



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА  
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ  
ВЛАСНОСТІ  
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **104986** (13) **C2**  
(51) МПК (2014.01)  
**G01N 3/00**

## (12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВІНАХІД

(21) Номер заявки:	<b>u 2012 06490</b>	(72) Винахідник(и):	<b>Заблудовський Володимир Олександрович (UA), Штапенко Едуард Пилипович (UA), Воронков Євген Олегович (UA), Дудкіна Валентина Василівна (UA)</b>
(22) Дата подання заявки:	<b>29.05.2012</b>	(73) Власник(и):	<b>ДНІПРОПЕТРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ЗАЛІЗНИЧНОГО ТРАНСПОРТУ ІМЕНІ АКАДЕМІКА В. ЛАЗАРЯНА, вул. Ак. Лазаряна, 2, м. Дніпропетровськ-10, 49010 (UA)</b>
(24) Дата, з якої є чинними права на винахід:	<b>25.03.2014</b>	(56) Перелік документів, взятих до уваги експертизою:	<b>RU 2226266 C2; 27.03.2004; RU 2366921 C1; 10.09.2009; UA 6210 U; 15.04.2005; RU 2328715 C1; 10.07.2008; RU 2277703 C2; 10.06.2006; US 2006/0278024 A1; 14.12.2006; WO 2012/045190 A1; 12.04.2012; US 3901074; 26.08.1975;</b>
(41) Публікація відомостей про заявку:	<b>10.12.2013, Бюл.№ 23</b>		
(46) Публікація відомостей про видачу патенту:	<b>25.03.2014, Бюл.№ 6</b>		

## (54) СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ МОДУЛЯ ПРУЖНОСТІ МАТЕРІАЛУ З КРИСТАЛІЧНОЮ СТРУКТУРОЮ У РІЗНИХ КРИСТАЛОГРАФІЧНИХ НАПРЯМКАХ

### (57) Реферат:

Винахід належить до способів визначення міцнісних властивостей матеріалів, а саме - до визначення модуля пружності матеріалу з кристалічною структурою в різних кристалографічних напрямках, і може використовуватися для визначення і прогнозування їх механічних властивостей. Спосіб визначення модуля пружності матеріалу з кристалічною структурою у різних кристалографічних напрямках полягає у вимірі періоду кристалічної решітки і обчислення модуля пружності для різних кристалографічних напрямів за формулою, що пов'язує енергію зв'язку атомів в заданому кристалографічному напрямі, період кристалічної решітки та константу, залежна від типу кристалічної решітки. Технічним результатом є зниження трудомісткості, можливість прогнозування механічних властивостей матеріалу з урахуванням анізотропії властивостей, підвищення точності визначення модуля пружності (модуля Юнга) в різних кристалографічних напрямках і спрощення способу його визначення.

UA 104986 C2



Винахід належить до способів визначення міцнісних властивостей матеріалів, а саме - до визначення модуля пружності матеріалу з кристалічною структурою в різних кристалографічних напрямках, і може використовуватися для визначення і прогнозування їх механічних властивостей.

- 5 Відомі способи визначення модуля пружності матеріалів з кристалічною структурою шляхом визначення параметрів атомної структури, наприклад періоду кристалічної решітки. Відомий спосіб визначення модуля пружності [патент РФ 2226266], що полягає в тому, що у зразка вимірюють період кристалічної решітки рентгеноструктурним методом, а потім по формулі:

$$E = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2 a_0^2},$$

- 10 де  $Q_1=Q_2=e=1,6\cdot 10^{-19}$  Кл - величина взаємодіючих елементарних зарядів:  $\pi=3,14$ ;  $\epsilon_0=8,85\cdot 10^{-12}$  Ф/м - електрична постійна:  $r$  - відстань між взаємодіючими зарядами (залежна від  $a_0$  і напрямів ковзання по площині ковзання);  $a_0$  - період кристалічної решітки.

Недоліками способу є недостатня точність, достовірність і адекватність визначення модуля пружності, враховуючи тільки кулонівську взаємодію.

- 15 У способі визначення модуля пружності матеріалу з кристалічною структурою (патент РФ 2366921), узятий за прототип, що включає вимірювання густини, питомої теплоти плавлення і питомої теплоти паротворення досліджуваного матеріалу і обчислення шуканого модуля пружності  $E$  із співвідношення

$$E = 4\rho \frac{\Delta H_{\text{пл}} + \Delta H_{\text{пар}}}{\mu},$$

- 20 де  $\rho$  - густина досліджуваного матеріалу,  $H_{\text{пл}}$  - питома теплота плавлення досліджуваного матеріалу,  $H_{\text{пар}}$  - питома теплота паротворення досліджуваного матеріалу  $\mu$  - молярна маса матеріалу.

До переваг способу належить опис механічних властивостей макроскопічного об'єкта через термодинамічні параметри. Прототип також забезпечує зниження трудомісткості в обчисленні модуля пружності.

- 25 До недоліків прототипу слід віднести використання суми питомої теплоти плавлення і питомої теплоти паротворення досліджуваного матеріалу ( $H_{\text{пл}}+H_{\text{пар}}$ ) замість енергії зв'язку між найближчими атомами в кристалічній решітці, відсутність можливості розрахунку модуля пружності в різних кристалографічних напрямках ( $hkl$ ). Вимірювання густини досліджуваного матеріалу ( $\rho$ ), питомої теплоти плавлення досліджуваного матеріалу ( $H_{\text{пл}}$ ), питомої теплоти паротворення досліджуваного матеріалу ( $H_{\text{пар}}$ ), молярної маси матеріалу ( $\mu$ ) приводить до збільшення помилки обчислення.

Винахід вирішує задачі підвищення точності визначення модуля пружності (модуля Юнга) в різних кристалографічних напрямках і спрощення способу його визначення.

- 35 Задачі вирішуються способом визначення модуля пружності матеріалу з кристалічною структурою для різних кристалографічних напрямів ( $hkl$ ), що включає вимірювання періоду кристалічної решітки і обчислення проводять по формулі:

$$E = k \frac{W_{hkl}}{a^3},$$

- 40 де  $W_{hkl}$  енергія зв'язку атомів в заданому кристалографічному напрямі,  $a$  - період кристалічної решітки,  $k$  - константа, залежна від типу кристалічної решітки.

Модуль пружності (модуль Юнга) є одними з найбільш важливих характеристик матеріалів з кристалічною структурою. Авторами встановлений зв'язок між механічними характеристиками матеріалів з кристалічною структурою, з енергією зв'язку атомів в кристалічній решітці, а модуль Юнга визначається видом потенційної енергії взаємодії між атомами кристалічної решітки.

- 45 Під енергією зв'язку, ми будемо розуміти різницю між повною енергією кристала ( $W_{\text{повн}}$ ) і енергією його складових частин ( $W_0$ ):

$$W_{hkl} = W_{\text{повн}} - W_0^{hkl}.$$

У наближенні Хартрі-Фока (ХФ) енергія молекулярної системи ( $W_{\text{повн}}$   $W_0^{hkl}$ ) в представленій матриці густини визначається як:

- 50  $W = U + \langle hP \rangle + 1/2 \langle PJ(P) \rangle - 1/2 \langle PK(P) \rangle,$

де:  $U$  - потенційна енергія взаємодії ядер,  $P$  - матриця густини,  $\langle h \rangle$  - кінетична енергія електронів і потенційна енергія їх взаємодії з ядрами,  $1/2 \langle PJ(P) \rangle$  - класичне кулонівське відштовхування електронів  $-1/2 \langle PK(P) \rangle$  - обмінна взаємодія, що відбиває ферміонний характер електронів у системі.

Прецензійне вимірювання періоду кристалічної решітки (а) проводили рентгеноструктурним методом (Бразгин И.А., Данилов В.Д., Зезюлина Л.Ф. К методике прицизионного измерения параметра кристаллической решетки // Заводская лаборатория. - 1971. - № 9. - С. 1097-1098). Відносна похибка вимірювання періоду кристалічної решітки складає 0,003 %.

5 У таблиці приведені значення модуля пружності для заліза, яке має ОЦК решітки, і мідь з ГЦК решітками розраховані по пропонованій формулі (Е) і проведено порівняння з даними отриманими по формулі прототипу ( $E_{пр}$ ) і експериментальними вимірюваннями ( $E_{екс}$ ).

Експериментальні значення модуля Юнга ( $E_{екс}$ ) для випадків Fe і Cu виконано з використанням розривної машини типу Р-100м-авто з погрішністю вимірюваних значень  $\pm 1\%$ .  
10 Значення густини досліджуваного матеріалу ( $\rho$ ), питомої теплоти плавлення досліджуваного матеріалу ( $H_{пл}$ ), питомої теплоти паротворення досліджуваного матеріалу ( $H_{пар}$ ), молярної маси матеріалу ( $\mu$ ) необхідні для розрахунку по формулі прототипу узяті з літератури (Смитлз К. Дж. Металлы: Справочн. изд. Пер. с англ. - 1980, 447 с.). Відомо (патент РФ 2277703), що для полікристалічного нетекстурованого зразка модуль пружності може бути знайдений, як  
15 середньоарифметичне модулів пружностей для різних кристалічних напрямів:

$$E = \frac{E_{100} + E_{110} + E_{111}}{3}.$$

Таблица

метал	Тип решетки	k	$a_0$ , нм	$E_{100}$ , ГПа	$E_{110}$ , ГПа	$E_{111}$ , ГПа	E, ГПа	$E_{пр}$ , ГПа	$E_{екс}$ , ГПа
Fe	ОЦК	4	0,2866	192	208	224	208	205,3	210
Cu	ГЦК	2	0,3615	84	90	98	91	177,5	100

20 Таким чином, показано, що точність визначення модуля Юнга пропонованим способом дозволяє розраховувати значення модуля пружності в різних кристалографічних напрямках і абсолютні значення найбільш наближені до експериментальних.

#### ФОРМУЛА ВИНАХОДУ

25 Спосіб визначення модуля пружності матеріалу з кристалічною структурою, що включає вимірювання параметрів матеріалу і обчислення шуканого модуля пружності, який **відрізняється** тим, що вимірюється період кристалічної решітки і обчислення проводять для різних кристалографічних напрямів ( $hkl$ ) по формулі:

$$E = k \frac{W_{hkl}}{a^3}$$

30 де  $W_{hkl}$  - енергія зв'язку атомів в заданому кристалографічному напрямі,  $a$  - період кристалічної решітки,  $k$  - константа, залежна від типу кристалічної решітки.