ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/321

**АНАЛИЗ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ, ИЗЛУЧАЕМОЙ ОТДЕЛЬНЫМИ
ДЕФЕКТАМИ СТРУКТУРЫ В ГЦК РЕШЁТКЕ**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Жармухамбетова А.М.

¹Томский государственный университет, Томск, Россия

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Одним из актуальных применений анализа акустической эмиссии является контроль режима технологического процесса в условиях промышленного производства, а также обнаружение побочных явлений, влияющих на качество производимых изделий, например, выявление нежелательных вибраций или автоколебаний. При этом возникает необходимость выявлять, что является источником акустического сигнала: процессы пластической деформации материала (изменение внутренней структуры) или механическое взаимодействие заготовки с инструментом в процессе обработки (трение, вибрации и т.п.). Ввиду сложной внутренней структуры поликристаллических материалов и множества процессов, протекающих в ходе пластической деформации в объёме заготовки, затруднительно интерпретировать источники акустической эмиссии. Ранее было показано, что гармоническое движение дислокаций в ходе пластической деформации кристаллитов или зёрен может являться источником акустической эмиссии. С использованием методов молекулярной динамики обнаружено, что на атомном масштабе акустическая эмиссия определяется изменениями уровней как потенциальной, так и кинетической энергии. Целью настоящей работы является изучение связи возникающих дефектов структуры и изменений внутренней энергии образца с сигналами акустической эмиссии при наноиндентировании.

Моделируемый образец представлял собой медный прямоугольный параллелепипед размерами 18×18×9 нм. Вдоль оси Z лабораторной системы координат задавались периодические граничные условия. Ориентации кристаллической решётки были выбраны таким образом, чтоб оси X, Y и Z лабораторной системы координат в одном случае совпадали с основными кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001], соответственно, а в другом – с направлениями [120], [-210] и [001]. Четыре нижних атомных слоя были неподвижны, формируя подложку. Моделируемая система рассматривалась как канонический ансамбль NVT (в системе сохраняется число атомов, объём и температура), содержащий около 200000 атомов. Температура системы составляла 1 и 5 К. Низкая температура рассматривалась для исключения влияния теплового движения атомов. Расчёты проводились с использованием программного пакета LAMMPS[1]. Силы, действующие между атомами, описывались в рамках метода погруженного атома [2].

Для нагружения системы использовался «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой абсолютно жёсткий цилиндр радиусом 2 нм, состоящий из атомов, и полевой цилиндрический индентор радиусом 2,2 нм. Оси инденторов совпадали и были расположены вдоль оси Z. Воздействием материального индентора обеспечивались адгезионные свойства за счёт взаимного притяжения атомов. На атомы образца, попадающие внутрь области полевого индентора, действовали силы по направлению от оси цилиндра. Величина силы описывается формулой $F(r) = -K(r-R)^2$, где K – коэффициент пропорциональности, r – расстояние от центра цилиндра до атома и R – радиус цилиндра, а на атомы за пределами индентора ($r > R$) сила $F(r) = 0$. Таким образом, полевой индентор уменьшал силы адгезии между атомами образца и индентора. Нагружение задавалось путём вдавливания индентора с постоянной скоростью 0,1 Å/пс. Для анализа отклика системы на нагружение рассматривались силы, действующие на отдельные атомные площадки (сенсоры). Площадки расположены на свободных поверхностях образца в плоскости Y0Z вблизи выхода возникающих дислокаций на поверхность. Рассматривались площадки двух различных размеров вдоль оси Y: 30 нм и 40 нм. Визуализация и анализ структуры проводился с использованием программы OVITO [3]. Для изучения внутренней структуры применялся метод анализа ближайших соседей (common neighbor analysis) [4] и алгоритм извлечения

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

дислокаций (dislocation extraction algorithm) [5]. Первый метод по координатам ближайших соседей позволяет определить тип кристаллической структуры (ОЦК, ГЦК, ГПУ), в узле которой расположен атом, а второй обнаруживает дислокации определённого вида в кристаллах.

При низких температурах движение и взаимодействие дислокаций, а также их выход на поверхность обуславливают явно выраженное изменение значений сил, действующих на сенсорную площадку. В отсутствие температурных колебаний атомов изменение представляет собой плавный рост сил. При ненулевой температуре моделируемой системы процесс выхода дислокации на поверхность сопровождается резким увеличением амплитуды колебания сил, возникающих в результате температурных колебаний атомов.

В отсутствии выраженных изменений сигнала, например, в случае, когда дислокации накапливаются в объёме образца, может быть проведён Фурье анализ результирующего акустического сигнала. Было обнаружено, что в ходе развития пластической деформации образца с кристаллографическим направлением [120] вдоль оси X происходит изменение характеристик сигнала. На этапе упругой деформации можно выделить несколько пиков, которые связаны с температурными колебаниями атомов. После начала пластической деформации и формирования дислокаций наблюдается смещение максимума амплитуды к низкочастотным колебаниям.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №17-79-10081.

Литература

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. № 1. P. 1–19.
2. Mendelev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Phil. Mag. 2003. V. 83. P. 3977–3994.
3. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. № 1. P. 15012.
4. Honeycutt J.D., Andersen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // J. Phys. Chem. 1987. V. 91(19). P. 4950–4963.
5. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2012. V. 20. № 8. P. 085007.