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»

DOI: 10.17223/9785946218412/315

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКОЙ
ЭМИССИИ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ В ПРОЦЕССЕ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛА
СКОЛЬЗЯЩИМ ИНДЕНТОРОМ.**

^{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 и выявления вибраций. Отличительной особенностью данного метода является возможность выявлять различные структурные изменения без какого-либо изменения свойств или формы материала, так называемый метод неразрушающего контроля. Этот подход применяется, в том числе при производстве деталей машин, например, в процессах обработки резанием, где АЭ используют для мониторинга состояния режущего инструмента или типа стружкообразования. 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.). 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 в процессе обработки кристаллического образца скользящим индентором.

Моделируемый образец представлял собой медный прямоугольный параллелепипед размерами $36 \times 18 \times 9$ 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 совпадали с основными кристаллографическими направлениями $[100]$, $[010]$ и $[001]$, соответственно. Четыре нижних атомных слоя и четыре атомных слоя в плоскости $Y0Z$ с максимальной X координатой, были неподвижны, формируя подложку. Между подложкой и образцом задавался слой со свойствами отвода кинетической энергии атомов, позволяющий имитировать отвод температуры в объём материала. Моделируемая система рассматривалась как канонический ансамбль NVT (в системе сохраняется число атомов, объём и температура), содержащий около 400000 атомов. Температура системы составляла 1К, 5К и 100К. 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 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 . 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, что позволяло уменьшить силы адгезии между атомами образца и индентора. Индентор двигается в направлении оси X с постоянной скоростью 10 м/с. Для получения сигналов акустической эмиссии на поверхности и в объёме образца в плоскости $Y0Z$ выделялись площадки размерами $2 \times 3 \times 9$ нм и $2 \times 4 \times 9$ нм. Анализировались силы, действующие на данные сенсорные площадки и скорости движения центра масс сенсорных площадок. Визуализация и анализ структуры проводился с использованием программы OVITO [3]. Для изучения внутренней структуры применялся метод анализа

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

ближайших соседей (common neighbor analysis) [4] и алгоритм извлечения 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.

Анализ структуры образцов в различные моменты времени показал, что дефекты структуры формируются непосредственно в области контакта индентора с поверхностью образца. При дальнейшем нагружении они распространяются в объём моделируемой системы. Движение и взаимодействие дислокаций, а также их выход на поверхность сопровождаются коллективным движением группы атомов в одном направлении, что обуславливает явно выраженное изменение колебаний центра масс сенсорной площадки, которое заключается в резком увеличении амплитуды. При высоких температурах сигналы отдельных дефектов теряются на фоне колебаний сил. В этом случае применяется фильтр, основанный на Фурье анализе и отсекающий колебания с частотой выше 50 ГГц, связанные с температурными колебаниями атомов.

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. 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.