виде термообработки. Отметим, что в дереве отсутствует абразивный износ, т.к. в поверхностно упрочненных зубчатых передачах он практически отсутствует [1, 2].



Рис. 1. Дерево отказов поверхностно упрочненной зубчатой передачи

Для расчета вероятности безотказной работы по критерию контактной и изгибной выносливости необходимо иметь функции плотности распределения двух случайных величин: фактических и допускаемых напряжений. Обе функции представляют собой математические модели, уравнения которых представлены в стандартных методиках расчета передач [3, 4]. Часть параметров математических моделей являются случайными числами (крутящий момент, угол перекоса, твердость контактной поверхности и т. д.), поэтому при реализации расчета эти параметры задают выборками случайных чисел, взятых из экспериментальных данных [5], либо применяют датчики случайных чисел (ДСЧ) с заданными параметрами распределения [6]. Параметры, связанные с какими-либо технологическими факторами (погрешности сборки и изготовления), обычно задаются ДСЧ с логарифмически нормальным законом распределения [7]. Закон распределения крутящего момента может иметь различные уравнения, зависящие от условий эксплуатации. Так, в [8] работу зубчатой передачи делят на легкий, средний и тяжелый режимы, для каждого из которых определена функция плотности распределения крутящего момента. Рассмотрим подробнее конкретные случаи применения различных кривых плотности распределения крутящего момента для оценки надежности передач каких-либо технических систем.





ISSN 2410-9908

В [9] выборка крутящего момента для расчета вероятности безотказной работы зубчатого привода судоподъемника представляет собой порядковую статистику с логарифмически нормальной функцией плотности распределения, зависящей от четырех сил, действующих на судно: неуравновешенный вес, ветровая нагрузка, силы трения и силы инерции. Для расчета вероятности безотказной работы автоматической коробки передач [10] функция распределения крутящего момента задана распределением Вейбулла. Выбор кривой обоснован рекомендациями ISO 6336. В [11] при расчете редуктора мотор-колеса карьерного самосвала график распределения удельной тяговой силы на колесе имеет форму, подобную логарифмически нормальному распределению. Для оценки надежности зубчатых передач привода ветрогенератора в [12] была использована выборка крутящего момента, представленного на рис. 2. Судя по изображению, можно заключить, что закон распределения крутящего момента имеет вид бимодальной функции.



Рис. 2. Статистические данные крутящего момента на входном валу привода ветрогенератора [12]

В [13, 14] функция плотности распределения крутящего момента определяется методами непараметрической статистики, для чего используются результаты экспериментальных данных. Такой подход делает методику оценки надежности более гибкой и универсальной.

Помимо задания функций плотности распределения случайных величин при реализации расчетов вероятности безотказной работы, стоит отметить, что также совершенствуются и сами математические модели фактических и допускаемых напряжений поверхностно упрочненных зубчатых передач. Это связано, прежде всего, с тем, что увеличение твердости поверхностного слоя зуба снижает его упругопластические свойства, а это негативно влияет на предел изгибной выносливости. Поэтому в [15] при оценке надежности зубчатых передач по критерию изгибной выносливости учитывают параметры упрочненного слоя. Также учитывают влияние микроструктуры материала зуба. В [16] учет макро- и микротрещин внутри тела зуба и функции изменения твердости упрочненного слоя при расчете изгибной прочности позволил получить результаты с погрешностью относительно эксперимента менее 10 %.

Расчет вероятности безотказной работы по критерию глубинной контактной выносливости является наименее разработанным (в результате анализа отечественной и зарубежной литературы не было выявлено ни одного примера методики определения вероятности безотказной работы – расчеты сводятся к определению коэффициента запаса прочности или срока службы передачи [17]). Во-первых, существуют различия в используемых методиках расчета глубинных напряжений ввиду различных теоретических положений: гипотезы Геста–Мора [18], обобщенного критерия предельного состояния Лебедева–Писаренко для структурно неоднородного материала [19], критерия Финдли [20] и др. Во-вторых, важное значение для определения



предела глубинной выносливости имеет функция изменения твердости по глубине упрочненного слоя, у которой также существует несколько уравнений [21]. В-третьих, при изменении значения крутящего момента будет изменяться и глубина залегания минимального запаса прочности внутри тела зуба, что требует определения точки по глубине упрочненного слоя зуба, в которой будет рассчитана вероятность безотказной работы по критерию глубинной контактной выносливости.

В результате представленного выше анализа можно заключить, что разработка методологии оценки надежности поверхностно упрочненных зубчатых передач на сегодняшний день является актуальной задачей. Цель данной статьи – представить усовершенствованную методику расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненных цилиндрических передач.

2. Методика расчета вероятности безотказной работы зубчатых цилиндрических передач

Любой вид отказа в зубчатой передаче является независимым событием. Рассматривая зубчатую передачу как техническую систему, можем заключить, что вероятность безотказной работы будет равна произведению вероятностей безотказной работы по каждому из возможных отказов:

$$P_{3\Pi}(t) = \prod_{j=1}^{6} P_j^k(t), \tag{1}$$

где $P_j^k(t)$ – вероятность безотказной работы по каждому из возможных отказов шестерни и колеса; k – индекс шестерни (k = 1) и колеса (k = 2); t – время наработки.

На рис. 3 представлен алгоритм методики расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненных зубчатых цилиндрических передач.

В блоке 1 (рис. 3) осуществляется ввод исходных данных, таких же, как и для проверочного расчета зубчатой передачи. Отличием будет необходимость выбрать функцию плотности распределения крутящего момента и ее параметры либо загрузить выборку значений крутящего момента.

Блок 2 представляет собой отдельную программу, которая осуществляет восстановление функция плотности распределения крутящего момента, используя методы непараметрической статистики.

Блоки 3 и 4 выполняют параллельные расчеты вероятности безотказной работы шестерни и колеса по критерию контактной и изгибной выносливости. Расчетные формулы, используемые в блоках 3 и 4, взяты из ГОСТ 21354-87. Датчиками случайных чисел задаются коэффициент, учитывающий распределение нагрузки между зубьями, технологические углы перекоса поверхностей зубьев колес и значения допускаемых контактных и изгибных напряжений.

Отличительной особенностью предлагаемой методики является расчет суммарного угла перекоса, который вычисляется как сумма двух углов:

$$\gamma = \gamma_T + \gamma_F,\tag{2}$$

где γ_F — угол перекоса, обусловленный деформациями элементов передачи и корпуса, рад; γ_T — суммарный угол технологического перекоса поверхностей зубьев колес, вызванного погрешностями изготовления зубьев и ошибками монтажа при сборке передачи, рад.

Угол γ_F зависит от величины крутящего момента и определяется по зависимости:

$$\gamma_F = \left(\frac{\gamma_2}{2} - \gamma_1\right) \left(\frac{T_1^i}{T_{1n}}\right)^2 + \left(2\gamma_1 - \frac{\gamma_2}{2}\right) \left(\frac{T_1^i}{T_{1n}}\right),\tag{3}$$



где $T_1^i - i$ -е значение из выборки крутящего момента, $H \cdot M$; T_{1n} – номинальное (среднее) значение крутящего момента, $H \cdot M$; γ_1 – угол перекоса зубьев в зацеплении, вызванный деформациями элементов передачи при T_{1n} , рад; γ_2 – угол перекоса зубьев в зацеплении, вызванный деформациями элементов передачи при максимальном крутящем моменте, рад.



Рис. 3. Алгоритм методики расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненных зубчатых цилиндрических передач



ISSN 2410-9908

В блоке 5 осуществляется расчет вероятности безотказной работы шестерни и колеса по критерию глубинной контактной выносливости. Подробно реализованный расчет описан в [22]. Для расчета в блоке 5 необходима выборка контактных напряжений, поэтому расчет выполняется после блока 3.

В блоке 6 реализуется расчет вероятности безотказной работы зубчатой передачи по формуле (1).

3. Результаты расчетов

Используя представленную методику, выполним расчет вероятности безотказной работы для зубчатой цилиндрической передачи, параметры которой представлены в таблице.

Таблица

Параметр	Значение		
Модуль, мм	10,5		
Число зубьев			
– шестерни	12		
– колеса	53		
Приведенный радиус кривизны в полюсе зацепления, мм	94,605		
Угол наклона зубьев, град.	0		
Материал			
– шестерня	12XH3A		
- колесо	40X		
Поверхностное упрочнение			
– шестерня	цементация		
- колесо	цементация		
Твердость поверхности зуба, HV			
– шестерня	600		
- колесо	570		
Твердость сердцевины, HV			
– шестерня	320		
- колесо	300		
Общая толщина упрочненного слоя, мм	2		
Эффективная толщина упрочненного слоя (по ГОСТ 21354-87), мм	1,007		
Модуль упругости, МПа	2,15 · 10 ⁵		
Коэффициент Пуассона	0,3		
Крутящий момент, <i>кН</i> ·м	5		
Скорость вращения колеса, об/мин	15		
Срок службы передачи, час	12 000		

Параметры зубчатой передачи

Расчет выполнялся для выборки крутящего момента при номинальном значении 5 кН·м и функции плотности β-распределения (a = 6, b = 2), что соответствует тяжелому режиму работы зубчатой передачи [23].

Результаты расчетов по предлагаемой методике представлены на рис. 4. Наиболее вероятным типом отказа для рассчитываемой передачи будет контактное разрушение. Вероятность безотказной работы зубчатой передачи для заданного срока службы равна 93,3 %.



ISSN 2410-9908



Рис. 4. Результаты расчетов вероятности безотказной работы передачи

4. Заключение

На основе представленной работы можно сделать следующие выводы.

Предложена методика расчета вероятности безотказной работы поверхностно упрочненных зубчатых передач, отличающаяся тем, что:

1. расчет выполняется для шестерни и колеса;



2. учитывается вероятность безотказной работы по критерию глубинной контактной выносливости;

3. используются инструменты непараметрической статистики;

4. при расчете контактных напряжений учитывается угол перекоса, вызванный деформацией элементов передачи и корпуса.

На основе предложенной методики был выполнен тестовый расчет поверхностно упрочненной зубчатой передачи, вероятность безотказной работы которой была определена равной 93,3 %.

Литература

1. Рещиков В. Ф. Трение и износ тяжелонагруженных передач. – М. : «Машиностроение», 1975. – 232 с.

2. Когаев В. П., Дроздов Ю. Н. Прочность и износостойкость деталей машин: учебное пособие для машиностроительных вузов. – М. : Высшая школа, 1991. – 318 с.

3. ISO 6336. Calculation of load capacity of spur and helical gears. – International Organization for Standardization (ISO), 2007.

4. ГОСТ 21354-87. Передачи зубчатые цилиндрические эвольвентные. Расчет на прочность. – М. : Изд-во стандартов, 1988. – 125 с.

5. Sharma Vikas, Parey Anand. Gearbox fault diagnosis using RMS based probability density function and entropy measures for fluctuating speed conditions // Structural Health Monitoring. – 2016. – P. 1–14. – DOI: 10.1177/1475921716679802.

6. Multiple Failure Modes Reliability Modeling and Analysis in Crack Growth Life Based on JC Method / YuanTao Sun, Chao Liu, Qing Zhang, XianRong Qin // Mathematical Problems in Engineering. – 2017. – P. 1–5. – DOI: 10.1155/2017/2068620.

7. Прушак В. Я., Черноус Д. А., Волчек О. М. Влияние динамической нагруженности на долговечность зубчатой передачи трансмиссии тяжелонагруженных проходческих машин // Вес. Нац. акад навук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2018. – Т. 63, No. 2. – С. 192–200. DOI: 10.29235/1561-8358-2018-63-2-192-200.

8. Решетов Д. Н., Иванов А. С., Фадеев В. З. Надежность машин. – М. : Изд-во «Высшая школа», 1988. – 238 с.

9. Reliability Analysis of Shiplift Gear Based on System-level Load-Strength Interference Model / Wu Ying, Xie Li-Yang, Wang De-Cheng, Gao Ji-Zhang // Advanced Materials Research. – Vol. 118–120. – 2010. – P. 354–358. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.118-120.354.

10. Ognjanović Milosav, Milutinović Miroslav S. Design for Reliability Based Methodology for Automotive Gearbox Load Capacity Identification // Journal of Mechanical Engineering. – 2013. – Vol. 59 (5). – P. 311–322. – DOI: 10.5545/sv-jme.2012.769.

11. Руденко С. П., Валько А. Л. Особенности расчета зубчатых колёс трансмиссий на глубинную контактную выносливость // Вестник машиностроения. – 2015. – № 11. – С. 5–11. – ISSN 0042-4633.

12. Dynamic analysis of the drive train of a wind turbine based upon the measured load spectrum / Caichao Zhu, Shuang Chen, Hua iju Liu, Huaqing Huang, Guangfu Li, Fei Ma // Journal of Mechanical Science and Technology. – 2014. – Vol. 28 (6). – P. 2033–2040. – DOI: 10.1007/s12206-014-0403-0.

13. Syzrantsev V. N., Antonov M. D. An algorithm for determining the parameters of the distribution density function with the application of nonparametric statistics methods // 14th International Conference on MRDMS-2020, Ekaterinburg : AIP Conference Proceedings. – 2020. – P. 40–42. – DOI: 10.1063/5.0037016.

14. Сызранцев В. Н., Невелев Я. П., Голофаст С. Л. Расчет прочностной надежности изделий на основе методов непараметрической статистики. – Новосоибирск : Наука, 2008. – 216 с.



15. Голофаст С. Л. Диагностика работоспособности передач Новикова датчиками деформаций интегрального типа: монография. – Новосибирск : Наука, 2004. – 163 с.

16. Influence of the Defect Size on the Tooth Root Load Carrying Capacity / Ch. Brecher, Ch. Löpenhaus, J. Brimmers, J. Henser // Gear Technology. – November/December 2017. – P. 92–100. – URL: https://www.geartechnology.com/issues/1117x/defect-size.pdf

17. Лебедев С. Ю. Анализ методик расчета глубинной контактной выносливости // Омский научный вестник. – 2022. – № 2 (182). – DOI: 10.25206/1813-225-2022-182.

18. Редукторы энергетических машин: справочник / под ред. Ю. Л. Державца. – Л. : Машиностроение, Ленингр. отд-ние, 1985. – 232 с.

19. Короткин В. И., Колосова Е. М., Онишков Н. П. Прогнозирование контактной выносливости упрочненных зубьев и нагрузочной способности эвольвентных зубчатых передач по критерию предельного состояния материала // Вестник машиностроения. – 2021. – № 12. – С. 35–37.

20. Al B., Patel R., Langlois P. Comparison of Tooth Interior Fatigue Fracture Load Capacity to Standardized Gear Failure Modes // Gear solutions. – 2017. – P. 47–57.

21. Study on Tooth Interior Fatigue Fracture Failure of Wind Turbine Gears / B. Houyi, Z. Caichao, Zh. Ye, Ch. Xiaojin, F. Houbin, Ye. Wei // Metals. – 2020, No. 1. – P. 1497. (1–18). – DOI: 10.3390/met10111497.

22. Лебедев С. Ю., Сызранцев В. Н. Вероятность безотказной работы зубчатых цилиндрических передач: глубинная контактная выносливость // Вестник ЮУрГУ, серия «Машиностроение». – 2022. – № 2.

23. Сызранцева К. В. Расчет прочностной надежности деталей машин при случайном характере внешних нагрузок. – Тюмень: ТюмГНГУ, 2011. – 92 с.



ISSN 2410-9908

Received: 14.04.2022 **Revised:** 15.05.2022 Accepted: 24.06.2022 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.025-035

INCREASING HYDROGEN SORPTION BY Ti₂Ni POWDER USING MECHANOCHEMICAL ALLOYING

Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

E. V. Abdulmenova^{a)*}, S. P. Buyakova^{b)}, and S. N. Kulkov

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, 2/4 Akademicheskii Ave., Tomsk, 634055, Russian Federation

^{a)} https://orcid.org/0000-0002-9594-5706 Ekaterina.V.Abdulmenova@yandex.ru; ^{b)} b) https://orcid.org/0000-0002-9594-5706 🙆 sbuyakova@ispms.ru

*Corresponding author. E-mail: Ekaterina.V.Abdulmenova@yandex.ru Address for correspondence: pr. Akademicheskii, 2/4, Tomsk, 634055, Russian Federation Tel.: +7 (3822) 286 842

A method has been developed to increase hydrogen sorption by Ti₂Ni powder, which consists in mechanochemical alloying by titanium of Ti-Ni powder near the equiatomic composition. This method allows the hydrogen content in the powder material to be increased several times. It is possible to use the developed powder material for the safe storage and transportation of hydrogen in the metal hydride with a high hydrogen content, with reversible adsorption of hydrogen, in comparison with the storage and transportation of hydrogen in compressed and liquid form. The developed method is simple to implement and low-cost; therefore, it is of economic and practical interest. For mechanochemical alloying, a high-intensity planetary ball mill was used, with a drum rotation speed of 1820 rpm and a processing time of 300 seconds. It is shown that, after mechanochemical alloying, the powder Ti-Ni (85 wt%) – Ti (15 wt%) powder consisted of TiNi in two modifications, namely B2 and B19[,] and two Ti₂Ni phases with different lattice parameters. The existence of two Ti₂Ni phases is due to both the inheritance of this phase from the initial Ti-Ni powder (Ti₂Ni(I)), and its formation during the interaction of titanium with TiNi (B2, B19[°]) in the process of mechanochemical alloying (Ti₂Ni(II)). The Ti₂Ni (II) phase formed by mechanochemical alloying is more prone to interact with hydrogen with the formation of Ti₂NiH_x hydride than the Ti₂Ni (I) phase present in Ti-Ni powder before alloying. The lattice parameter of the Ti₂Ni (II) phase increases by 17.6 % during hydrogenation and corresponds to Ti₂NiH_{2.8} hydride; this result exceeds the change in the cell volume of Ti₂Ni obtained by other methods.

Keywords: Ti₂Ni, mechanochemical alloying, Ti, heat treatment, electrochemical hydrogenation.

Acknowledgments

The study was performed under the government's statements of work for ISPMS SB RAS (Project FWRW-2021-0005 and FWRW-2021-0009).

References

Klell M., Eichlseder H., Trattner A. Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik. Wiesbaden, 1. Springer Fachmedien Wiesbaden, 2018, 337 p. DOI: 10.1007/978-3-658-20447-1.

2. Astafurova E.G., Melnikov E.V., Astafurov S.V., Ratochka I.V., Mishin I.P., Maier G.G., Moskvina V.A., Zakharov G.N., Smirnov A.I., Bataev V.A. Hydrogen Embrittlement of Austenitic Stainless Steels with Ultrafine-Grained Structures of Different Morphologies. Physical Mesomechanics, 2019, vol. 22, pp. 313-326. DOI: 10.1134/s1029959919040076.



3. Balcerzak M., Nowak M., Jurczyk M. Hydrogenation and electrochemical studies of La–Mg–Ni alloys. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, pp. 1436–1443. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.05.220.

4. Schirowski M, Abellón G., Nuin E., Pampel J., Dolle C., Wedler V., Fellinger T.-P., Spiecker E., Hauke F., Hirsch A. Fundamental insights into the reductive covalent cross-linking of single-walled carbon nanotubes. *Journal of the American Chemical Society*, 2018, vol. 140, pp. 3352–3360. DOI: 10.1021/jacs.7b12910.

5. Tanui P.K., Namwetako J.S., Cherop H.K., Khanna K.M. Hydrogen Storage in Metal Organic Frameworks. *World Scientific News*, 2022, vol. 169, pp. 121–135. DOI: 10.1007/978-3-662-53514-1_5.

6. Mansouri M., Shtender V., Tunsu C., Yilmaz D., Messaoudi O., Ebin B., Sahlberg M., Petranikova M. Production of AB5 materials from spent Ni-MH batteries with further tests of hydrogen storage suitability. *Journal of Power Sources*, 2022, vol. 539, pp. 231459. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2022.231459.

7. Cui N., He P., Luo J.L. Magnesium-based hydrogen storage materials modified by mechanical alloying. *Acta Materialia*, 1999, vol. 47, pp. 3737–3743. DOI: 10.1016/S1359-6454(99)00249-9.

8. Dell'Era A., Pasquali M., Vecchio Ciprioti S., Lupi C., Brotzu A., Mura F., Tuffi R. Synthesis and characterization of a MgNi-RE alloy for hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, pp. 26333–26342. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.207.

9. Zhang J., Zhu Y., Yao L., Xu C., Liu Y., Liab L. State of the art multi-strategy improvement of Mg-based hydrides for hydrogen storage. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, vol. 782, pp. 796–823. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.12.217.

10. Rondelli G. Corrosion resistance tests on NiTi shape memory alloy. *Biomaterials*, 1996, vol. 17, pp. 2003–2008. DOI: 10.1016/0142-9612(95)00352-5.

11. Guiose B., Cuevas F., Dŭcamps B., Percheron-Guŭgan A. Solid-gas and electrochemical hydrogenation properties of pseudo-binary (Ti,Zr)Ni intermetallic compounds. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, vol. 33, pp. 5795–5800. DOI 10.1016/j.ijhydene.2008.07.056.

12. Zhao X., Li J., Yao Y., Ma L., Shen X. Electrochemical hydrogen storage properties of a non-equilibrium Ti₂Ni alloy. *RSC Advances*, 2012, vol. 2, pp. 2149–2153. DOI: 10.1039/C2RA00846G.

13. Buchner H., Gutjahr M., Beccu K.-D., Szufferer H. Wasserstoff in intermetallischen phasen am beispiel des systems titannickel-wasserstoff. *Zeitschrift Fur Metallkunde*, 1972, vol. 63, pp. 497–500.

14. Luan B., Cui N., Zhao H., Liu H.K., Dou S.X. Mechanism of early capacity loss of Ti_2Ni hydrogen-storage alloy electrode. *Journal of Power Sources*, 1995, vol. 55, pp. 101–106. DOI: 10.1016/0378-7753(94)02162-V.

15. Luan B., Kennedy S.J., Liu H.K., Dou, S.X. On the charge/discharge behavior of Ti₂Ni electrode in 6 M KOH aqueous and deuterium oxide solutions. *Journal of Alloys and Compounds*, 1998, vol. 267, pp. 224–230. DOI: 10.1016/s0925-8388(97)00461-1.

16. Fokin V.N., Fokina E.E., Korobov I.I., Tarasov B.P. Hydriding of Intermetallic Compound Ti₂Ni. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2014, vol. 59, pp. 1073–1076. DOI: 10.1134/S0036023614100076.

17. Geng M., Han J., Feng F., Northwood D.O. Hydrogen-absorbing alloys for the NICKEL– METAL hydride battery. *International Journal of Hydrogen Energy*, 1998, vol. 23, pp. 1055–1060. DOI: 10.1016/S0360-3199(98)00020-2.

18. Anik M., Kucukdeveci N. Discharging characteristics of CoB nano powders. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, vol. 38, pp. 1501–1509. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2012.11.090.

19. Hosni B., Li X., Khaldi C., ElKedim O., Lamloumia J. Structure and electrochemical hydrogen storage properties of Ti₂Ni alloy synthesized by ball milling. *Journal of Alloys and Compounds*, 2014, vol. 615, pp. 119–125. DOI: 10.1016/j.jallcom.2014.06.152.



20. Zadorozhnyi V.Y., Skakov Y.A. & Milovzorov G.S. Appearance of metastable states in Fe-Ti and Ni-Ti systems in the process of mechanochemical synthesis. *Metal Science and Heat Treatment*, 2008, vol. 50, art. No. 404. DOI: 10.1007/s11041-008-9078-4.

21. Abdulmenova E.V., Kulkov S.N. Mechanical high-energy treatment of TiNi powder and phase changes after electrochemical hydrogenation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2021, vol. 46, pp. 823–836. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.09.171.

22. Nelson J.B., Riley D.P. An experimental investigation of extrapolation methods in the derivation of accurate unit-cell dimensions of crystals. *Proceedings of the Physical Society*, 1945, vol. 57, pp. 160–177. DOI: 10.1088/0959-5309/57/3/302.

23. Scherrer P. Bestimmung der Gruße und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Runtgenstrahlen. In: *Nachrichten von der Kunigl Gesellschaft der Wissenschaften zu Guttingen, Mathematisch-physikalische Klasse*, 1918, vol. 2, pp. 98–100.

24. Grigoriev M.V., Molchunova L.M., Buyakova S.P., Kulkov S.N. Effect of mechanical treatment on manner, structure and properties of nonsto-ichiometric titanium carbide powder. *Russian Physics Journal*, 2013, vol. 56, no. 7/2, pp. 206–210. (In Russian).

25. Avvakumov Ye.G. *Mekhanicheskiye metody aktivatsii khimicheskikh protsessov* [Mechanical Methods for Activation of Chemical Processes]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1986, 305 p. (In Russian).

26. Hiemenz P.C. *Principles of Colloid and Surface Chemistry*, New York, Marcel Dekker Publisher, 1997, 650 p.

27. Buyakova S.P., Kul'kov S.N. Effect of mechanical processing of ultrafine ZrO2+3wt%MgO powder on the microstructure of ceramics produced from it. *Inorganic Materials*, 2010, vol. 46, pp. 1155–1158. DOI: 10.1134/S0020168510100249.

28. Anikeev S.G., Kaftaranova M.I., Khodorenko V.N., Artyukhova N.V., Garin A.S., Gyunter V.E. Effect of titanium additions on structural aspects of porous TiNi-based materials prepared by diffusion sintering. *Inorganic Materials*, 2020, vol. 56, No. 9, pp. 918–923. DOI: 10.1134/S0020168520090022.

29. Berdonosova E.A., Zadorozhnyy V.Y., Zadorozhnyy M.Y., Geodakian K.V., Zheleznyi M.V., Tsarkov A.A., Klyamkin S.N. Hydrogen storage properties of TiFe-based ternary mechanical alloys with cobalt and niobium. A thermochemical approach. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, pp. 29159–29165. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.03.057.

30. Zhang Z., Elkedim O., Balcerzak M., Jurczyk M., Chassagnonc R. Effect of Ni content on the structure and hydrogenation property of mechanically alloyed TiMgNi_x ternary alloys. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, pp. 23751–23758. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2017.03.051.

31. In: Massalski T.B., Murray J.L., Bennett L.H., Baker H., eds. *Binary Alloy Phase Diagrams*. ASM International, Materials Park, OH, 1990, vol. 3, pp. 2874–2876.

32. Yurko G.A., Barton J.W., Gordon Parr J. The crystal structure of Ti₂Ni. *Acta Crystallo-graphica*, 1959, vol. 12, pp. 909–911. DOI: 10.1107/S0365110X59002559.

33. Pelton A., Trăpanier C., Gong X.Y., Wick A., Chen K.C. Structural and diffusional effects of hydrogen in TiNi. In: T.W. Duerig, A. Pelton, eds. Proceedings of SMST-2003, Monterey, California, Materials Park, 2003, pp. 2–9.

34. Saito T., Yokoyama, T., Takasaki, A. Hydrogenation of TiNi shape memory alloy produced by mechanical alloying. *Journal of Alloys and Compounds*, 2011, vol. 509, pp. S779–S781. DOI: 10.1016/j.jallcom.2010.10.128.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

ISSN 2410-9908

nal.m http://dream-journal.org

Подана в журнал: 14.04.2022 УДК 544.463 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.025-035

УВЕЛИЧЕНИЕ СОРБЦИИ ВОДОРОДА ПОРОШКОМ Ті₂Ni ПРИ МЕХАНОХИМИЧЕСКОМ ЛЕГИРОВАНИИ

Е. В. Абдульменова^{а), *}, С. П. Буякова⁶⁾, С. Н. Кульков

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН), просп. Академический, 2/4, г. Томск, 634055, Российская Федерация

^{a)} ^(D) https://orcid.org/0000-0002-9594-5706 ^(E) Ekaterina.V.Abdulmenova@yandex.ru; ^{b)} ^(D) https://orcid.org/0000-0002-9594-5706 ^(E) sbuyakova@ispms.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: Ekaterina.V.Abdulmenova@yandex.ru Адрес для переписки: просп. Академический, 2/4, г. Томск, 634055, Российская Федерация Тел.: +7 (3822) 286–842

Разработан способ увеличения сорбции водорода порошковым Ti₂Ni, заключающийся в механохимическом легировании титаном порошка Ti-Ni вблизи эквиатомного состава. Предложенный способ позволяет увеличить содержание водорода в несколько раз в порошковом Ti₂Ni, что делает весьма перспективным его использование для безопасного хранения и транспортировки водорода в виде гидрида металла с высоким содержанием водорода и высоким качеством водорода, как топливного газа. Разработанный способ является менее затратным в сравнении с другими технологическими подходами по насыщению материалов водородом, что представляет экономический и практический интерес. При механохимическом легировании использовалась высокоинтенсивная планетарная шаровая мельница со скоростью вращения барабана 1820 об/мин, длительностью обработки 300 сек. Методом рентгенофазового анализа показано, что порошок состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механохимического легирования состоял из TiNi в двух модификациях B2 и B19`, а также двух фаз Ti₂Ni с разным параметром ячейки. Существование двух фаз Ti₂Ni обусловлено как наследованием этой фазы из исходного порошка Ti-Ni (Ti₂Ni(I)), так и ее формированием при взаимодействии титана с TiNi (B2, B19`) в процессе механохимического легирования (Ti₂Ni(II)). Выявлено, что образованная фаза Ti₂Ni (II) является более активной при поглощении водорода, что обусловило формирование гидрида Ti₂NiH_x, в то время как при взаимодействии водорода с фазой Ti₂Ni(I) формируется твердый раствор. Параметр ячейки фазы Ti₂Ni (II) в процессе гидрирования увеличился на 17,6 % и соответствовал составу гидрида Ti₂NiH_{2,8}, что превышает изменение объема ячейки Ti₂Ni, полученного другими методами.

Ключевые слова: Ti₂Ni, механохимические легирование, Ti, термическая обработка, электрохимическое гидрирование.

1. Введение

Водород является перспективным энергоносителем, поскольку имеет высокую удельную теплоту сгорания по сравнению с другими видами топлива, например бензин, природный газ и др. [1, 2]. Однако для его эффективного и безопасного использования необходимо исследование и разработка новых способов хранения водорода при комнатной температуре и атмосферном давлении, которые бы превосходили хранение в сжатом или жидком виде [3].

В настоящее время исследуются перспективные системы хранения материала: физическое хранение (углеродистые материалы, металлоорганические каркасы) и химическое хранение (гидриды металлов) [4–6]. Сплавы аккумулируют атомы водорода из щелочных

Abdulmenova E. V., Buyakova S. P., and Kulkov S. N. Increasing hydrogen sorption by Ti_2Ni powder using mechanochemical alloying // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. - 2022. - Iss. 3. - P. 25–35. - DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.025-035.



ISSN 2410-9908

электролитов, т.е. аккумулируют водород в Ni-MH-батареях, в связи с этим такие сплавы должны обладать не только высоким массовым содержанием водорода, но и отличной коррозионной стойкостью при погружении в щелочные электролиты. Так, сплавы для хранения водорода на основе LaNi₅, Zr-Ti-V и Mg использовались в качестве материалов для промышленного производства Ni-MH-батарей [7]. Однако низкая теоретическая емкость сплава LaNi₅, плохие кинетические свойства сплавов на основе Zr-Ti-V и отсутствие коррозионной стойкости сплавов Mg в щелочных электролитах, а также их высокая стоимость и большой удельный вес ограничивают их применение [8, 9].

Сплав Ti₂Ni с гранецентрированной структурой является перспективным материалом при хранении и транспортировке водорода, поскольку обладает высокой коррозионной стойкостью, имеет низкий удельный вес и способен обратимо адсорбировать водород [10-12]. В работах [13-16] обнаружено, что при взаимодействии сплава Ti₂Ni с водородом могут образовываться шесть гидридных соединений: Ti₂NiH_{0.5}, Ti₂NiH, Ti₂NiH₂ и Ti₂NiH_{2,5}, Ti₂NiH_{3,3}, Ti₂NiH_{3.6}. Получают сплав Ti₂Ni разными методами – химическим восстановлением, измельчением, плавлением и электродеокислением [17–19]. При этом способ получения сплава Ti₂Ni определяет аккумулирующую способность сплава к водороду [18, 19]. Обычно при синтезе сплава Ti₂Ni используются отдельные порошки Ti и Ni, в то время как данные о механохимическом легировании порошка Ti-Ni вблизи эквиатомного состава титаном отсутствуют, хотя полученный сплав Ti₂Ni механохимическим легированием системы Ti-Ni может обладать лучшей гидрирующей способностью за счет формирования высокодефектной структуры. С другой стороны, в [20] упоминается, что при реализации механохимического синтеза может увеличиваться область гомогенности, что может повлиять на состояние сформированной фазы Ti₂Ni. Таким образом, цель работы – выявление закономерности влияния механохимического легирования титаном на структуру и фазовый состав порошка Ti-Ni и на его насыщение водородом.

2. Материалы и методы исследования

В работе использованы промышленные порошки никелида титана (Ti-Ni) и титана (Ti) производства «Полема» (Россия). Механохимическое легирование заключалось в обработке порошковой смеси (Ti-Ni) – Ti в планетарной шаровой мельнице и гомогенизирующей термической обработке в вакууме. Содержание порошка Ti, добавляемого в смесь с порошком Ti-Ni, составляло 15 % мас. Обработка в мельнице составляла 300 секунд при скорости вращения барабана мельницы 1820 об/мин. Соотношение взаимодействия керамических мелющих тел с порошковыми смесями выдерживалось как 5:1. При аналогичных условиях была проведена механическая обработка порошка Ti-Ni. Гомогенизирующая термическая обработка, обеспечивающая фазовую однородность порошковой смеси Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.), проводилась при температуре 1000 °C с изотермической выдержкой в течение 30 мин при остаточном парциальном давлении 10^{-4} мм. рт. ст. Скорость нагрева выдерживали 5 °C/мин.

Порошковые смеси гидрировали электрохимическим методом в ячейке. Электролит был приготовлен по методике, описанной авторами работы [21], и представлял собой смесь 20 % водного раствора хлорида натрия с декстрином (1,5 г/л). Плотность катодного тока составляла 55 мА/см², а напряжение в ячейке – 4 В. Перед гидрирование полученные смеси замачивали в этиловом спирте в течение 2 мин. Длительность электрохимического гидрирования составляла 360 мин.

Анализ структуры порошков проводили посредством сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) TESCAN VEGA3 SBH. Фазовый состав изучали при помощи рентгеновской дифракции при CuKα-излучении. Съемка производилась в диапазоне углов 20 от 10 до 100 град. Параметры кристаллической ячейки определяли экстраполяцией по аппроксимирующей функции cos²(θ) [22]. Уширение рентгеновских линий на половине высоты (FWHM) для фазы Ti₂Ni было определено из аппроксимации дифракционных линий при использовании



ISSN 2410-9908

спектров функции Лоренца для дифракционной линии от плоскости (511). Область когерентного рассеяния (ОКР) рассчитывали, используя уравнение Шеррера [23], для наиболее интенсивных линий – рентгеновских спектров.

3. Результаты и обсуждение

http://dream-journal.org



Рис. 1. СЭМ изображения и распределения частиц по размерам порошка Ti-Ni в исходном состоянии (*a*), после механической обработки порошков Ti-Ni (*б*) и Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) (в) и механически обработанный Ti-Ni (85 % мас.) – Ti после гомогенизирующей термической обработки (*г*)

На рис. 1 представлены СЭМ изображения и распределения частиц по размерам порошка Ti-Ni и порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % масс).

Для выявления влияния механохимического легирования титаном на структуру частиц порошка Ti-Ni был проведен гранулометрический анализ порошков метолдом СЭМ. Для сравнения полученных результатов был также изучен порошок Ti-Ni после механической обрботки при аналогичных условиях. Порошок Ti-Ni в исходном состоянии состоял из частиц нерегулярной формы с развитой поверхностью, средний размер частиц <d> составлял 11 мкм при стандартном отклонении $\sigma = 7,5$ мкм, распределение частиц по размерам имело нормальный вид. Механическая обработка привела к существенному изменению гранулометрического состава и появлению рельефа на поверхности частиц порошка Ti-Ni, видно заметное увеличение <d> до 33,2 мкм и $\sigma = 25,7$ мкм. Распределение частиц по размерам изменилось на бимодальное, что обусловлено дей-

Abdulmenova E. V., Buyakova S. P., and Kulkov S. N. Increasing hydrogen sorption by Ti_2Ni powder using mechanochemical alloying // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. - 2022. - Iss. 3. - P. 25–35. - DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.025-035.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

http://dream-journal.org

ISSN 2410-9908

ствием двух конкурирующих механизмов – разрушением частиц и их агрегацией. Увеличение микронапряжений в частицах порошка в процессе механической обработки за счет истирания, свободного удара, раздавливания приводит к их разрушению [24, 25]. Избыточная свободная энергия образующихся при разрушении более мелких частиц является причиной образования агрегатов [26, 27]. После механической обработки Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) <d> составил 9,5 мкм, а у 7,0 мкм, что меньше <d> частиц порошка Ti-Ni в исходном состоянии и после механической обработки. По-видимому, введение титана (<d> = 6,5 мкм, σ = 6,7 мкм) в смесь с порошком Ti-Ni препятствует агрегированию в процессе механохимического легирования. В процессе термической обработки мас.) <d> тi (15 % мас.) – Ti (15 % мас.) – Ti (15 % мас.) <d> составил 9,5 мкм, в у 7,0 мкм, что меньше <d> частиц порошка Ti-Ni в исходном состоянии и после механической обработки. По-видимому, введение титана (<d> = 6,5 мкм, σ = 6,7 мкм) в смесь с порошком Ti-Ni препятствует агрегированию в процессе механохимического легирования. В процессе термической обработки механически обработанного порошка состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) <d> yвеличился до 11,5 мкм, что более чем в 1,2 раза превышает размер частиц в этой порошковой смеси после механической обработки. Укрупнение частиц в процессе термической обработки обусловлено их консолидацией. В работе [28] указывается, что при термической обработке при температуре около 1000 °C может происходить оплавление наиболее легкоплавкой составляющей порошковой смеси Ti₂Ni.



Рис. 2. Рентгенограммы порошков: *1* – Ті-Nі в исходном состоянии; *2* – Ті в исходном состоянии; *3* – Ті-Nі после механической обработки; *4* – порошковая смесь состава Ті-Ni (85 % мас.) – Ті (15 % мас.) после механической обработки: ■ – ТіNi (B2); ■ – ТіNi (B19`); ◆ – Ti₂Ni (E9₃); ● – Ni₃Ti (D0₂₄); ● – Ti (A3). Вставки на рентгенограммах порошка Ti-Ni и порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механической обработки демонстрируют появление рентгеноаморфной фазы

На рис. 2 представлены рентгенограммы порошков Ti-Ni и Ti, а также порошков Ti-Ni и Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механической обработки. Видно, что фазовый состав порошка Ti-Ni в исходном состоянии представлен фазами TiNi в кубической (B2) и моноклинной модификациях (B19`), Ti₂Ni с кубической структурой (E9₃) и Ni₃Ti с гексагональной сингонией (D0₂₄). На рентгенограмме порошка Ti присутствовали дифракционные линия, характерные фазе α -Ti с гексагональной сингонией (A3). На рентгенограммах порошка Ti-Ni после механической обработки различимы дифракционные линии, советующие фазе TiNi (B2). На рентгенограмме порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механической обработки различимы дифракционные линии, советующие фазе TiNi (B2). На рентгенограмме порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механической обработки различимы дифракционные линии, советующие фазе TiNi (B2). На рентгенограмме порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механической обработки различимы дифракционные линии, советующие фазе TiNi (B2). На рентгенограмме порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механической обработки различимы дифракционные линии фаз TiNi (B2) и α -Ti. Размер ОКР фазы TiNi (B2) в порошке Ti-Ni составлял 30 нм, в то время как при механической обработки Ti-Ni и механохимическом легировании порошка он уменьшился до ~5 нм. По-видимому, значительное уширение

Abdulmenova E. V., Buyakova S. P., and Kulkov S. N. Increasing hydrogen sorption by Ti_2Ni powder using mechanochemical alloying // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. - 2022. - Iss. 3. - P. 25–35. - DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.025-035.



ISSN 2410-9908

дифракционных линий всех фаз в процессе механической обработки обусловлено, как уменьшением размера OKP [29], так возникновением концентрационной неоднородности при легировании титаном полифазного порошка Ti-Ni. Также на рентгенограммах, полученных от порошков после механической обработки, появляется широкая дифракционная линия в интервале углов 2 Θ от 40 ° до 46 °, свидетельствующая о формировании рентгеноаморфного состояния, что согласуется с работами авторов [30].

На рис. 3 представлены рентгенограммы порошка Ti-Ni после термической обработки, порошковой смеси Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механохимического легирования и после гидрирования этого состава (рис. 3). После термической обработки порошка Ti-Ni на рентгенограмме присутствуют дифракционные линии фаз TiNi (B2, B19`), а также дифракционные линии, принадлежащие фазам Ti₂Ni и Ni₃Ti. После термической обработки легирования состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) на рентгенограммах присутствования состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) на рентгенограммах присутствования состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) на рентгенограммах присутствовани дифракционные линии, принадлежащие фазам TiNi (B2, B19`) и Ti₂Ni. Обращает на себя внимание расщепление рефлексов фазы Ti₂Ni с индексами отражения 422, 511 и 440, т. е., по-видимому, в порошке присутствует две фазы Ti₂Ni с разным соотношением титана и никеля и, соответственно, с разными параметрами решеток. Известно [31], что для сплава Ti₂Ni существует область гомогенности ≈ 2 % мас. Параметр ячейки фазы Ti₂Ni (I) составил $a = 1,1285 \pm 5 \cdot 10^{-4}$ нм и сохранялся без изменений при введении титана в порошковую смесь с Ti-Ni, подвергаемых механохимическому легированию и термической обработке. Параметр элементарной ячейки фазы Ti₂Ni (II) уменьшился до 1,1275 ± 5 \cdot 10^{-4} нм.



Рис. 3. Рентгенограммы порошков: *I* – Ti-Ni после термической обработки; 2 – порошковая смесь состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механохимического легирования; *3* – порошковая смесь 2 подвергнутая гидрированию в течение 360 мин: ■ – TiNi (B2);
■ – TiNi (B19[°]); ◆ – Ti₂Ni (E9₃) (I); ● – Ni₃Ti (D0₂₄); ● – Ti₂Ni (E9₃) (II); Δ – Ti₂NiH_x.
Вставка на рентгенограмме порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после механохимического легирования демонстрирует появление расщепления рефлексов 511

Можно предположить, что фаза Ti₂Ni (I) легированным порошком наследована из исходного порошка Ti-Ni, которая подверглась консолидации в процессе высокоэнергетической механической обработки и термической обработки. Параметр ячейки Ti₂Ni (I) согласуется с параметром ячейки (a = 1,1278 нм) фазы Ti₂Ni в консолидированном порошковом материале [32]. Фаза Ti₂Ni (II) образовалась в результате механохимического легирования при

32



высокоинтенсивной обработке и в результате последующей термообработки порошковой смеси (Ti-Ni) – Ti.

На рентгенограмме порошковой смеси Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) после гидрирования в течение 360 мин, присутствуют дифракционные линии, принадлежащие кубической фазе гидрида Ti₂NiH_x. При этом дифракционные линии гидридной фазы имеют инверсию рентгеновских пиков, по-видимому, вследствие концентрационной неоднородности содержания водорода. При формировании твердого раствора, объем элементарной ячейки увеличивается до 5 % [33], в то время как образование гидрида conposoждается увеличением объема элементарной ячейки до 30 %. Параметр ячейки фазы Ti₂Ni (II) в процессе гидрирования увеличился от 1,1275 ± $5 \cdot 10^{-4}$ до 1,1902 ± $5 \cdot 10^{-4}$ нм, что соответствует увеличению объема ячейки на 17,6 %, указывающее на образование гидрида, при этом параметр ячейки соответствует составу гидрида Ti₂NiH_{2,8}. Элементарная ячейка фазы Ti₂Ni (I) не претерпела столь значительных изменений, и в процессе гидрирования *a* составил 1,1263± $5 \cdot 10^{-4}$ нм. Похожий результат по увеличению параметра ячейки, а затем его уменьшению приводится в работе [34], по-видимому, образование гидрида на основе Ti₂Ni (II) может происходить при участии Ti₂Ni (I), а уменьшение параметра ячейки Ti₂Ni (I) связано с перераспределением водорода с учетом концентрационной неоднородности частиц.

В работе [14] сплав Ti₂Ni подвергался электрохимическому гидрированию, в результате которого объем элементарной ячейки увеличился на 14,1 %. В работе [33] газофазному гидрированию подвергался сплав TiNi (B2), объем элементарной ячейки при таком способе гидрирования увеличился на 2,2 %. Достигнутое увеличение объема элементарной ячейки Ti₂Ni (II) в процессе гидрирования порошковой смеси состава Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) в течение 360 мин, составляющее 17,6 %, сопоставимо с данными работ [14, 33]. Таким образом, с учетом факта накопления водорода предпринятое механохимическое легирование титаном порошка Ti-Ni представляет практический интерес.

4. Заключение

В порошке Ti-Ni после термической обработки присутствовали фазы TiNi (B2, B19`), Ti₂Ni и Ni₃Ti, в то время как при механохимическом легировании Ti-Ni (85 % мас.) – Ti (15 % мас.) присутствовали фазы TiNi (B2, B19`) и две фазы Ti₂Ni разного генезиса. Обнаружено, что наиболее активной к водороду является фаза Ti₂Ni (II), которая образовывается в результате механохимического легирования при высокоинтенсивной обработке и последующей термообработки, в отличие от Ti₂Ni (I), унаследованной легированным порошком из порошка Ti-Ni. Объем элементарной ячейки Ti₂Ni (II) в процессе гидрирования в течение 360 мин увеличился на 17,6 %, что указывает на образование гидрида Ti₂NiH_{2,8}.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственных заданий ИФПМ СО РАН проекта FWRW-2021-0005 и проекта FWRW-2021-0009.

Литература

1. Klell M., Eichlseder H., Trattner A. Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik. – Wiesbaden : Springer Fachmedien Wiesbaden, 2018. – 337 p. – DOI: 10.1007/978-3-658-20447-1.

2. Hydrogen Embrittlement of Austenitic Stainless Steels with Ultrafine-Grained Structures of Different Morphologies / E. G. Astafurova, E. V. Melnikov, S. V. Astafurov, I. V. Ratochka, I. P. Mishin, G. G. Maier, V. A. Moskvina, G. N. Zakharov, A. I. Smirnov, V.A. Bataev // Physical Mesomechanics. – 2019. – Vol. 22. – P. 313–326. – DOI: 10.1134/s1029959919040076.





3. Balcerzak M., Nowak M., Jurczyk M. Hydrogenation and electrochemical studies of La-Mg-Ni alloys // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Vol. 42, No 2. – P. 1436–1443. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.05.220.

4. Fundamental insights into the reductive covalent cross-linking of single-walled carbon nanotubes / M. Schirowski, G. Abellón, E. Nuin, J. Pampel, C. Dolle, V. Wedler, T.-P. Fellinger, E. Spiecker, F. Hauke, A. Hirsch // Journal of the American Chemical Society. – 2018. – Vol. 140, No. 9. – P. 3352–3360 – DOI: 10.1021/jacs.7b12910.

5. Hydrogen Storage in Metal Organic Frameworks / P. K. Tanui, J. S. Namwetako, H. K. Cherop, K. M. Khanna // World Scientific News. – 2022. – Vol. 169. – P. 121–135. – DOI: 10.1007/978-3-662-53514-1_5.

6. Production of AB5 materials from spent Ni-MH batteries with further tests of hydrogen storage suitability / M. Mansouri, V. Shtender, C. Tunsu, D. Yilmaz, O. Messaoudi, B. Ebin, M. Sahlberg, M. Petranikova // Journal of Power Sources. – 2022. – Vol. 539. – P. 231459. – DOI: 10.1016/j.jpowsour.2022.231459.

7. Cui N., He P., Luo J. L. Magnesium-based hydrogen storage materials modified by mechanical alloying // Acta Materialia. – 1999. – Vol. 47. – P. 3737–3743. – DOI: 10.1016/S1359-6454(99)00249-9.

8. Synthesis and characterization of a MgNi-RE alloy for hydrogen storage / A. Dell'Era, M. Pasquali, S. Vecchio Ciprioti, C. Lupi, A. Brotzu, F. Mura, R. Tuffi // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Vol. 42, No. 42. – P. 26333–26342. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.207.

9. State of the art multi-strategy improvement of Mg-based hydrides for hydrogen storage / J. Zhang, Y. Zhu, L. Yao, C. Xu, Y. Liu, L. Liab // Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – Vol. 782. – P. 796–823. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.12.217.

10. Rondelli G. Corrosion resistance tests on NiTi shape memory alloy // Biomaterials. – 1996. – Vol. 17. – P. 2003–2008. – DOI: 10.1016/0142-9612(95)00352-5.

11. Solid-gas and electrochemical hydrogenation properties of pseudo-binary (Ti,Zr)Ni intermetallic compounds / B. Guiose, F. Cuevas, B. Dŭcamps, A. Percheron-Guŭgan // International Journal of Hydrogen Energy. – 2008. – Vol. 33. – P. 5795–5800. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2008.07.056.

12. Electrochemical hydrogen storage properties of a non-equilibrium Ti_2Ni alloy / X. Zhao, J. Li, Y. Yao, L. Ma, X. Shen // RSC Advances. – 2012. – Vol. 2. – P. 2149–2153. – DOI: 10.1039/C2RA00846G.

13. Wasserstoff in intermetallischen phasen am beispiel des systems titannickel-wasserstoff H. Buchner, M. Gutjahr, K.-D. Beccu, H. Sgufferer // Zeitschrift Fur Metallkunde. – 1972. – Vol. 63. – P. 497–500.

14. Mechanism of early capacity loss of Ti_2Ni hydrogen-storage alloy electrode / B. Luan, N. Cui, H. Zhao, H. K. Liu, S. X. Dou // Journal of Power Sources – 1995. – Vol. 55. – P. 101–106. – DOI: 10.1016/0378-7753(94)02162-V.

15. On the charge/discharge behavior of Ti_2Ni electrode in 6 M KOH aqueous and deuterium oxide solutions / B. Luan, S. J. Kennedy, H. K. Liu, S. X. Dou // Journal of Alloys and Compounds. – 1998. – Vol. 267. – P. 224–230. – DOI: 10.1016/s0925-8388(97)00461-1.

16. Hydriding of Intermetallic Compound Ti₂Ni / V. N. Fokin, E. E. Fokina, I. I. Korobov, B. P. Tarasov // Russian Journal of Inorganic Chemistry. -2014. - Vol. 59. - P. 1073–1076. - DOI: 10.1134/S0036023614100076.

17. Hydrogen-absorbing alloys for the NICKEL-METAL hydride battery / M. Geng, J. Han, F. Feng, D. O. Northwood // International Journal of Hydrogen Energy. – 1998. – Vol. 23. – P. 1055–1060. – DOI: 10.1016/S0360-3199(98)00020-2.

18. Anik M., Kucukdeveci N. Discharging characteristics of CoB nano powders // International Journal of Hydrogen Energy. – 2013. – Vol. 38. – P. 1501–1509. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2012.11.090.



19. Structure and electrochemical hydrogen storage properties of Ti_2Ni alloy synthesized by ball milling / B. Hosni, X. Li, C. Khaldi, O. ElKedim, J. Lamloumia // Journal of Alloys and Compounds. – 2014. – Vol. 615. – P. 119–125. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2014.06.152.

20. Zadorozhnyi V. Y., Skakov Y. A. & Milovzorov G. S. Appearance of metastable states in Fe-Ti and Ni-Ti systems in the process of mechanochemical synthesis // Metal Science and Heat Treatment. – 2008. – Vol. 50. – Art. No. 404. – DOI: 10.1007/s11041-008-9078-4.

21. Abdulmenova E. V., Kulkov S. N. Mechanical high-energy treatment of TiNi powder and phase changes after electrochemical hydrogenation // International Journal of Hydrogen Energy. – 2021. – Vol. 46. – P. 823–836. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.09.171.

22. Nelson J. B., Riley D. P. An experimental investigation of extrapolation methods in the derivation of accurate unit-cell dimensions of crystals // Proceedings of the Physical Society. – 1945. – Vol. 57. – P. 160–177. – DOI: 10.1088/0959-5309/57/3/302.

23. Scherrer P. Bestimmung der Gruße und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Runtgenstrahlen // Nachrichten von der Kunigl Gesellschaft der Wissenschaften zu Guttingen, Mathematisch-physikalische Klasse. – 1918. – Vol. 2. – P. 98–100.

24. Влияние механической обработки на структуру и свойства порошка нестехиометрического карбида титана / М. В. Григорьев, Л. М. Молчунова, С. П. Буякова, С. Н. Кульков // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 7/2. – С. 206–210.

25. Аввакумов Е. Г. Механические методы активации химических процессов. – Новосибирск : Наука, 1986. – 305 с.

26. Hiemenz P. C. Principles of Colloid and Surface Chemistry. – New York : Marcel Dekker Publisher, 1997. – 650 p.

27. Buyakova S. P., Kul'kov S. N. Effect of mechanical processing of ultrafine ZrO2+3wt%MgO powder on the microstructure of ceramics produced from it // Inorganic Materials. – 2010. – Vol. 46. – P. 1155–1158. – DOI: 10.1134/S0020168510100249.

28. Effect of titanium additions on structural aspects of porous tini-based materials prepared by diffusion sintering / S. G. Anikeev, M. I. Kaftaranova, V. N. Khodorenko, N. V. Artyukhova, A. S. Garin, V. E. Gyunter // Inorganic Materials. – 2020. – Vol. 56, No. 9. – P. 918–923. – DOI: 10.1134/S0020168520090022.

29. Hydrogen storage properties of TiFe-based ternary mechanical alloys with cobalt and niobium. A thermochemical approach / E. A. Berdonosova, V. Y. Zadorozhnyy, M. Y. Zadorozhnyy, K. V. Geodakian, M. V. Zheleznyi, A. A. Tsarkov, S. N. Klyamkin // International Journal of Hydrogen Energy. – 2019. – Vol. 44. – P. 29159–29165. – DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.03.057.

30. Effect of Ni content on the structure and hydrogenation property of mechanically alloyed TiMgNix ternary alloys / Z. Zhang, O. Elkedim, M. Balcerzak, M. Jurczyk, R. Chassagnonc // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017.– Vol. 42. – P. 23751–23758. – DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2017.03.051.

31. Binary Alloy Phase Diagrams / T. B. Massalski, J. L. Murray, L. H. Bennett, H. Baker // ASM International. – 1990. – Vol. 3. – P. 2874–2876.

32. Yurko G. A., Barton J. W., Gordon Parr J. The crystal structure of Ti_2Ni // Acta Crystallographica. – 1959. – Vol. 12. – P. 909–911. – DOI: 10.1107/S0365110X59002559.

33. Structural and diffusional effects of hydrogen in TiNi / A. Pelton, C. Trйpanier, X. Y. Gong, A. Wick, K. C. Chen // Proceedings of SMST-2003, Monterey, California / ed. by T. W. Duerig, A. Pelton. – Materials Park, 2003. – P. 2–9.

34. Saito T., Yokoyama T., Takasaki A. Hydrogenation of TiNi shape memory alloy produced by mechanical alloying // Journal of Alloys and Compounds. – 2011. – Vol. 509. – P. S779–S781. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2010.10.128.



ISSN 2410-9908

Received: 10.04.2022 Revised: 12.05.2022 Accepted: 24.06.2022 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046

ATOMISTIC DETERMINATION OF STRESS FIELDS IN SAMPLES WITH DEFECTS

K. A. Mushankova $^{a)*}$ and L. V. Stepanova $^{b)}$

Samara National Research University, 34 Moskovskoe Shosse, Samara, Russian Federation

^{a)} karina-mush21@mail.ru;

^{b)} D https://orcid.org/0000-0002-6693-3132 🕺 stepanovalv2015@yandex.ru

^{*}Corresponding author. E-mail: karina-mush21@mail.ru Address for correspondence: st. Moskovskoye Shosse, 34, Samara, 443086, Russian Federation

The main goal of the study is the atomistic determination of the static stress-strain state at the crack tip in isotropic and anisotropic linearly elastic materials by the molecular dynamics method implemented in the open source LAMMPS (Large-scale Atomistic/Molecular Massively Parallel Simulator). An extensive class of computational experiments has been carried out for a singlecrystal copper specimen with a central crack in the LAMMPS. The circumferential distributions of the stress tensor components obtained by molecular dynamics are compared with the angular distributions of brittle fracture continuum mechanics, i.e. with Williams' analytical solution to the problem of an infinite plate loaded with a central crack in a linearly elastic isotropic material. The comparison of the angular distributions of the stress tensor components gained in the framework of atomistic modeling and the angular distributions obtained from the classical solution of continuum mechanics has shown that, at the nanoscale level, the stress fields are in good agreement with their macroscopic values.

Keywords: molecular dynamics approach, classical fracture mechanics, embedded atom potential (EAM), crack propagation.

References

1. Hello G., Tahar M.B., Roelandt J.-M. Analytical determination of coefficients in crack-tip stress expansions for a finite crack in an infinite plane medium. *International Journal of Solids and Structures*, 2012, vol. 49 (3–4), pp. 556–566. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.024.

2. Stepanova L.V., Yakovleva E.M. Mixed-mode loading of the cracked plate under plane stress conditions. *Vestnik PNIPU. Mekhanika*, 2014, No. 3, pp. 129–162. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.08. (In Russian).

3. Rashidi Moghaddam M., Ayatollahi M.R., Berto F. The application of strain energy density criterion to fatigue crack growth behavior of cracked components. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2018, vol. 97, pp. 440–447. DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.014.

4. Razavi M.J., Aliha M.R.M., Berto F. Application of an average strain energy density criterion to obtain the mixed mode fracture load of granite rock tested with the cracked asymmetric fourpoint bend specimen. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2018, vol. 97, pp. 419–425. DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.004.

5. Malıkovó L., Veselə V., Seitl S. Estimation of the crack propagation direction in a mixedmode geometry via multi-parameter fracture criteria. *Frattura ed Integrita Strutturale*, 2015, 9 (33), 25–32. DOI: 10.3221/igf-esis.33.04.



6. Chandra S., Kumar N.N., Samal M.K., Chavan V.M., Patel R.J. Molecular dynamics simulation of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 117, pp. 518–526. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.02.032.

7. Andric P., Curtin W.A. New theory for Mode I crack-tip dislocation emission. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, vol. 106, pp. 315–337. DOI: 10.1016/j.jmps.2017.06.006.

8. Gao Ying-jun, Deng Qian-qian, Huang Li-lin, Ye Li, Wen Zhen-chuan, Luo Zhi-rong. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 130, pp. 64–75. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.01.003.

9. Cui C.B., Beom H.G. Molecular dynamics simulation of edge cracks in copper and aluminium single crystals. *Materials Science and Engineering A*, 2014, vol. 609, pp. 102–109. DOI: 10.1016/j.msea.2014.04.101.

10. Stepanova L.V., Roslyakov P.S. Multi-parameter description of the crack-tip stress field: analytic determination of coefficients of crack-tip stress expansions in the vicinity of the crack tips of two finite cracks in an infinite plane medium. *International Journal of Solids and Structures*, 2016, vols. 100–101, pp. 11–28. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2016.06.032.

11. Hardy R.J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: shock waves. *Journal Chemical Physics*, 1982, vol. 76, pp. 622–628. DOI: 10.1063/1.442714.

12. Berinskii I.E., Dvas N.G., Krivtsov A.M., et al. *Uprugie i teplovye svoystva idealnykh kristallov* [Theoretical Mechanics. Elastic Properties of Monoatomic and Diatomic Crystals: educational book, ed., A.M. Krivtsov]. St. Petersburg, Izd-vo Politekhn. Un-ta, 2009. (In Russian).

13. Gaillac Romain, Pullumbi Pluton and Coudert Fransois-Xavier. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, vol. 28 (27), 275201. DOI: 10.1088/0953-8984/28/27/275201.



ISSN 2410-9908

Подана в журнал: 10.04.2022 УДК 539.42 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046

http://dream-journal.org

АТОМИСТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ С ДЕФЕКТАМИ

К. А. Мушанкова^{а)*}, Л. В. Степанова^{б)}

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Московское шоссе, 34, г. Самара, Российская Федерация

^{a)} karina-mush21@mail.ru;

⁶⁾ D https://orcid.org/0000-0002-6693-3132 🙆 stepanovalv2015@yandex.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: karina-mush21@mail.ru Адрес для переписки: ул. Московское шоссе, д. 34, г. Самара, 443086, Российская Федерация

Основная цель исследования – атомистическое определение напряженно-деформированного состояния у вершины трещины в изотропном и анизотропном линейно упругих материалах методом молекулярной динамики, реализованным в открытом коде LAMMPS (Large-scale Atomistic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Выполнен широкий класс вычислительных экспериментов для пластины из монокристаллической меди с центральной трещиной в LAMMPS. Окружные распределения компонент тензора напряжений, найденные с использованием молекулярно-динамического моделирования, сравниваются с угловыми распределениями континуальной механики хрупкого разрушения – с аналитическим решением М. Уильямса задачи о нагружении бесконечной пластинки с центральным разрезом в изотропном линейно упругом материале. Сопоставление окружных распределений компонент тензора напряжений, извлеченных из атомистического моделирования, и угловых распределений, полученных из классического решения механики сплошных сред, показало, что на наноразмерном уровне поля напряжений хорошо согласуются с их макроскопическими величинами.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, классическая механика разрушения, потенциал погруженного атома, распространение трещины.

1. Введение

Работа посвящена атомистическому моделированию полей напряжений вблизи вершины трещины в условиях нормального отрыва. Нахождение полей напряжений, деформаций и перемещений было и остается актуальной задачей современной континуальной механики деформируемого твердого тела [1–5]. Однако, очевидно, что процессы разрушения и нелинейного деформирования, происходящие на макроскопическом уровне и описываемые в настоящее время при помощи математического аппарата механики сплошных сред, обусловлены кристаллической структурой рассматриваемого материала. Поскольку механика сплошных сред исходит из концепции сплошности, она не может описать кристаллическую структуру материала. В настоящее время стали применять подход молекулярной динамики для подсчета параметров моделей механики разрушения [6–9]. Цель исследования – определение напряженно-деформированного состояния на атомистическом уровне при помощи молекулярно-динамического моделирования структуры материала, в качестве которого была выбрана монокристаллическая медь.

Задачи исследования – определение упругих свойств монокристаллической меди методом молекулярной динамики и сравнение упругих свойств, полученных этим методом,



с известными значениями из макроскопических экспериментов, а также определение компонент тензора напряжений вблизи вершины трещины в условиях нормального отрыва.

2. Постановка задачи и методы решения

Первым этапом нашего исследования является определение упругих свойств монокристалла меди методом молекулярной динамики, реализованным в LAMMPS. Это необходимо для того, чтобы убедиться, что взятый нами потенциал (файл Cu_u3.eam) правильно моделирует свойства исследуемого нами материала.

Определить тензор упругих модулей можно, используя потенциальную энергию атомов, которая зависит от компонент тензора деформаций и может быть разложена в ряд Тейлора:

$$E(\varepsilon) = E(0) + \sum_{i=1}^{6} \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_i} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{6} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \varepsilon_i \varepsilon_j,$$

где E(0) – энергия исходного состояния равновесия; ε_i и ε_j – компоненты тензора деформаций в нотации Фойгта.

Компоненты тензора упругих модулей рассчитываются по формуле:

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}.$$

Для нахождения полей напряжений в непосредственной окрестности вершины трещины использованы два подхода: теоретический подход континуальной механики разрушения (ряд М. Уильямса) и вычислительный метод молекулярной динамики.

Компоненты тензора напряжений в окрестности вершины трещины при помощи разложения М. Уильямса – асимптотического представления поля напряжений в условиях нормального отрыва и/или в условиях смешанного нагружения – определяются формулой [1]:

$$\sigma_{ij}(r,\theta) = \sum_{m=1}^{2} \sum_{k=1}^{\infty} a_k^m r^{k/2-1} f_{m,ij}^{(k)}(\theta),$$

где индекс *m* соответствует виду нагружения и принимает значение *l* при нормальном отрыве, значение 2 – при поперечном сдвиге; a_k^m – амплитудные множители, связанные с геометрической конфигурацией, типом и уровнем нагрузки и видом приложенной нагрузки; $f_{m,i}^{(k)}(\theta)$ – угловые распределения компонент напряжений.

Приведем формулы для функций, зависящих от угла, присутствующих в компонентах тензора напряжений при нормальном отрыве, представленные в работах [1, 10]:

$$f_{1,11}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \Big[\Big(2 + k/2 + (-1)^k \Big) \cos(k/2 - 1)\theta - (k/2 - 1)\cos(k/2 - 3)\theta \Big];$$

$$f_{1,22}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \Big[\Big(2 - k/2 - (-1)^k \Big) \cos(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1)\cos(k/2 - 3)\theta \Big];$$

$$f_{1,12}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \Big[-\Big(k/2 + (-1)^k \Big) \sin(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1)\sin(k/2 - 3)\theta \Big].$$

Mushankova K. A. and Stepanova L. V. Atomistic determination of stress fields in samples with defects // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 36–46. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046.



ISSN 2410-9908

Приведем выражения для амплитудных множителей (коэффициентов ряда М. Уильямса) поля напряжений в изотропной линейно упругой бесконечной пластине, ослабленной центральной трещиной длины 2*a* при нормальном отрыве [1]:

$$a_{2n+1}^{1} = (-1)^{n+1} \frac{(2n)! \sigma_{22}^{\infty}}{2^{3n+1/2} (n!)^{2} (2n-1) a^{n-1/2}};$$

$$a_{2}^{1} = -\sigma_{22}^{\infty} / 4; \quad a_{2n}^{1} = 0.$$

Ранее [3–5] была показана необходимость сохранения высших приближений в асимптотическом представлении М. Уильямса, мы будем удерживать 20 слагаемых при нахождении компонент тензора напряжений этим методом.

Следующий подход – метод молекулярной динамики, реализованный в пакете LAMMPS. В данном методе компоненты тензора напряжений вычисляются по формуле [11]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{i} \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \left(r_{\alpha}^{j} - r_{\alpha}^{i} \right) f_{\beta}^{ij} - m^{i} v_{\alpha}^{i} v_{\beta}^{i} \right],$$

где α, β – индексы декартовой прямоугольной системы координат; V – полный объем системы; r_{α}^{i} и r_{α}^{j} – координаты атома *i* и атома *j*; f_{β}^{ij} – компонента силы, действующая на атом *i* со стороны атома *j*; m^{i} – масса *i*-го атома; v_{α}^{i} и v_{β}^{i} – скорости атома *i* вдоль направлений α и β соответственно.

3. Детали моделирования и результаты

Для определения компонент тензора упругих модулей гранецентрированной кубической меди были рассмотрены образцы кубической формы, включающие в себя 32 000 атомов. Для задания межатомного взаимодействия использовался файл Cu_u3.eam. Временной шаг моделирования был равен $t_{step} = 0,001$ пс. Система приводилась в равновесное состояние при помощи NVE ансамбля в течение 2 пс. Был выбран этот ансамбль, так как для рассматриваемых условий нет отличий в результатах исследования при моделировании с NVE или NVT ансамблями. Затем для поддержания температуры в 0,1 К использовался термостат Нозе–Гувера в каноническом NVT ансамбле, реализованный в программном пакете LAMMPS командой fix nvt. Используя команду erate, задавалась постоянная скорость деформации $\dot{\varepsilon}_{ij}^0 = 0,011/$ пс, соответствующая различным компонентам тензора деформации. При i = j компоненты тензора деформации ε_{ii} определялись формулой $\varepsilon_{ii} = \dot{\varepsilon}_{ii}^0 t$, где t – время моделирования на соответствующем шаге. Компоненты тензора деформации ε_{ij} определялись формулой $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \dot{\varepsilon}_{ij}^0 t$. Время моделирования куба для определения упругих модулей было

равным 30 пс.

Задавая таким образом различные компоненты тензора деформации в программном пакете LAMMPS, записывали выходной файл со значениями энергии, компонент тензора деформации и объема. Затем полученные значения обрабатывали кодом, написанным на языке Python, где по значениям энергии и соответствующим им деформациям строили аппроксимирующую полиномиальную кривую и выводили ее коэффициенты, для находения упругих констант. На рис. 2 представлена зависимость потенциальной энергии от компоненты тензора деформации ε_{11} для расчета C_{11} .



ISSN 2410-9908



Рис. 1. Визуализация в программе OVITO блока атомов при t = 0



Рис. 2. Зависимость потенциальной энергии блока атомов от компоненты тензора деформации ε_{11} для расчета C_{11} . *Красные точки* – результат молекулярно-динамического моделирования; *черная линия* – аппроксимирующая полиномиальная кривая

Таким образом, мы получили тензор упругих модулей исследуемого материала, который содержит три независимых упругих константы, что отвечает кубической кристаллической решетке:

[162	115	0	0	0	0
115	162	115	0	0	0
115	115	162	0	0	0
0	0	0	81	0	0
0	0	0	0	81	0
0	0	0	0	0	81

Mushankova K. A. and Stepanova L. V. Atomistic determination of stress fields in samples with defects // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 36–46. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046.

ISSN 2410-9908

Компоненты тензора упругих модулей представлены в ГПа. Полученный результат с достаточной точностью согласуется с известными макроскопическими значениями [12].

При использовании онлайн-инструмента ELATE [13] по тензору упругих модулей был построен график распределения модуля Юнга. Получившаяся геометрическая фигура иллюстрирует относительное удлинение по каждому направлению для гранецентрированной кубической меди.



Рис. 3. Модуль Юнга ГЦК-меди

Следующий этап исследования – сопоставление классического решения континуальной механики деформируемого твердого тела с результатами, полученными атомистическим подходом.

При помощи программы LAMMPS моделировалась пластинка размерами 398,6Å \times 398,6Å \times 11,96Å, состоящая из 200 000 атомов, с центральной трещиной размером 36,5Å, полученной путем исключения выбранной группы атомов. Материалом пластинки является гранецентрированная кубическая медь с параметром решетки 3,6150. Задавались периодические граничные условия. Временной шаг моделирования был равен $t_{step} = 0,001$ пс. Система приводилась в равновесное состояние при использовании NVE ансамбля в течение 2 пс. Использовался потенциал погруженного атома (файл Cu_u3.eam). Для поддержания температуры в 0,1 К использовался термостат Нозе– Гувера в каноническом NVT ансамбле.

Температура считалась равной 0,1 К для минимизации влияния пластической деформации и максимального удержания пластинки в упругом состоянии, поскольку целью настоящего исследования было сравнение полей напряжений, полученных методом молекулярной динамики, с полями напряжений, полученными с помощью линейной механики разрушения. Была необходимость, чтобы все эффекты, связанные с пластическим деформированием, появлялись как можно позже. С увеличением температуры, появляются дислокации и эффекты затупления вершины трещины гораздо раньше, и тогда временной диапазон, на котором мы можем сравнить решение континуальной механики и решение молекулярной динамики, существенно сузится, поэтому температура была выбрана максимально низкой.





ISSN 2410-9908



Рис. 4. Распределение компоненты тензора напряжений σ_{11} при t = 0, 2 пс и t = 0, 6 пс



Рис. 5. Распределение компоненты тензора напряжений σ_{12} при t = 0, 2 пс и t = 0, 6 пс



Рис. 6. Распределение компоненты тензора напряжений σ_{22} при t = 0,2 пс и t = 0,6 пс

Пластина растягивалась с постоянной скоростью деформации $\dot{\varepsilon}_{22}^0 = 0,01$ 1/пс, заданной командой erate (тем самым задавалась скорость деформирования вдоль оси x_2). Длина пластины L менялась с течением времени по закону $L(t) = L_0(1 + \dot{\varepsilon}_{22}^0 t)$, где t – прошедшее время (в пикосекундах); L_0 – исходная длина пластины. Моделирование пластины с центральной трещиной проводилось в течение 8 пс, поскольку в этот временной промежуток трещина не распространялась, по этой причине мы можем сравнить решение молекулярной динамики и решение классической механики разрушения для неподвижной трещины. Записывался выходной файл, содержащий компоненты тензора напряжений и координаты всех атомов в разные моменты времени. В программном пакете визуализации ОVITO были получены рис. 4–6, демонстрирующие распределения составляющих тензора напряжений в разные моменты времени.

В пакете OVITO выбирали контур с центром в вершине трещины и записывали новый выходной файл, содержащий координаты атомов и значения компонент тензора напряжений в выбранной области (рис. 7).

Mushankova K. A. and Stepanova L. V. Atomistic determination of stress fields in samples with defects // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 36–46. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046.



ISSN 2410-9908



Рис. 7. Выбор кольцевой области с внешним радиусом 18 Å и внутренним радиусом 12 Å на примере с распределением компоненты тензора напряжений σ_{11} в момент времени t = 0,6 пс



Рис. 8. Характерные окружные распределения компонент $\sigma_{11}(a)$; $\sigma_{12}(b)$; $\sigma_{22}(b)$ вокруг вершины трещины. Точки – угловые распределения компонент тензора напряжений, получаемых методом МД; сплошная линия – угловые распределения компонент тензора напряжений, полученных при использовании разложения Уильямса, содержащего 20 слагаемых

Полученный в OVITO файл обрабатывался кодом, написанным на языке Python. Для значений, полученных методом молекулярной динамики, декартовы координаты переводи-



лись в полярные и строились зависимости компонент тензора напряжений $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$ от полярного угла θ . Также на этих графиках строились зависимости компонент тензора напряжений $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$, полученные при использовании классического решения Уильямса, содержащего 20 слагаемых, от полярного угла θ , изменяющегося от $-\pi$ до π .

4. Заключение

Сопоставление окружных распределений компонент тензора напряжений, полученных в рамках атомистического моделирования, и угловых распределений, полученных аналитическими решениями механики сплошных сред, показало, что на наноразмерном уровне поля напряжений хорошо согласуются с их макроскопическими величинами и, следовательно, классическая механика разрушения может применяться на атомистическом уровне и известные параметры могут быть использованы для создания связи между моделями на атомистическом и макроскопическом уровнях.

Литература

1. Hello G., Tahar M. B., Roelandt J.-M. Analytical determination of coefficients in crack-tip stress expansions for a finite crack in an infinite plane medium // International Journal of Solids and Structures. – 2012. – Vol. 49 (3–4). – P. 556–566. – DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.024.

2. Степанова Л. В., Яковлева Е. М. Смешанное деформирование пластины с трещиной в условиях плоского напряженного состояния // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2014. – № 3. – С. 129–162. – DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.08.

3. Rashidi Moghaddam M., Ayatollahi M., Berto F. The application of strain energy density criterion to fatigue crack growth behavior of cracked components // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2018. – Vol. 97. – P. 440–447. – DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.014.

4. Razavi M. J., Aliha M. R. M., Berto F. Application of an average strain energy density criterion to obtain the mixed mode fracture load of granite rock tested with the cracked asymmetric fourpoint bend specimen // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2018. – Vol. 97 – P. 419–425. – DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.004.

5. Malıkovó L., Veselə V., Seitl S. Estimation of the crack propagation direction in a mixedmode geometry via multi-parameter fracture criteria // Frattura ed Integrita Strutturale. – 2015. – 9 (33). – P. 25–32. – DOI: 10.3221/igf-esis.33.04.

6. Molecular dynamics simulation of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies / S. Chandra, N. N. Kumar, M. K. Samal, V. M. Chavan, R. J. Patel // Computational Materials Science. – 2016. – Vol. 117. – P. 518–526. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.02.032.

7. Andric P., Curtin W. A. New theory for Mode I crack-tip dislocation emission // Journal of Mechanics and Physics of Solids. – 2017. – Vol. 106. – P. 315–337. – DOI: 10.1016/j.jmps.2017.06.006.

8. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale / Ying-jun Gao, Qian-qian Deng, Li-lin Huang, Li Ye, Zhen-chuan Wen, Zhi-rong Luo // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 130. – P. 64–75. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.01.003.

9. Cui C. B., Beom H. G. Molecular dynamics simulation of edge cracks in copper and aluminium single crystals // Materials Science and Engineering A. – 2014. – Vol. 609. – P. 102-109. – DOI: 10.1016/j.msea.2014.04.101.

10. Stepanova L. V., Roslyakov P. S. Multi-parameter description of the crack-tip stress field: analytic determination of coefficients of crack-tip stress expansions in the vicinity of the crack tips of two finite cracks in an infinite plane medium // International Journal of Solids and Structures. -2016. -Vols. 100–101. - P. 11–28. - DOI: 10.1016/j.jmps.2017.06.006.

11. Hardy R. J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: shock waves // The Journal of Chemical Physics. – 1982. – Vol. 76. – P. 622–628. – DOI: 10.1063/1.442714.



ISSN 2410-9908

12. Теоретическая механика. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов: учеб. пособие / И. Е. Беринский, Н. Г. Двас, А. М. Кривцов, А. М. Кударова, В. А. Кузькин, А. А. Ле-Захаров, О. С. Лобода, И. И. Нейгебауэр, Е. А. Подольская. / под ред. А. М. Кривцова. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2009. – 144 с. – ISBN 978-5-7422-2342-9.

13. Gaillac R., Pullumbi P., Coudert F.-X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2016. – Vol. 28 (27). – 275201. – DOI: 10.1088/0953-8984/28/27/275201.



ISSN 2410-9908

Received: 07.04.2022 Revised: 11.05.2022 Accepted: 24.06.2022 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.047-060

UNIDIRECTIONAL STEADY-STATE INHOMOGENEOUS COUETTE FLOW WITH A QUADRATIC VELOCITY PROFILE ALONG A HORIZONTAL COORDINATE

Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

L. S. Goruleva^{a)} and E. Yu. Prosviryakov^{b), *}

Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian federation

^{a)} D https://orcid.org/0000-0001-8635-5213 Sherlarisa@yandex.ru; ^{b)} D https://orcid.org/0000-0002-2349-7801 Seven_pros@mail.ru

*Corresponding author. E-mail: evgen_pros@mail.ru Address for correspondence: 34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation Tel.: +7 (343) 375 35 76; fax: +7 (343) 374 53 30

The paper presents an exact solution to the boundary value problem describing the steadystate unidirectional flow of a viscous incompressible fluid. The fluid moves in an infinite horizontal strip (infinite fluid layer). The fulfillment of the no-slip condition is postulated at the lower boundary of the viscous fluid layer. At the upper boundary, which is assumed to be rigid, non-uniform velocity distribution is specified. The deformation of the free boundary is neglected due to the use of the rigid-lid boundary condition. The exact solution to the equations of the hydrodynamics of incompressible fluids automatically satisfies the continuity equation (the incompressibility equation). The velocity function is harmonic in this case. The simplest exact solution satisfying the Laplace equation is constructed, which takes into account the features of the velocity field along the transverse (vertical) coordinate and one of the longitudinal (horizontal) coordinates. The paper analyzes the topological properties of the velocity field, the tangential stress field, the vorticity vector, specific kinetic energy, and specific helicity.

Keywords: Couette flow, inhomogeneous flow, exact solution, counterflows, shear stresses, specific kinetic energy, specific helicity.

References

1. Couette M. Etudes sur le frottement des liquids. Ann. Chim. Phys., 1890, vol. 21, pp. 433–510.

2. Ershkov S.V., Prosviryakov E.Yu, Burmasheva N.V., and Christianto Victor. Towards understanding the algorithms for solving the Navier–Stokes equations. *Fluid Dynamics Research*, 2021, vol. 53, No. 4, 044501. DOI: 10.1088/1873-7005/ac10f0.

3. Aristov S.N., Knyazev D.V., Polyanin A.D. Exact solutions of the Navier-stokes equations with the linear dependence of velocity components on two space variables. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2009, vol. 43, No. 5, pp. 642–662. DOI: 10.1134/S0040579509050066.

4. Drazin P.G., Riley N. *The Navier–Stokes Equations: A classification of flows and exact solutions*, Cambridge, Cambridge Univ. Press Publ., 2006, 196 p.

5. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. *Handbook of nonlinear partial differential equations*. Boca Raton, Chapman & Hall / CRC Press Publ., 2004, 840 p.

6. Whitham G.B. *The Navier–Stokes equations of motion*, ed. L. Rosenhead, Oxford, Clarendon. Laminar Boundary Layers Publ., 1963, pp. 114–162.

7. Wang C.Y. Exact solutions of the steady-state Navier-Stokes equations. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 1991, vol. 23, pp. 159–177. DOI: 10.1146/ANNUREV.FL.23.010191.001111.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

http://dream-journal.org

9. Pukhnachev V.V. Symmetries in the Navier-Stokes equations. *Uspekhi Mekhaniki*, 2006, No. 1, pp. 6–76. (In Russian).

10. Taylor G.I. Stability of a viscous fluid contained between two rotating cylinders. *J. Phil. Trans. Royal Society A.*, 1923, vol. 223, No. 605–615, pp. 289–343. DOI: 10.1098/RSTA.1923.0008.

11. Zhilenko D.Y., Krivonosova O.E. Transitions to chaos in the spherical Couette flow due to periodic variations in the rotation velocity of one of the boundaries. *Fluid Dynamics*, 2013, vol. 48, No. 4, pp. 452–460. DOI: 10.1134/S0015462813040042.

12. Zhilenko D., Krivonosova O., Gritsevich M. Wave number selection in the presence of noise: Experimental results. *Chaos*, 2018, vol. 28, 053110. DOI: 10.1063/1.5011349.

13. Pukhnachev V.V., Pukhnacheva T.P. Couette problem for Kelvin-Voigt medium. *Vestnik NGU. Ser. Matematika, Mekhanika, Informatika*, 2010, vol. 10, No. 3, pp. 94–109. (In Russian).

14. Zhuk V.I., Protsenko I.G. Asymptotic model for the evolution of perturbations in the plane Couette-Poiseuille flow. *Doklady Mathematics*, 2006, vol. 74, No. 3, pp. 896–900. DOI: 10.1134/S1064562406060287.

15. Gavrilenko S.L., Shil'ko S.V., Vasin R.A. Characteristics of a viscoplastic material in the Couette flow. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2002, vol. 43, No. 3, pp. 439–444. DOI: 10.1023/A:1015378622918.

16. Shalybkov D.A. Hydrodynamic and hydromagnetic stability of the Couette flow. *Physics-Uspekhi*, 2009, vol. 52, No. 9, pp. 915–935. DOI: 10.3367/UFNe.0179.200909d.0971.

17. Babkin V.A. Plane turbulent Couette flow. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2003, vol. 76, No. 6, pp. 1251–1254. DOI: 10.1023/B:JOEP.0000012026.19646.C6.

18. Abramyan A.K., Mirantsev L.V., Kuchmin A.Yu. Modeling of processes at Couette simple fluid flow in flat nano-scopic canal. *Matematicheskoe Modelirovanie*, 2012, vol. 24, No. 4, pp. 3–21. (In Russian).

19. Belyayeva N.A., Kuznetsov K.P. Analysis of a nonlinear dynamic model of the Couette flow for structured liquid in a flat gap. *Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences*, 2012, No. 2 (27), pp. 85–92. (In Russian).

20. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. Large-scale flows of viscous incompressible vortical fluid. *Russian Aeronautics*, 2015, vol. 58, No. 4, pp. 413–418. DOI: 10.3103/S1068799815040091.

21. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. Inhomogeneous Couette flow. *Nelineynaya Dinamika*, 2014, vol. 10, No. 2, pp. 177–182. DOI: 10.20537/nd1402004. (In Russian).

22. Privalova V.V., Prosviryakov E.Yu. Vortex flows of a viscous incompressible fluid at constant vertical velocity under perfect slip conditions. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2019, iss. 2, pp. 57–70. DOI: 10.17804/2410-9908.2019.2.057-070. (In Russian).

23. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. Unsteady layered vortical fluid flows. *Fluid Dynamics*, 2016, vol. 51, No. 2, pp. 148–154. DOI: 10.1134/S0015462816020034.

24. Zubarev N.M., Prosviryakov E.Yu. Exact solutions for layered three-dimensional nonstationary isobaric flows of a viscous incompressible fluid. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2019, vol. 60, No. 6, pp. 1031–1037. DOI: 10.1134/S0021894419060075.

25. Prosviryakov E.Yu. Exact solutions of three-dimensional potential and vortical Couette flows of a viscous incompressible fluid. *Bulletin of the National Research Nuclear University MIFI*, 2015, vol. 4, No. 6, pp. 501–506. DOI: 10.1134/S2304487X15060127. (In Russian).

26. Privalova V.V., Prosviryakov E.Yu., Simonov M.A. Nonlinear gradient flow of a vertical vortex fluid in a thin layer. *Nelineynaya Dinamika*, 2019, vol. 15, No. 3, pp. 271–283. DOI: 10.20537/nd190306. (In Russian).



27. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. Nonuniform convective Couette flow. *Fluid Dynamics*, 2016, vol. 51, No. 5, pp. 581–587. DOI: 10.7868/S0568528116050030. (In Russian).

28. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. A class of exact solutions for two-dimensional equations of geophysical hydrodynamics with two Coriolis parameters. *The Bulletin of Irkutsk State University. Series Mathematics*, 2020, vol. 32, pp. 33–48. DOI: 10.26516/1997-7670.2020.32.33. (In Russian).

29. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Exact solutions to the Navier–Stokes equations describing stratified fluid flows. *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2021, vol. 25, No. 3, pp. 491–507. DOI: 10.14498/vsgtu1860.

30. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Exact Solutions of the Navier–stokes Equations for Describing an Isobaric One-Directional Vertical Vortex Flow of a Fluid. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2021, iss. 2, pp. 30–51. Available at: https://dream-journal.org/DREAM_Issue_2_2021_Burmasheva_N.V._et_al._030_051.pdf (accessed 04.05.2022).

31. Polyanin A.D., Zhurov A.I. *Metody razdeleniya peremennykh i tochnye resheniya nelineynykh uravneniy matematicheskoy fiziki* [Methods of separation of variables and exact solutions of nonlinear equations of mathematical physics]. Moscow, IPMekh RAN Publ., 2020, 384 p. (In Russian).

32. Polyanin A.D. Exact generalized separable solutions of the Navier-Stokes equations. *Dokla- dy RAN*, 2001, vol. 380, No. 4, pp. 491–496. (In Russian).

33. Polyanin A.D. Methods of functional separation of variables and their application in mathematical physics. *Matematicheskoe Modelirovanie i Chislennye Metody*, 2019, No. 1, pp. 65–97. DOI: 10.18698/2309-3684-2019-1-6597. (In Russian).

34. Polyanin A.D., Aristov S.N. Systems of hydrodynamic type equations: exact solutions, transformations, and nonlinear stability. *Doklady Physics*, 2009, vol. 54, No. 9, pp. 429–434. DOI: 10.1134/S1028335809090079.

35. Polyanin A.D., Zhurov A.I. Functional separable solutions of two classes of nonlinear mathematical physics equations. *Doklady Mathematics*, 2019, vol. 99, No. 3. pp. 321–324. DOI: 10.1134/s1064562419030128.

36. Aristov S.N., Polyanin A.D. New classes of exact solutions and some transformations of the Navier–Stokes equations. *Russian J. Math. Physics*, 2010, vol. 17, No. 1, pp. 1–18. DOI: 10.1134/S1061920810010012.

37. Meleshko S.V. A particular class of partially invariant solutions of the Navier–Stokes equations. *Nonlinear Dynamics*, 2004, vol. 36, No. 1, pp. 47–68. DOI: 10.1023/B:NODY.0000034646.18621.73.



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

Подана в журнал: 07.04.2022 УДК 517.958 DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.047-060

http://dream-journal.org

ОДНОНАПРАВЛЕННОЕ УСТАНОВИВШЕЕСЯ НЕОДНОРОДНОЕ ТЕЧЕНИЕ ТИПА КУЭТТА С КВАДРАТИЧНЫМ ПРОФИЛЕМ СКОРОСТИ ПО ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ КООРДИНАТЕ

Л. С. Горулева^{а)}, Е. Ю. Просвиряков^{б), *}

Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова УрО РАН, ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, Российская Федерация

^{a)} **b** https://orcid.org/0000-0001-8635-5213 **s** herlarisa@yandex.ru; ⁶⁾ **b** https://orcid.org/0000-0002-2349-7801 **s** evgen_pros@mail.ru

^{*}Ответственный автор. Электронная почта: evgen_pros@mail.ru Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, Российская Федерация Тел.: +7 (343) 375–35–76; факс: 374–53–30

В статье приведено точное решение краевой задачи, описывающей установившееся однонаправленное течение вязкой несжимаемой жидкости. Жидкость движется в бесконечной горизонтальной полосе (бесконечном слое жидкости). На нижней границе слоя вязкой жидкости постулируется выполнение условия прилипания. На верхней границе, которая полагается недеформируемой, задано неоднородное распределение скорости. Пренебрежение деформацией свободной границы обусловлено использованием граничного условия типа твердой крышки. Приведенное в статье точное решение уравнений гидродинамики несжимаемой жидкости автоматически удовлетворяет уравнению непрерывности (уравнению несжимаемости). В этом случае функция скорости является гармонической. Построено простейшее точное решение, удовлетворяющее уравнению Лапласа, которое учитывает особенности поля скоростей по поперечной (вертикальной) координате и по продольной (горизонтальной) координате. В статье проанализированы топологические свойства поля скорости, поля касанапряжений, вектора завихренности, удельная кинетическая энергия тельных и удельная спиральность.

Ключевые слова: течение Куэтта, неоднородное течение, точное решение, противотечения, касательные напряжения, удельная кинетическая энергия, удельная спиральность.

1. Введение

Точное решение Куэтта $\mathbf{V} = (V_x(z,t);0;0)$ описывает изобарические однонаправленное слоистое и сдвиговое течение вязкой несжимаемой жидкости между двумя недеформируемыми бесконечными пластинами [1–9]. Линейный профиль поля скорости Куэтта

$$\mathbf{V} = (U(z);0;0),$$

точно удовлетворяющий уравнению Орра–Зоммерфельда, является наиболее частым фоновым течением, исследуемым на гидродинамическую устойчивость для различных классов возмущений [2, 4, 6–19].

Недавно были опубликованы статьи, в которых анонсировались обобщения плоского течения Куэтта [20–28]. В работах [20–28] были получены точные решения типа Куэтта для двумерного поля скоростей, зависящего от трех координат и времени:



Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

ISSN 2410-9908

$$\mathbf{V} = \left(V_x(x, y, z, t); V_y(x, y, z, t); 0 \right) =$$

= $\left(U_0(z, t) + U_1(z, t)x + U_2(z, t)y; V_0(z, t) + V_1(z, t)x + V_2(z, t)y; 0 \right).$

Такие точные решения описывают неоднородное течение Куэтта [20–28]. Рассмотрены модификации полученных в [20–28] семейств точных решений размерности (2+1) на трехмерные движения вязкой несжимаемой жидкости [24, 28, 29].

Характерная особенность точных решений, анонсированных в [20–28], заключается в рассмотрении нелинейных эффектов при задании граничных возмущений для неоднородного поля скоростей. В статьях [20–28] были предложены математические модели, объясняющие экваториальные противотечения мирового океана и позволяющие учесть усиление скоростей и колебаний крупномасштабных волновых движений, но исследование устойчивости такого класса течений к настоящему времени не проведено.

Гидродинамическая устойчивость неоднородных течений Куэтта не изучалась, поскольку для таких фоновых течений нельзя применять метод нормальных мод, который традиционно используется в гидродинамической устойчивости. Таким образом, чтобы исследовать двумерные и трехмерные неоднородные течения Куэтта, нужно исследовать точные решения одномерного по скоростям (однонаправленного) движения жидкости, индуцированного распределением скорости, зависящей от горизонтальной (продольной) координаты по степенному закону. Этот подход был впервые описан в статье [30], где приводится точное решение

$$\mathbf{V} = \left(V_x(y, z, t); 0; 0 \right) = \left(\sum_{k=0}^n U_k(z, t) \frac{y^k}{k!}; 0; 0 \right)$$

для описания нестационарного течения одномерного по скорости, но двумерного по координатам.

В статье проводится исследование простейшей краевой задачи, описывающей установившееся неоднородное течение с квадратичным профилем движения

$$\mathbf{V} = (V_x(y,z);0;0) = (U_0(z) + U_1(z)y + U_2(z)\frac{y^2}{2};0;0)$$

верхней границы бесконечного горизонтального слоя жидкости. Подробно изучено полиномиальное поле скоростей, распределение касательных напряжений и компонент вектора завихренности. Показано, что все гидродинамические поля стратифицируются как по вертикальной, так и по горизонтальной координатам.

2. Постановка задачи

Установившееся однонаправленное изобарическое течение вязкой несжимаемой жидкости описывается системой, состоящей из уравнения Навье–Стокса и уравнения непрерывности (уравнения несжимаемости) [30]:

$$V_{x} \frac{\partial V_{x}}{\partial x} = v \Delta V_{x};$$

$$\frac{\partial V_{x}}{\partial x} = 0.$$
 (1)



Здесь $V_x(x, y, z)$ – ненулевая компонента вектора скорости однонаправленного тече-

ния жидкости; *v* – кинематическая (молекулярная) вязкость жидкости, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

трехмерный оператор Лапласа.

Система уравнений (1) является переопределенной [30]. Для нахождения нетривиальных (ненулевых) точных решений системы (1) подставим соотношение $\frac{\partial V_x}{\partial x} = 0$ в первое уравнение и учтем, что в силу уравнения неразрывности функция не зависит от продольной (горизонтальной) координаты x [30]. В этом случае система (1) трансформируется к двумерному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial z^2} = 0.$$
⁽²⁾

Таким образом, скорость $V_{x} = V_{x}(y, z)$ является гармонической функцией.

Движение жидкости происходит в бесконечно протяженном горизонтальном слое, который ограничен двумя плоскими границами (бесконечными абсолютно жесткими пластинами). Нижняя граница слоя z = 0 неподвижная. При движении жидкости будем считать выполненным условие прилипания:

$$V_{\rm x}(y,0) = 0.$$
 (3)

Верхняя граница z = h (h – толщина слоя жидкости) движется по закону:

$$V_x(y,h) = W + Ay + B\frac{y^2}{2}.$$
 (4)

Скорость жидкости на верхней границе является параболическим профилем относительно координаты у, описывающим суперпозицию поступательного и вращательного движений. Как было показано в статьях [20–24, 26–28], задание краевого возмущения приводит к генерации вертикальной закрутки в жидкости и неоднородному распределению касательных напряжений.

3. Точное решение

Уравнение Лапласа (2) имеет так называемое фундаментальное решение [4]. В статье мы ограничимся исследованием полиномиального решения без добавки фундаментального решения. Точное решение системы (1) и, как следствие, линейного уравнения второго порядка эллиптического типа (2) находим в виде [30]:

$$V_{x}(x,z) = U_{0}(z) + U_{1}(z)y + U_{2}(z)\frac{y^{2}}{2}.$$
(5)

Точное решение (5) получено благодаря применению обобщения метода разделения переменных [2, 9, 24, 31–37]. Для определения неизвестных функций U_0 , U_1 и U_2 вычислим частные производные для скорости V_x , определяемые формулой (5):

Goruleva L. S. and Prosviryakov E. Yu. Unidirectional steady-state inhomogeneous Couette flow with a quadratic velocity profile along a horizontal coordinate // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 47–60. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.047-060.

ISSN 2410-9908

$$\frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} = U_2; \quad \frac{\partial^2 V_x}{\partial z^2} = U_0'' + U_1'' y + U_2'' \frac{y^2}{2}$$

Здесь штрих обозначает дифференцирование по вертикальной (поперечной) координате z.

Подставив полученные выражения в уравнение (2), получим многочлен относительно горизонтальной переменной:

$$U_2 + U_0'' + U_1''y + U_2''\frac{y^2}{2} = 0.$$

Приравнивая выражения при одинаковых степенях у (метод неопределенных коэффициентов), получаем простейшую систему обыкновенных дифференциальных уравнений шестого порядка:

$$U_1''=0; U_2''=0; U_2+U_0''=0.$$

После последовательного интегрирования системы, получаем выражения для функций, описывающих поле скоростей (3):

. .

$$U_{1} = c_{1}z + c_{2}; \quad U_{2} = c_{3}z + c_{4};$$

$$U_{0} = -\left(\frac{c_{3}}{6}z^{3} + \frac{c_{4}}{2}z^{2} + c_{5}z + c_{6}\right).$$
(6)

Формулы (6) иллюстрируют распределение фонового течения U_0 по кубическому закону, а пространственное ускорение U_1 и кривизна поля скоростей U_2 являются линейными функциями.

3.1. Краевая задача

Для определения постоянных интегрирования c_1 , c_2 , c_3 , c_4 , c_5 и c_6 , входящих в точное решение (6), запишем граничные условия (3) и (4) с учетом структуры поля скоростей (5):

$$U_{0}(0) = 0, \ U_{1}(0) = 0, \ U_{2}(0) = 0;$$
$$U_{0}(h) = W, \ U_{1}(h) = A, \ U_{2}(h) = B.$$
(7)

Учитывая граничные условия, получаем значения для постоянных интегрирования:

$$c_2 = 0, \ c_4 = 0, \ c_6 = 0;$$

 $c_1 = \frac{A}{h}, \ c_3 = \frac{B}{h}, \ c_5 = -\left(\frac{Bh}{6} + \frac{W}{h}\right).$



ISSN 2410-9908

Подставляя константы c_1, c_2, c_3, c_4, c_5 и c_6 , получим точное решение краевой задачи:

$$U_1 = \frac{A}{h}z$$
, $U_2 = \frac{B}{h}z$, $U_0 = -\frac{B}{6h}z^3 + \left(W + \frac{Bh^2}{6}\right)\frac{z}{h}$.

Для анализа поля скоростей

$$V_{x} = \frac{z}{h} \left(-\frac{B}{6} z^{2} + W + \frac{Bh^{2}}{6} + Ay + B\frac{y^{2}}{2} \right)$$
(8)

введем безразмерную координату $Z = \frac{z}{h}$. В этом случае скорость записывается следующим образом:

$$V_{x} = Z \left(-\frac{Bh^{2}}{6}Z^{2} + W + \frac{Bh^{2}}{6} + Ay + B\frac{y^{2}}{2} \right).$$

Поскольку целью настоящей статьи является исследование скорости и других гидродинамических полей при ненулевом значении параметра *B*, то для дальнейшего исследования выражение для скоростей удобно представить как

$$V_{x} = \frac{Z}{B} \left(-Z^{2}h^{2} + \frac{6W}{B} + h^{2} + \frac{6A}{B}y + 3y^{2} \right) = \frac{Z}{B} \left(-Z^{2}h^{2} + 6w + h^{2} + 6ay + 3y^{2} \right) = \frac{Z}{B} \left(-Z^{2}h^{2} + 6w + h^{2} - 3a^{2} + 3(y + a)^{2} \right) = \frac{Z}{B} \left(-Z^{2}h^{2} + b + 3(y + a)^{2} \right).$$
(9)

При упрощении выражения для скорости введены следующие обозначения:

$$a = \frac{A}{B}, w = \frac{W}{B}, b = 6w + h^2 - 3a^2 = \frac{6W}{B} + h^2 - 3\left(\frac{A}{B}\right)^2,$$

которые понадобятся далее.

3.2. Анализ скорости и удельной кинетической энергии

Для исследования поля скорости (9) для начала положим y = 0. В этом случае течение жидкости характеризуется застойной точкой (точкой покоя), которая определяется уравнением

$$-Z^2h^2 + b + 3a^2 = 0.$$

Разрешая это уравнение, получим выражение для переменной Z, определяющей границу, относительно которой происходит движение встречных однонаправленных потоков фонового течения вязкой несжимаемой жидкости:

$$Z = \sqrt{\frac{b+3a^2}{h^2}}.$$

Goruleva L. S. and Prosviryakov E. Yu. Unidirectional steady-state inhomogeneous Couette flow with a quadratic velocity profile along a horizontal coordinate // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 3. – P. 47–60. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.047-060.



ISSN 2410-9908

Отметим, что противотечения в жидкости будут регистрироваться при выполнении двойного неравенства:

$$0 < \frac{b+3a^2}{h^2} < 1.$$

Возвращаясь к прежним обозначениям, получим, что вертикальная (поперечная) стратификация фоновой скорости при установившемся течении жидкости регистрируется при выполнении неравенства:

$$-\frac{1}{6} < \frac{W}{Bh^2} < 0.$$

Таким образом, для существования встречных потоков параметры *W* и *B* должны быть разных знаков.

Учитывая неоднородность течения жидкости, получим уравнение застойной линии, существующей при движении жидкости:

$$-Z^{2}h^{2} + b + 3(y+a)^{2} = 0.$$
 (10)

Очевидно, что совокупность точек покоя при $b \neq 0$ принадлежит кривой второго порядка гиперболического типа:

$$\frac{Z^2h^2}{b} - \frac{3(y+a)^2}{b} = 1.$$

В том случае, если b = 0, то множеством застойных точек является пара пересекающихся прямых

$$3(y+a)^{2}-Z^{2}h^{2} = (\sqrt{3}(y+a)-Zh)(\sqrt{3}(y+a)+Zh) = 0.$$

Завершая исследование одномерного поля скоростей (9), заметим, что в потоке жидкости существует две застойные точки относительно вертикальной координаты Z, зависящие от значения горизонтальной координаты y.

Наличие двух застойных точек у скорост
и $V\,$ равносильно тому, что удельная кинетическая энергия

$$E = \frac{\rho V_x^2}{2} = \frac{\rho Z^2}{2B^2} \left(-Z^2 h^2 + \frac{6W}{B} + h^2 + \frac{6A}{B} y + 3y^2 \right)^2$$

немонотонно распределена относительно координат Z и у и может принимать не более двух нулевых значений внутри слоя жидкости, определяемых формулой (10).

3.3. Анализ касательного напряжения и завихренности

Напомним, что для классического установившегося течения Куэтта с линейным профилем

$$V_{x} = Az + B$$





Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2022

http://dream-journal.org

ISSN 2410-9908

касательное напряжение

$$\tau_{xz} = \eta \frac{\partial V_x}{\partial z} = \eta A$$

является постоянным, т. е. в жидкости регистрируются только растягивающие или сжимающие напряжения. Знак касательного напряжения τ_{xz} зависит от величины параметра A, определяющего разность граничных скоростей [1–9].

Касательное напряжение для поля скоростей, определяемое формулами (9), записываем следующим образом:

$$\tau_{xz} = \eta \frac{\partial V_x}{\partial z} = \frac{\eta}{h} \left(-\frac{Bz^2}{2} + W + \frac{Bh^2}{6} + Ay + \frac{By^2}{2} \right). \tag{11}$$

Касательное напряжение τ_{xz} может стратифицироваться по обеим координатам *z* и *y*. По координате *z* возможно расслоение только на две области, а по координате *y* – до трех зон. Приравняв нулю выражение для касательного напряжения τ_{xz} , получим уравнение для определения границ нейтральных линий гиперболического типа:

$$-\frac{Bz^2}{2} + W + \frac{Bh^2}{6} + Ay + \frac{By^2}{2} = 0.$$

Учитывая, что рассматривается неоднородное распределение скорости, ненулевое значение принимает еще одна компонента тензора вязких напряжений:

$$\tau_{xy} = \eta \frac{\partial V_x}{\partial y} = \frac{\eta z}{h} (A + By).$$
(12)

Стратификация сдвигового напряжения τ_{xy} возможна только по горизонтальной (продольной) координате и будет иметь место при

$$y = -\frac{A}{B}.$$
 (13)

Покажем далее, что анализ завихренности эквивалентен исследованию поля касательных напряжений. Вектор завихренности Ω определяется символическим определителем:

$$\boldsymbol{\Omega} = \nabla \times \mathbf{V} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ V_x & V_y & V_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ V_x & 0 & 0 \end{vmatrix} =$$
$$= \boldsymbol{\Omega}_y \mathbf{j} + \boldsymbol{\Omega}_z \mathbf{k} = \frac{\partial V_x}{\partial z} \mathbf{j} - \frac{\partial V_x}{\partial y} \mathbf{k} =$$
$$= \left(\frac{1}{h} \left(-\frac{Bz^2}{2} + W + \frac{Bh^2}{6} + Ay + \frac{By^2}{2} \right) \right) \mathbf{j} - \left(\frac{z}{h} (A + By) \right) \mathbf{k} =$$



ISSN 2410-9908

$$=\frac{\tau_{xz}}{\eta}\boldsymbol{j}-\frac{\tau_{xy}}{\eta}\boldsymbol{k}$$

Здесь $\nabla = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z}$ – оператор Гамильтона, а символы $\nabla \times \mathbf{V}$ обозначают опе-

рацию ротора от вектор-функции.

Очевидно, что направление компоненты завихренности Ω_y может менять направление вихря, движущегося вдоль оси ординат, до двух раз, а вертикальная компонента Ω_z – однократно. Таким образом, течение вязкой несжимаемой жидкости всюду вихревое за исключением линии, определяемой равенством:

$$\tau_{xz}^2 + \tau_{xy}^2 = 0. \tag{14}$$

Подставив в равенство (14) формулы (11) и (12), получим громоздкое выражение:

$$\frac{\eta^{2}}{h^{2}} \left(\frac{B^{2}z^{4}}{4} - BWz^{2} - \frac{B^{2}z^{2}h^{2}}{6} - \frac{B^{2}z^{2}y^{2}}{2} + W^{2} + \frac{BWh^{2}}{3} + 2WAy + BWy^{2} + \frac{B^{2}h^{4}}{36} + \frac{BAyh^{2}}{3} + \frac{B^{2}h^{2}y^{2}}{6} + A^{2}y^{2} + BAy^{3} + \frac{B^{2}y^{4}}{4} \right) + \frac{\eta^{2}z^{2}}{h^{2}} \left(A^{2} + ABy + B^{2}y^{2} \right) = 0.$$
(15)

Для его упрощения воспользуемся соотношением (13). После подстановки (13) в (15) получим равенство:

$$\left(-\frac{Bz^2}{2} + W + \frac{Bh^2}{6} - \frac{A^2}{2B}\right)^2 = 0.$$

Следовательно, в потоке вязкой несжимаемой жидкости существует единственная точка

$$z = \sqrt{\frac{2}{B} \left(W + \frac{Bh^2}{6} - \frac{A^2}{2B} \right)}, \ y = -\frac{A}{B},$$

в которой движение является безвихревым при ограничениях на параметры краевой задачи

$$0 \le \frac{1}{B} \left(W + \frac{Bh^2}{6} - \frac{A^2}{2B} \right) \le \frac{h}{2}.$$

Последнее двойное неравенство обусловлено диапазоном изменения вертикальной (поперечной) координаты.

4. Заключение

В статье изучено простейшее точное решение, описывающее изотермическое неоднородное однонаправленное течение вязкой несжимаемой жидкости. Точное решение уравнений Навье–Стокса получено в классе полиномов. Данное точное решение описывает вихревое движение, которое может локально вырождаться в потенциальное движение. Показано,



что учет пространственного ускорения влечет стратификацию поля скоростей с нетривиальной топологией. Исследование поля касательных напряжений показывает неоднородность их распределения, причем со сменой знака величины компонент тензора напряжений.

Литература

1. Couette M. Etudes sur le frottement des liquids // Ann. Chim. Phys. – 1890. – Vol. 21. – P. 433–510.

2. Towards understanding the algorithms for solving the Navier–Stokes equations / S. V Ershkov, E. Yu. Prosviryakov, N. V Burmasheva, V. Christianto // Fluid Dynamics Research. – 2021. – Vol. 53, No. 4. – 044501. – DOI: 10.1088/1873-7005/ac10f0.

3. Aristov S. N., Knyazev D. V., Polyanin A. D. Exact solutions of the Navier–Stokes equations with the linear dependence of velocity components on two space variables // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2009. – Vol. 43, No. 5. – P. 642–662. – DOI: 10.1134/S0040579509050066.

4. Drazin P. G. and Riley N. The Navier–Stokes Equations: A classification of flows and exact solutions. – Cambridge : Cambridge Univ. Press, 2006. – 196 p.

5. Polyanin A. D., Zaitsev V. F. Handbook of nonlinear partial differential equations. – Boca Raton : Chapman & Hall / CRC Press, 2004. – 840 p.

6. Whitham G. B. The Navier-Stokes equations of motion / ed. L. Rosenhead. – Oxford : Clarendon Press, 1963. – P. 114–162.

7. Wang C. Y. Exact solutions of the steady-state Navier–Stokes equations // Annu. Rev. Fluid Mech. – 1991. – Vol. 23. – P. 159–177. – DOI: 10.1146/ANNUREV.FL.23.010191.001111.

8. Wang C. Y. Exact solutions of the unsteady Navier-Stokes equations // Appl. Mech. Rev. – 1989. – Vol. 42. – P. 269–282. – DOI: 10.1115/1.3152400.

9. Пухначёв В. В. Симметрии в уравнениях Навье-Стокса // Успехи механики. – 2006. – № 1. – С. 6–76.

10. Taylor G. I. Stability of a viscous fluid contained between two rotating cylinders // J. Phil. Trans. Royal Society A. – 1923. – Vol. 223, No. 605–615. – P. 289–343. – DOI: 10.1098/RSTA.1923.0008.

11. Zhilenko D. Y., Krivonosova O. E. Transitions to chaos in the spherical Couette flow due to periodic variations in the rotation velocity of one of the boundaries // Fluid Dynamics. – 2013. – Vol. 48, No. 4. – P. 452–460. – DOI: 10.1134/S0015462813040042.

12. Wave number selection in the presence of noise: Experimental results / D. Zhilenko, O. Krivonosova, M. Gritsevich, P. Read // Chaos. – 2018. – Vol. 28. – 053110. – DOI: 10.1063/1.5011349.

13. Пухначев В. В., Пухначева Т. П. Задача Куэтта для среды Кельвина–Фойхта // Вестник НГУ. Сер. Математика, механика, информатика. – 2010. – Т. 10, №. 3. – С. 94–109.

14. Жук В. И., Проценко И. Г. Асимптотическая модель эволюции возмущений в плоском течении Куэтта-Пуазейля // Докл. Академии наук. – 2006. – Т. 411, № 1. – С. 20–25.

15. Gavrilenko S. L., Shil'ko S. V., Vasin R. A. Characteristics of a viscoplastic material in the Couette flow // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. – 2002. – Vol. 43, No. 3. – P. 439–444. – DOI: 10.1023/A:1015378622918.

16. Шалыбков Д. А. Гидродинамическая и гидромагнитная устойчивость течения Куэтта // Успехи физических наук. – 2009. – Т. 179, № 9. – С. 971–993. – DOI: 10.3367/UFNr.0179.200909d.0971.

17. Babkin V. A. Plane turbulent Couette flow // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2003. – Vol. 76, No. 6. – P. 1251–1254. – DOI: 10.1023/B:JOEP.0000012026.19646.C6.

18. Абрамян А. К., Миранцев Л. В., Кучмин А. Ю. Моделирование течения Куэтта простой жидкости в плоском канале наноразмерной высоты // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 4. – С. 3–21.



19. Беляева Н. А., Кузнецов К. П. Анализ нелинейной динамической модели течения Куэтта структурированной жидкости в плоском зазоре // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки». – 2012, – Т. 16, № 2. – С. 85–92. – DOI: 10.14498/vsgtu1018.

20. Аристов С. Н., Просвиряков Е. Ю. Крупномасштабные течения завихренной вязкой несжимаемой жидкости // Известия высших учебных заведений. Авиационная техника. – 2015. – Вып. 4. – С. 50–54.

21. Аристов С. Н., Просвиряков Е. Ю. Неоднородные течения Куэтта // Нелинейная динамика. – 2014. – Т. 10, № 2. – С. 177–182.

22. Privalova V. V., Prosviryakov E. Yu. Vortex flows of a viscous incompressible fluid at constant vertical velocity under perfect slip conditions // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2019. – Iss. 2. – P. 57–70. – DOI: 10.17804/2410-9908.2019.2.057-070. URL: http://dream-journal.org/issues/2019-2/2019-2_249.html (accessed: 29.08.2022).

23. Aristov S. N., Prosviryakov E. Y. Unsteady layered vortical fluid flows // Fluid Dynamics. – 2016. – Vol. 51, No. 2. – P. 148–154. – DOI: 10.1134/S0015462816020034.

24. Зубарев Н. М., Просвиряков Е. Ю. О точных решениях для слоистых трехмерных нестационарных изобарических течений вязкой несжимаемой жидкости // Прикладная механика и техническая физика. – 2019. – Т. 60, № 6 (358). – С. 65–71. – DOI: 10.15372/PMTF20190607.

25. Просвиряков Е. Ю. Точные решения трехмерных потенциальных и завихренных течений Куэтта вязкой несжимаемой жидкости // Вестник Национального исследовательского ядерного университета МИФИ. – 2015. – Т. 4, №. 6. С. 501–506. – DOI: 10.1134/S2304487X15060127.

26. Privalova V., Prosviryakov E. Y., Simonov M. A. Nonlinear Gradient Flow of a Vertical Vortex Fluid in a Thin Layer // Rus. J. Nonlin. Dyn. – 2019. – Vol. 15, No. 3. – P. 271–283. – DOI: 10.20537/nd190306.

27. Aristov S. N., Prosviryakov E. Y. Nonuniform convective Couette flow // Fluid Dynamics. – 2016. – Vol. 51, No. 5. – P. 581–587. – DOI: 10.7868/S0568528116050030.

28. Бурмашева Н. В., Просвиряков Е. Ю. Класс точных решений для двумерных уравнений геофизической гидродинамики с двумя параметрами Кориолиса // Известия Иркутского государственного университета. Серия «Математика». – 2020. – Vol. 32. – Р. 33–48. –

29. DOI: 10.26516/1997-7670.2020.32.33.

30. Burmasheva N. V., Prosviryakov E. Yu. Exact solutions to the Navier–Stokes equations describing stratified fluid flows // Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.]. – 2021. – Vol. 25, No. 3. – P. 491–507. DOI: 10.14498/vsgtu1860.

31. Бурмашева Н. В., Просвиряков Е. Ю. Точные решения уравнений Навье–Стокса для описания изобарического однонаправленного вертикально завихренного течения жидкости // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2021. – Iss. 2. – P. 30–51. – URL: https://dream-journal.org/DREAM_Issue_2_2021_Burmasheva_N.V._et_al._030_051.pdf.

32. Полянин А. Д., Журов А. И. Методы разделения переменных и точные решения нелинейных уравнений математической физики. – М. : Изд-во «ИПМех РАН», 2020. – 384 с.

33. Полянин А. Д. Точные решения уравнений Навье–Стокса с обобщенным разделением переменных // Доклады Академии наук. – 2001. – Т. 380, № 4. – С. 491–496.

34. Полянин А. Д. Методы функционального разделения переменных и их применение в математической физике // Мат. моделирование и численные методы. – 2019. – № 1 (21). – С. 65–97. – DOI: 10.18698/2309-3684-2019-1-6597.

35. Полянин А. Д., Аристов С. Н. Системы уравнений гидродинамического типа: Точные решения, преобразования, нелинейная устойчивость // Доклады Академии наук. – 2009. – Т. 428, № 2, – С. 180–185.



36. Полянин А. Д., Журов А. И. Решения с функциональным разделением переменных двух классов нелинейных уравнений математической физики // Доклады Академии наук. – 2019. – Т. 486, № 3. – С. 287–291. – DOI: 10.31857/S0869-56524863287-291.

37. Aristov S. N., Polyanin A. D. New classes of exact solutions and some transformations of the Navier–Stokes equations // Russian J. Math. Physics. – 2010. – Vol. 17, No. 1. – P. 1–18. – DOI: 10.1134/S1061920810010012.

38. Meleshko S. V. A particular class of partially invariant solutions of the Navier–Stokes equations // Nonlinear Dynamics. – 2004. – Vol. 36, No. 1. – P. 47–68. – DOI: 10.1023/B:NODY.0000034646.18621.73.