

УДК 531.44(620.191)

**В.В. Сергеев, А.Ю. Смолин, С.А. Добрынин,
С.Ю. Коростелев, С.Г. Псахье**

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИДЕНТИФИКАЦИИ НАНОСКОПИЧЕСКИХ ПОР НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СИЛЫ ТРЕНИЯ¹

Методом подвижных клеточных автоматов проведено моделирование типичных ситуаций для идентификации наноскопических пор в керамическом покрытии на основе спектрального анализа непрерывной регистрации силы трения при движении малого контртела по поверхности покрытия. Показано, что на фурье-спектрах силы трения присутствуют пики, соответствующие расстоянию между порами и их размеру.

Ключевые слова: *дефектоскопия, трение, моделирование, метод частиц.*

Нанесение наноструктурных покрытий позволяет значительно повысить эксплуатационные характеристики элементов машин, механизмов и конструкций. При этом механические свойства таких покрытий сильно зависят от наличия в них дефектов и повреждений, в том числе наноразмерного масштаба. В связи с этим, актуальным является развитие методов диагностики таких дефектов сплошности. Одним из новых методов неразрушающего контроля качества покрытий, позволяющим оценить дефекты структуры тонких поверхностных слоев в твердом теле, является подход, связанный с использованием силы трения в качестве измеряемого и анализируемого параметра отклика системы [1, 2], и названный трибоспектроскопией.

В данной работе возможности применения трибоспектрального способа для анализа дефектности поверхностных слоев твердых тел изучены методом численного моделирования на примере металла с высокопрочным керамическим покрытием. В двумерной постановке данная задача была рассмотрена в работе [1]. Было показано, что на спектре Фурье для временной зависимости силы сопротивления существует пик, соответствующий средней частоте расположения нанопор (среднему расстоянию между ними). В данной работе моделирование проводилось в трехмерной постановке, что является более реалистичным, а также позволяет учитывать больше параметров реальных систем.

1. Описание моделируемой системы

В качестве метода компьютерного моделирования использовался метод подвижных клеточных автоматов [3]. Этот метод основан на дискретном представлении материала (метод частиц). Моделируемый объект представляется ансамблем частиц конечного размера, взаимодействующих по определенным правилам, обеспечивающим возможность описывать как сплошной материал, так и процес-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке проектов РФФИ (№ 09-03-12039-офи_м), Программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения и процессов управления РАН № 13.13.3, интеграционного проекта СО РАН №127 со сторонними организациями, а также проекта III.20.2.4 Программы фундаментальных исследований СО РАН на 2010-2012 гг.

сы разрушения в нем, вплоть до фрагментации и взаимодействия этих фрагментов как сыпучей среды. Автоматы обладают трансляционными и вращательными степенями свободы. Силы взаимодействия определяются так называемыми функциями отклика. В простейшем случае линейной функции отклика модель описывает сплошную линейно-упругую среду, различные формы нелинейности приводят к большому разнообразию сложного поведения моделируемой среды. Отметим, что этот метод широко применяется для описания деформации и разрушения материалов, в частности динамических контактных задач [4], когда важным является явный учет генерации и распространения упругих волн в материале.

Моделировался стальной образец с покрытием из керамики ZrO_2 (рис. 1). Толщина покрытия была выбрана равной $H = 60$ нм, длина образца $L = 500$ нм, ширина – $M = 125$ нм, размер автомата $d = 3$ нм. Керамическое контртело имело форму конуса с диаметром основания 60 нм. Движение контртела моделировалось заданием автоматам его верхней поверхности постоянной скорости $V = 5$ м/с в горизонтальном направлении. При этом нижняя поверхность образца была неподвижной, а его боковые поверхности свободными. При движении контртела проводилась регистрация силы сопротивления его движению по поверхности, ассоциируемая с силой трения F . Для регистрируемых данных $F(t)$ строилось дискретное преобразование Фурье [5] и анализировались соответствующие спектры.

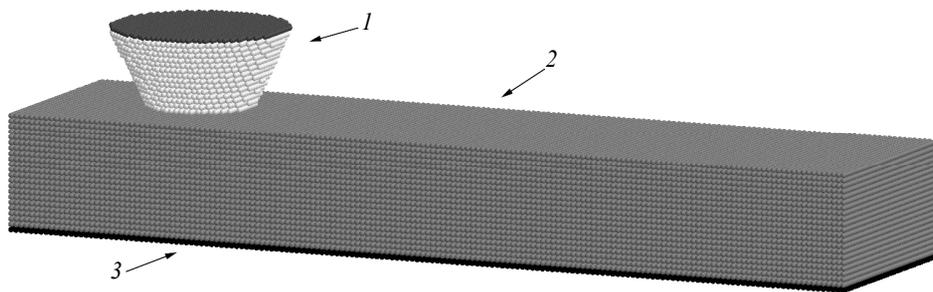


Рис. 1. Моделируемая система:
1 – контртело, 2 – керамическое покрытие, 3 – стальная подложка

Поврежденность поверхностного слоя моделировалась заданием наноскопических протяженных нарушений сплошности покрытия – нанопор. Рассматривалось их периодическое расположение с расстоянием $P = 120$ нм. При этом ширина поры составляла $w = 48$ нм, а высота – $h = 3$ нм. В работе анализировалась возможность определения размеров и пространственного расположения таких дефектов.

2. Результаты моделирования

Преобразование Фурье регистрации силы трения скольжения для бездефектного образца (рис. 1) приведено на рис. 2. На данном спектре хорошо видна частота, соответствующая периодической составляющей искусственной шероховатости поверхности образца (искусственная шероховатость связана с дискретностью структурных элементов – клеточных автоматов) и равная $f_d = V/d = 1,6$ ГГц. На графике также хорошо видны пики последующих гармоник, соответствующие частотам nf_d (где n – целое число). Амплитуда этих пиков убывает с ростом

п. Отметим, что значение амплитуды $\sim 0,4$ нм и период искусственных неровностей в нашей модели (3 нм) качественно соответствует экспериментально измеряемым параметрам шероховатости поверхности на наноскопическом масштабном уровне [6].

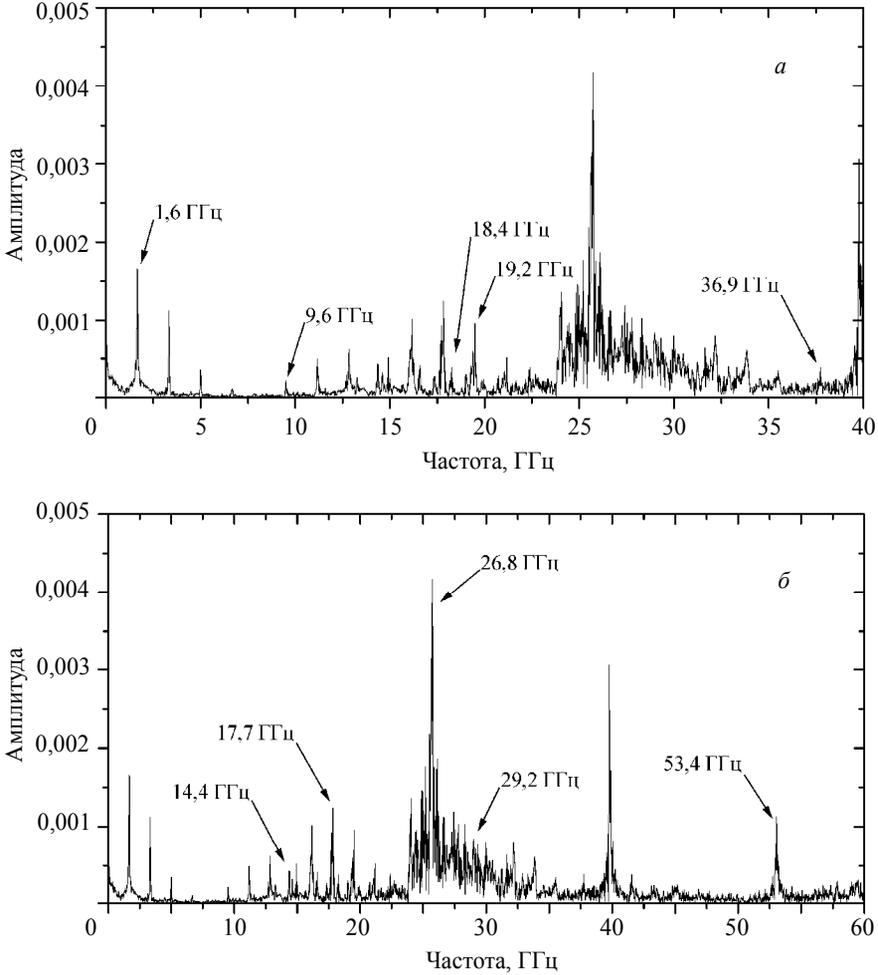


Рис. 2. Спектр Фурье регистрации силы трения скольжения для бездефектного образца (масштаб 1...40 ГГц (а) и масштаб 1...60 ГГц (б))

Определим собственные частоты моделируемой системы. Очевидно, что они зависят от скоростей звука и геометрических размеров деталей системы. Скорость поперечного звука определяется формулой

$$v_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}},$$

а скорость продольного звука –

$$v_p = \sqrt{\frac{K + G \cdot \frac{4}{3}}{\rho}}$$

Для керамики ZrO_2 $G = 30$ ГПа, $K = 70$ ГПа, $\rho = 5600$ кг/м³, следовательно, $v_s = 2315$ м/с и $v_p = 4432$ м/с.

Оценим собственные частоты для покрытия. В случае призматического тела, у которого одна грань закреплена, а остальные свободны, его собственную частоту приближенно можно определить по аналогии со стержнем, закрепленным на одном конце [7], т.е. по формуле $p_k = v(k-0,5)/2l$, где v — скорость волны, а l — высота призмы. Принимая $l = 60$ нм, в случае стержня, закрепленного на одном конце, первая гармоника для сдвиговой волны равна 9,6 ГГц, а для продольной — 19,2 ГГц. В случае свободного стержня формула для собственных частот имеет вид $p_k = vk/2l$, следовательно первая гармоника для сдвиговой волны равна 18,4 ГГц, а для продольной — 36,9 ГГц. Эти частоты видны на спектре силы трения (рис. 2, а). Принимая $l = 125$ нм (ширина образца), получим для свободного стержня и продольной волны частоту 17,7 ГГц (отмечена на рис. 2, б).

Оценим собственные частоты для индентора. Принимая $l = 40$ нм, в случае закрепленного стержня первая гармоника для сдвиговой волны равна 14,4 ГГц, а для продольной — 26,8 ГГц. В случае стержня со свободными концами первая гармоника для сдвиговой волны равна 29,2 ГГц а для продольной — 53,4 ГГц.

Все определенные частоты приближенно соответствуют четким пикам на спектре рис. 2. Несмотря на то, что применение описанной методики оценки собственных частот для такой сложной системы, которая показана на рис. 1, не является очевидным, контрольный расчет собственных частот в программе ANSYS дает результаты, отличающиеся от найденных не более чем на 10 %.

Наличие периодически расположенных нанопор (рис. 3) приводит к появлению выраженного низкочастотного пика на спектрах Фурье регистрации силы трения скольжения (рис. 4). Номером 1 на рис. 4 обозначен пик, соответствующий характерному расстоянию между нанопорами, а номером 2 — пик, соответствующий

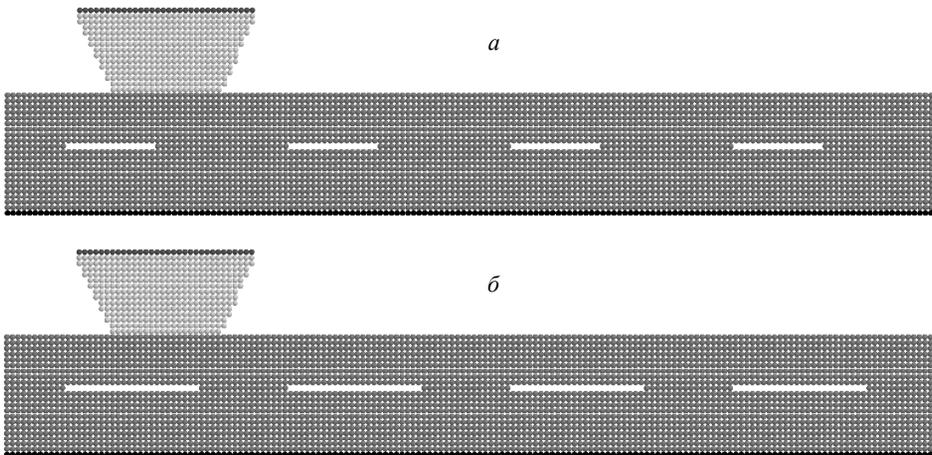


Рис. 3. Нанопоры длиной 48 нм (а) и 72 нм (б), расположенные на глубине 30 нм, с периодом следования 120 нм

длине пути индентора. Частота пика, соответствующего периоду следования нанопор, вычисляется по формуле V/P , где V – скорость движения индентора, а P – период следования нанопор. Эта частота в нашем случае равна 0,15 ГГц.

На рис. 5 представлены спектры Фурье для образцов с разными размерами нанодфектов. На этих спектрах можно выделить частоту, отвечающую за плотность (период следования) нанодфектов ($\sim 0,04$ ГГц), которая соответствует линейным размерам ~ 120 нм, и частоты, отвечающие за размер нанодфектов ($\sim 0,07$ и $\sim 0,09$ ГГц), которые соответствуют линейным размерам ~ 48 и ~ 72 нм соответственно.

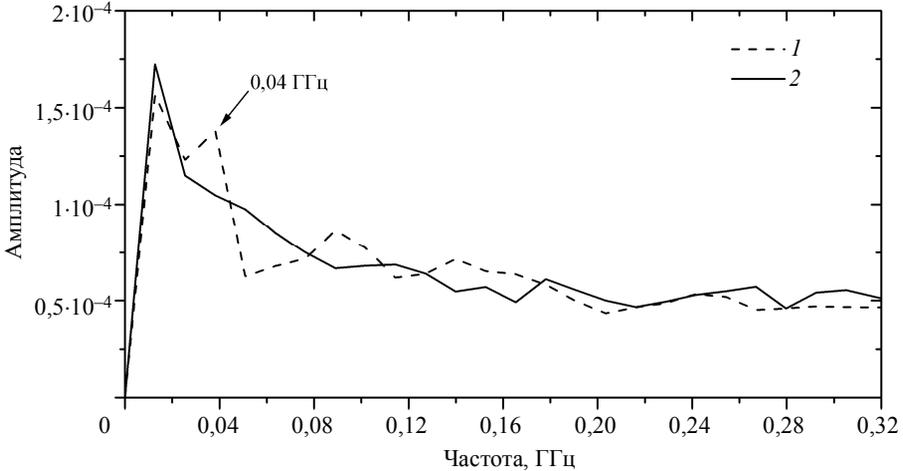


Рис. 4. Спектры Фурье для бездефектного образца (кр. 2) и образца с нанопорами (кр. 1), представленного на рис. 3, а

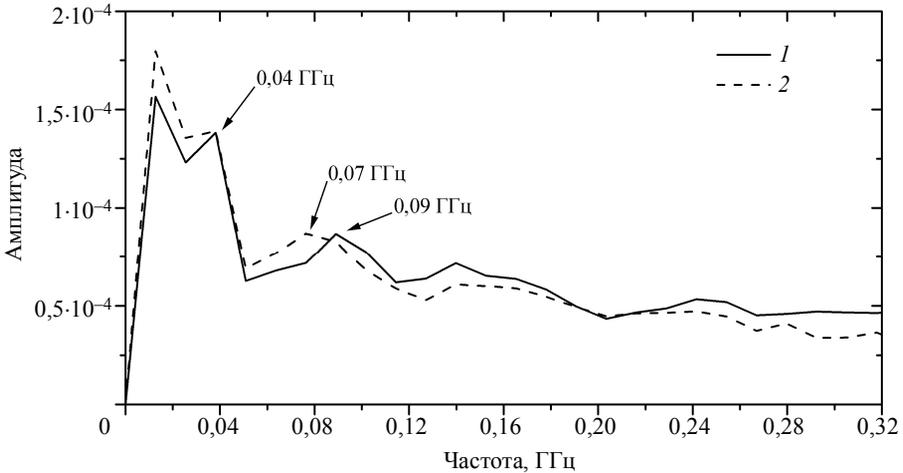


Рис. 5. Спектры Фурье для образцов с нанопорами, представленных на рис. 3, а (кр. 1) и рис. 3, б (кр. 2)

Таким образом, спектральный анализ позволяет сделать оценку размеров нанопор. В данном примере оценочный размер равен 55 нм, что с точностью ~87 % соответствует заданному значению 48 нм.

Выявленный эффект влияния наноповреждений на силу трения скольжения, очевидно, связан с прогибом поверхности при прохождении наноиндентора над нанопорой [1, 8]. В этой связи чувствительность определения пор должна зависеть от площади контакта контртела с поверхностью. Используемый в данных расчетах диаметр контакта контртела с поверхностью (60 нм) соответствует часто используемым наноскопическим инденторам и контртелам.

Поскольку трехмерные расчеты очень требовательны к вычислительным ресурсам, то длина пути индентора в расчетах задавалась относительно небольшой. Следовательно данные, представленные на рис. 4 и 5, имеют низкое разрешение по частоте. При увеличении длины пути индентора точность полученных данных будет расти как за счет увеличения разрешения по частоте, так и за счет того, что индентор пройдет большее количество пор.

Заключение

Таким образом, полученные результаты позволяют предполагать, что нанопоры порядка 120 нм могут быть идентифицированы в реальных экспериментах на основе анализа спектра силы трения скольжения. В основу экспериментальной установки может быть положена система, предложенная в [9]. Идея установки состоит в том, что контртело, лежащее на поверхности, приводится в движение, при этом с высокой точностью измеряется как перемещение контртела, так и действующая на него сила. Следовательно, спектроскопический анализ силы трения может рассматриваться как новый перспективный метод неразрушающего контроля поврежденности нанопокровов и поверхностных слоев твердого тела наноскопической толщины.

ЛИТЕРАТУРА

1. Псахье С.Г., Попов В.Л., Шилько Е.В. и др. Изучение поведения и диагностика свойств поверхностного слоя твердого тела на основе спектрального анализа // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12. № 4. С. 27–42.
2. Псахье С.Г., Шилько Е.В., Попов В.Л. и др. О возможности диагностики дефектности керамических наноструктурных покрытий. Нанотрибоспектроскопия // Изв. вузов. Физика. 2009. № 4. С. 41–45.
3. Псахье С.Г., Остермайер Г.П., Дмитриев А.И. и др. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика. 2000. Т. 3. № 3. С. 5–13.
4. Смолин А.Ю., Добрынин С.А., Псахье С.Г. Частотно-временной анализ упругих волн в модельной паре трения // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2009. № 1(5). С. 96–111.
5. *Mala S. A Wavelet Tour of Signal Processing*. N.Y.: Academic Press, 1999. 671 p.
6. *Österle W., Kloß H., Urban I., Dmitriev A. Towards a better understanding of brake friction materials* // Wear. 2007. V. 263. P. 1189–1201.
7. *Бидерман В.Л. Теория механических колебаний*. М.: Высшая школа, 1980. 408 с.
8. *Седов Л.И. Механика сплошной среды*. Т. II. М.: Наука, 1976. 576 с.
9. *Popov V.L., Starcevic J., Filippov A.E. Reconstruction of potential from dynamic experiments* // Phys. Rev. E. 2007. V. 75. No. 6. P. 066104-1 – 066104-6.

Sergeev V.V., Smolin A.Yu., Dobrynin S.A., Korostelev S.Yu., Psakh'e S.G. STUDY OF THE POSSIBILITY TO IDENTIFY NANO-SCALE PORES ON THE BASIS OF FRICTION FORCE ANALYSIS. Using the movable cellular automata method, the typical situations in identification of nano-scale pores in a ceramics coating were simulated on the basis of the spectral analysis of continuous registering of friction force during the small counter-body motion on the coating surface. The Fourier spectra of the friction force are shown to have peaks corresponding to the distance between the pores and their size.

Keywords: crack detection, friction, simulation, particle method

SERGEEV Valerii Viktorovich (Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of RAS). E-mail: svalera@ispms.tsc.ru

SMOLIN Aleksey Yur'evich (Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of RAS). E-mail: asmolin@ispms.tsc.ru

DOBRYNIN Sergei Aleksandrovich (Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of RAS). E-mail: serg-dobrinin@yandex.ru

KOROSTELEV Sergei Yur'evich (Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of RAS). E-mail: sergeyk@ispms.tsc.ru

PSAKH'E Sergei Grigor'evich (Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of RAS). E-mail: sp@ms.tsc.ru