

Моделювання впливу дефектів на резонансний спектр механічних коливань порошкових матеріалів

О. В. Вдовиченко

Проведено обчислювальні дослідження впливу об'ємних пор та площинних дефектів на резонансний спектр порошкових матеріалів в діапазоні пористості 0—0,24. Одержані розв'язки дозволили встановити особливості зміни резонансного спектра зразків матеріалу в залежності від пористості.

Ключові слова: порошкові матеріали, резонансна ультразвукова спектроскопія, пори, площинні дефекти.

Вступ

Вивчення резонансного спектра механічних коливань зразків матеріалів дає можливість одержати важливу інформацію про характеристики пружності і термодинамічні процеси, що відбуваються під час експерименту. Зокрема, останнім часом поширилися методи резонансної ультразвукової спектроскопії (РУС), які полягають в скануванні резонансної структури зразків матеріалів майже ідеальної геометрії, таких як куб, паралелепіпед або циліндр з відомими розмірами і масою [1, 2]. За розташуванням резонансних піків в частотному діапазоні, а також за шириною цих піків визначають тензор пружності і поглинання механічної енергії в матеріалі. Від ультразвукових методів, що ґрунтуються на дослідженнях в часовому діапазоні, РУС якісно відрізняється чутливістю, з одного боку, до всіх компонентів тензора пружності, а з іншого боку — лише до термодинамічної дисипації енергії (відомо, що на зменшення амплітуди ультразвукового імпульсу впливають також геометричні фактори і поглинання на межах перетворювач—зразок). Перевагою РУС перед стандартними механічними випробуваннями є можливість використання зразків малих розмірів і простої форми, що особливо важливо на етапі відпрацювання технології одержання матеріалів з унікальних порошоків.

На відміну від кристалів, які відносно вільні від дефектів структури, структурно-неоднорідні матеріали, зокрема композити і пористі матеріали, містять макродефекти, до яких належать об'ємні пори, що зменшують загальну густину матеріалу, і площинні дефекти, які практично не впливають на густину, проте суттєво знижують пружність і міцність матеріалу. Наявність макродефектів спричиняє перекриття резонансних піків та переміщення їх один відносно одного в частотному діапазоні, що не дозволяє адекватно ідентифікувати форму коливань відповідного експериментально визначеного резонансного піка і досягти необхідної точності при визначенні тензора пружності.

Метою даної роботи є обчислювальне модельне дослідження впливу пористості та наявності площинних дефектів на резонансний спектр механічних коливань ізотропних порошкових матеріалів з використанням запропонованої раніше моделі пружної поведінки таких матеріалів [3].

Визначення резонансних частот

Методи РУС ґрунтуються на формулюванні функції Лагранжа для вільних коливань тривимірного пружного тіла. Лагранжіан можна записати як [2]

$$L = \int_V (T - U) = \int_V \left[\frac{1}{2} \sum_i \rho \omega^2 u_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right] dV, \quad (1)$$

де T та U — кінетична і потенціальна енергії відповідно; ρ — густина; u_i — i -й компонент вектора переміщення; ω — частота; C_{ijkl} — тензор пружності четвертого рангу, а інтегрування проводять по об'єму V .

Для того щоб відшукати мінімум інтегралу (1), обчислюють диференціал L як функцію u :

$$\delta L = \int_V \left[\sum_i \left(\rho \omega^2 u_i - \sum_{j,k,l} C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \right) \delta u_i \right] dV - \int_S \left[\sum_i \left(\sum_{j,k,l} \bar{n}_j C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) du_i \right] dS. \quad (2)$$

Оскільки u_i є довільним в об'ємі V та на площі вільної поверхні S , яка охоплює цей об'єм, обидва члени рівняння (2), що містяться в квадратних дужках, повинні дорівнювати нулю. Таким чином, набір u_i , що задовольняє згаданим умовам, відповідає власним частотам системи.

Для того щоб обрахувати власні частоти чисельним методом, потрібно розкласти u_i в базисі:

$$u_i = \sum_{\lambda} a_{i,\lambda} \Phi_{\lambda}, \quad (3)$$

де a_i — коефіцієнти розкладання; Φ_{λ} — базисні функції, та підставити вираз (3) в рівняння (1), віднайти стаціонарні точки Лагранжіана і розв'язати задачу власних значень. За базисні приймали функції [2]

$$\Phi_{\lambda} = x^l y^m z^n, \quad (4)$$

де l, m і n — цілі додатні числа.

Стаціонарні точки Лагранжіана знаходимо з умови

$$\omega^2 T_a = U_a, \quad (5)$$

де елементами матриць T і U є інтеграли кінетичної та потенціальної енергій відповідно.

Величини частот різних мод коливань одержані з обчислювального експерименту з використанням стандартних чисельних методів.

Модель порошкового матеріалу

Матеріал вважали лінійно-пружним і ізотропним. Для обчислення залежності частоти від пористості θ в інтеграл (1) підставляли значення густини $\rho = \rho_0(1 - \theta)$, де ρ_0 — густина матеріалу, що не містить пор. Натомість вважали, що площинні дефекти на густину не впливають. Для того щоб врахувати вплив дефектів, притаманних порошковим матеріалам, на елементи тензора пружності матеріалу, були використані результати прямого комп'ютерного моделювання на елементарній комірці, одержані в роботі [3], де пори моделювались круговими отворами, а площинні

дефекти — сильно видовженими еліпсоїдами. Пористість визначали як відношення площі кругового отвору S до загальної площі квадратної комірки A , а густину площинних дефектів — за формулою $\alpha = \frac{1}{A} \sum l_k^2$, де l_k — довжина більшої осі k -го еліпсоїда. Проте, на відміну від [3], в даній роботі не враховували ефект різноопірності матеріалу при розтягуванні і стисненні, а вважали, що площинні дефекти не змикаються при стисненні. Для визначеності, в даній роботі обчислювали частоти власних коливань зразка кубічної форми порошкового матеріалу з властивостями твердої фази, що відповідають властивостям заліза, а саме: густиною $\rho_0 = 7860 \text{ кг/м}^3$, модулем Юнга $E_0 = 210 \text{ ГПа}$ та коефіцієнтом Пуассона $\nu_0 = 0,3$.

Результати моделювання та їх аналіз

Результати визначення частот різних мод власних коливань зразка кубічної форми в залежності від пористості наведені на рис. 1. По осі ординат на рис. 1 вказано нормалізовані частоти коливань кубічного елемента f/f_0 . Більшість власних частот коливань куба не мають аналітичних розв'язків, проте оцінки показують, що найнижчою власною частотою короткого зразка повинна бути частота першої моди крутильних коливань. Тому за частоту нормування обрали [4]

$$f_0 = \frac{1}{\pi L} \sqrt{\frac{G}{\rho}}, \quad (6)$$

де L — довжина ребра куба; $G = C_{44}$ — модуль зсуву модельованого матеріалу; ρ — його густина.

Моди коливань позначені таким чином. Великі літери D , T , S та F означають групи, до яких належать коливання — розтягу, крутіння, зсуву та вигину відповідно. Нижнім індексом позначали підгрупи: s — симетричні, a — антисиметричні, d — дублети. Цифрою позначено номери частотних мод відповідного коливання. На рис. 2 схематично зображено переміщення кубічного зразка при його коливаннях за деякими з мод [4].

Аналіз результатів чисельного експерименту, наведених на рис. 1, показує, що при збільшенні пористості резонансні частоти різних форм

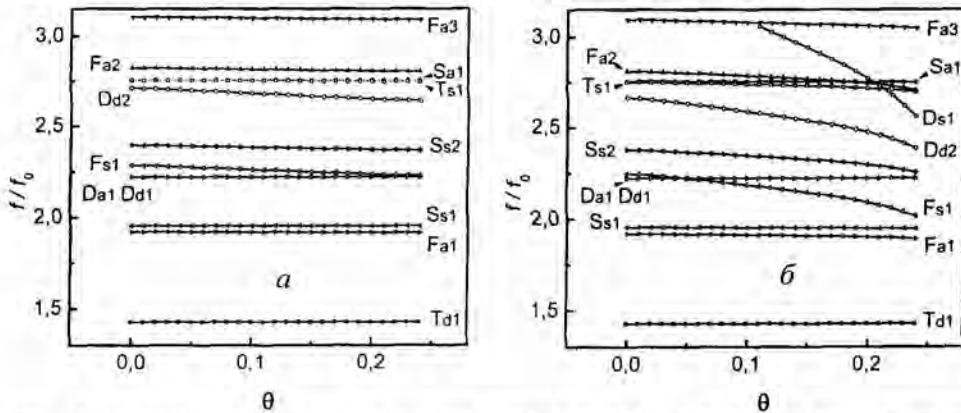


Рис. 1. Залежність резонансних частот коливань кубічного зразка порошкового заліза від об'ємної пористості за відсутності площинних пор (а) та при густині площинних дефектів $\alpha = 0,19$ (б).

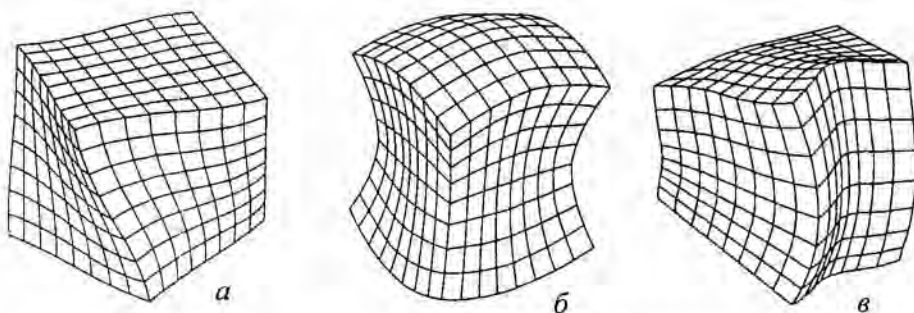


Рис. 2. Коливання куба за модами T_{d1} (а), D_{d1} (б) та F_{d1} (в) (за результатами [4]).

переміщуються одна відносно одної. Проте, як свідчить рис. 1, а, у випадку матеріалу, що містить лише сферичні пори, в діапазоні пористості 0—0,24 ці переміщення не приводять до зміни порядку мод коливань по частоті, за винятком мод S_{d1} та T_{s1} , коли зміна їх порядку відбувається при збільшенні пористості матеріалу до 0,07. Очевидно, слід також очікувати зміни порядку частот F_{s1} та D_{d1} , D_{d1} при пористості більш ніж 0,24. Загальновідомо, що характеристики пружності змінюються з пористістю за різними законами. Проте така загалом невелика зміна в розташуванні різних мод коливань в частотному діапазоні пояснюється тим, що кожна з розрахованих частот залежить від всіх (у нашому випадку ізотропного матеріалу — від двох) характеристик пружності матеріалу. При наявності в пористому матеріалі площинних дефектів ситуація змінюється (рис. 2, б). Якщо за відсутності об'ємних пор і наявності лише площинних дефектів порядок частот збігається з таким в бездефектному матеріалі, то збільшення пористості викликає суттєву і стрімку зміну порядку розташування різних мод коливань в частотному діапазоні.

Таким чином, проведений обчислювальний експеримент свідчить, що розташування резонансних частот в резонансному спектрі, одержаному за методом РУС, може бути тим параметром, який свідчить про наявність площинних дефектів, а відтак, про якість спікання порошкових матеріалів. Дана робота відкриває шлях для подальшого розвитку ультразвукових методів дослідження матеріалів, що виготовлені з порошків, особливо зважаючи на принципову можливість визначення за резонансним спектром також анізотропії характеристик пружності та дефектності досліджуваних матеріалів.

1. *Maynard J.* Resonant ultrasound spectroscopy // *Physics Today*. — 1996. — 49. — P. 26—31.
2. *Leisure R. G., Willis F. A.* Resonant ultrasound spectroscopy // *J. Phys.: Condens. Matter*. — 1997. — 9. — P. 6001—6029.
3. *Штери М. Б., Кузьмов А. В., Фролова Е. Г., Вдовиченко А. В.* Моделирование упругого поведения порошковых материалов при наличии объемных и плоских пор // *Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении*. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2005. — Вып. 7. — С. 11—16.
4. *Demarest H. H.* Cube-resonance method to determine the elastic constants of solids // *J. Acoust. Soc. Amer.* — 1971. — 49, No. 3. — P.768—775.

Моделирование влияния дефектов на резонансный спектр механических колебаний порошковых материалов

А. В. Вдовиченко

Методом определения собственных значений проведены вычислительные исследования влияния объемных пор и плоских дефектов на резонансный спектр механических колебаний порошковых материалов в диапазоне пористости 0—0,24. Полученные решения позволили установить особенности изменения резонансного спектра свободных колебаний кубических образцов материала в зависимости от пористости.

Ключевые слова: порошковые материалы, резонансная ультразвуковая спектроскопия, поры, плоские дефекты.

Simulation of effect of defects on resonant spectrum of mechanic oscillations of powder materials

O. V. Vdovychenko

The method of eigenvalue approximation is used to numerical calculation for the study of influence of volumetric pores and flat defects on resonant spectrum of mechanic oscillation of powder materials with porosity of 0 to 0,24. The received solutions allowed to exhibit the character of changes of free vibration resonant spectrum of a cube sample depends of porosity.

Keywords: powder materials, resonant ultrasound spectroscopy, pores, flat defects.