

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

Томск
Издательский Дом ТГУ
2019

DOI: 10.17223/9785946218412/154

**ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА АКУСТИЧЕСКУЮ
ЭМИССИЮ В ПРОЦЕССЕ ОБРАБОТКИ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ.**

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

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Анализ акустической эмиссии (АЭ) – один из наиболее распространённых методов отслеживания состояния механических систем. Отличительной особенностью данного метода является возможность выявлять различные структурные изменения без какого-либо изменения свойств или формы материала, так называемый метод неразрушающего контроля. Кроме того, этот подход применяется при производстве деталей машин, например, в процессах обработки резанием, где АЭ используют для мониторинга состояния режущего инструмента или типа стружкообразования. Целью настоящей работы является изучение влияния размера индентора и возникающих дефектов структуры на сигналы акустической эмиссии в процессе обработки кристаллического образца скользящим индентором.

Моделируемый образец представлял собой медный прямоугольный параллелепипед размерами 36×18×9 нм. Расчёты проводились с использованием программного пакета LAMMPS [1]. Силы, действующие между атомами, описывались в рамках метода погруженного атома [2]. Вдоль оси Z лабораторной системы координат задавались периодические граничные условия. Моделируемая система рассматривалась как канонический ансамбль NVT (в системе сохраняется число атомов, объём и температура), содержащий около 400000 атомов. Температура системы составляла 1К. Низкая температура рассматривалась для исключения влияния теплового движения атомов.

Для нагружения системы использовался «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой абсолютно жёсткий цилиндр из атомов с радиусом R_m 2нм, 4нм и 6нм в различных задачах и полевой цилиндрический индентор с радиусом $R_m+0,2$ нм. Оси инденторов совпадали и были ориентированы вдоль оси Z. Индентор движется в направлении оси X с постоянной скоростью 10 м/с. Для получения сигналов акустической эмиссии на поверхности и в объёме образца выделялись площадки размерами 2×3×9 нм. Анализировались скорости движения центра масс сенсорных площадок в процессе нагружения. Для изучения внутренней структуры применялся метод анализа ближайших соседей [3] и алгоритм извлечения дислокаций [4]. Данные методы позволяют определить тип кристаллической структуры (ОЦК, ГЦК, ГПУ) и обнаружить дислокации определённого вида в кристаллах.

В качестве изменяемого параметра технологического процесса был выбран радиус кривизны индентора. В процессе обработки материала движущимся индентором может реализовываться 2 механизма пластической деформации: формирование стружки (оттеснение материала образца перед индентором) и вдавливание атомов образца в объём материала, приводя к накоплению упругой и пластической деформации. Моделировалось нагружение образца инденторами трёх радиусов при одинаковой глубине погружения. Для исследования сигналов применялся анализ Фурье. Рассматривались амплитудный спектр и спектр мощности. Было замечено, что увеличение радиуса индентора приводит к изменению сигнала, которое заключается в формировании ярко выраженных высокоамплитудных колебаний определённой частоты.

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

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. № 1. P. 1–19.
2. Mendeleev 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. 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.
4. 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.