

Сведения о выполненных работах в 2017 году
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

Из публичных баз данных были выбраны потенциалы межатомного взаимодействия, наиболее часто употребляемые для расчётов на масштабе отдельных атомов процессов пластической деформации меди и железа. Верификация потенциалов была выполнена путём сравнения с экспериментальными значениями энергетических и упругих характеристик, полученных методами компьютерного моделирования с использованием данных потенциалов. Посредством потенциалов, описывающих свойства меди, были рассчитаны энергии вакансий и дефектов упаковки вычитания. Потенциалы железа тестировались на основе расчётов вакансий и компонент тензора упругости. В соответствии с результатами сравнения были выбраны потенциалы, которые наиболее точно рассчитывают тестируемые характеристики.

Для изучения процессов пластической деформации и возникающих при этом в объёме упругих волн был смоделирован образец, который представлял собой прямоугольный параллелепипед размерами $18 \times 18 \times 9$ 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. Для нагружения системы использовали «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой состоящий из атомов абсолютно жёсткий цилиндр с радиусом 2 нм и осью вдоль направления Z и полевой цилиндрический индентор с радиусом 2,2 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. Моделировали 2 этапа нагружения образца. На первом происходило вдавливание индентора с постоянной скоростью $0,1 \text{ \AA}/\text{пс}$. После погружения на глубину 1 нм к линейному перемещению с постоянной скоростью добавляли колебательное движение с амплитудой $A(t)=0,05 \text{ \AA}/\text{пс}$ и частотой $\omega=1/3 \text{ пс}^{-1}$. Для получения сигналов акустической эмиссии на свободных поверхностях образца в плоскости YOZ выделялись площадки размерами $2 \times 3 \times 9$ нм. Анализировались силы, действующие на данные сенсорные площадки.

Для выявления изменений в кристаллической структуре моделируемых образцов применяли анализ ближайших соседей и алгоритм извлечения дислокаций. Данные методы позволяют определить локальный тип кристаллической структуры (ОЦК,

ГЦК, ГПУ и др.) и выявить дислокации. 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 и при определённых условиях выходят на поверхности, на которых расположены сенсорные площадки. Основным механизмом пластической деформации образца меди является формирование частичных дислокаций Шокли, и, следовательно, дефектов упаковки вычитания. В образце железа наиболее часто возникают дислокации типа $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$. Обнаружено, что в случае индентирования с постоянной скоростью (без добавления вибраций) возможно возникновение отдельных дислокационных петель, которые распространяются в объём образца и достигают сенсорных площадок. Это позволяет проанализировать изменения сигналов на сенсорах, которые возникают из-за единичных дефектов структуры.

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. При высоких температурах сигналы от отдельных дефектов теряются на фоне температурных колебаний сил. Для их выявления был проведён частотный анализ полученного сигнала. Медианная частота такого сигнала составляет около 7 ТГц. Из анализа спектра мощности сигнала для частот в диапазоне от 0 до 8 ТГц было обнаружено, что максимальные значения мощности расположены в узком интервале частот.

В случае возникновения вибрационного воздействия на образец происходит изменение сигнала. В результате расчётов поведения образца в условиях двухэтапного нагружения было выделено 3 различных типа сигналов. Первый тип соответствует нагружению без вибраций. На этом временном интервале индентор движется с постоянной скоростью без добавления колебательного движения. Второй тип сигнала является переходным и наблюдается, когда амплитуда колебаний только начинает расти. При этом происходит уменьшение медианной частоты с 7 ТГц до 1,7 ТГц и на порядок увеличиваются максимальные значения на спектре мощности. Третий тип сигнала характеризуется высокой амплитудой колебаний, которая в процессе нагружения продолжает расти. Частотные характеристики таких колебаний не совпадают с колебаниями индентора. Медианная частота такого сигнала составляет 1,7 ТГц, наблюдаются только отдельные ярко выраженные скачки значений до 3,1 ТГц, а спектр мощности в узком диапазоне частот демонстрирует несколько пиков, выросших на 2 порядка по сравнению со вторым типом сигнала. Таким образом, значения силы, действующей на сенсор, растут с амплитудой вибрации. Сопоставление спектральных характеристик показывает с одной стороны зависимость между медианной частотой и вибрацией, а с другой – между спектром мощности и вибрацией. Объяснением такой связи может быть связь между

амплитудой вибраций и полной энергией системы. Анализ энергетических характеристик системы показывает, что с увеличением амплитуды колебаний индентора полная энергия системы растёт в основном за счёт потенциальной её компоненты. Это означает, что в процессе нагружения атомы кристаллической решётки формируют дефекты структуры, вовлекая в процессы деформации всё больший объём образца. Этим объясняется, почему медианная частота уменьшается при вибрационном воздействии. Число дефектов увеличивается, в то время как их релаксация замедляется за счёт увеличения полей упругих напряжений.