

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2018 г. по 30.06.2019 г.

по проекту «**Численное изучение процесса дефектообразования в металлических материалах с использованием методов анализа сигналов акустической эмиссии**»,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 17-79-10081

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Никонов Антон Юрьевич

Для изучения процессов пластической деформации в ходе обработки поверхности индентором и возникающих при этом в объёме упругих волн был смоделирован образец, который представлял собой прямоугольный параллелепипед размерами $40 \times 20 \times 9$ нм вдоль осей X , Y и Z соответственно. Вдоль оси Z лабораторной системы координат задавали периодические граничные условия для имитации протяжённости образца. Четыре атомных слоя, расположенных на поверхности, противоположной к нагружаемой, моделировали неподвижными, имитируя подложку. Кроме того, фиксировались четыре атомных слоя в плоскости YOZ с максимальной X -координатой. Между подложкой и образцом задавался слой со свойствами отвода кинетической энергии атомов, позволяющий имитировать отвод температуры в объём материала. Для нагружения системы использовали «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой состоящий из атомов абсолютно жёсткий цилиндр с радиусом R_m и осью вдоль направления Z и полевой цилиндрический индентор с радиусом $R_m + 0,2$ нм. Положение осей инденторов совпадало. Воздействием материального индентора обеспечивали адгезионные свойства. 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 и исключить прилипание атомов образца к нему. Для получения сигналов акустической эмиссии на поверхности и в объёме образца в плоскости YOZ 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. Для выявления изменений в кристаллической структуре моделируемых образцов применялся анализ ближайших соседей (common neighbor analysis) и алгоритм извлечения дислокаций (dislocation extraction algorithm). Данные методы позволяют определить локальный тип кристаллической структуры (ОЦК, ГЦК, ГПУ и др.) и выявить дислокации.

Построенная и представленная выше модель описывает процессы, реализуемые в отдельном фрагменте обрабатываемого материала на атомном масштабе. В качестве изменяемого параметра технологического процесса был выбран радиус кривизны индентора. В процессе обработки материала движущимся индентором (процесс выглаживания) 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: 2 нм, 4 нм и 6 нм 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.

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.