

УДК 620.178.15

DOI: 10.20310/1810-0198-2016-21-2-630-634

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАЛЕЧИВАНИЯ ТРЕЩИН В НАНОСТРУКТУРНОМ МЕТАЛЛИЧЕСКОМ СПЛАВЕ, ОБРАБАТЫВАЕМОМ СЕРИЕЙ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

© И.В. Ушаков, А.Ю. Батомункуев

Обсуждены основные параметры модели заживления трещин в тонких пленках аморфно-нанокристаллических металлических сплавов под действием импульсного лазерного излучения. Предложенная модель адекватно описывает процесс заживления трещин, ориентированных параллельно поверхности образца и имеющих небольшой угол раскрытия. После воздействия 8–12 импульсов заживляется более 90 % трещин, описываемых в модели. Показано, что увеличение количества импульсов более 12–15, не увеличивая эффективность заживления, приводит к плавлению материала и запуску процессов рекристаллизации. Предложенная модель позволяет определять оптимальные параметры селективной лазерной обработки.

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование; заживление трещин; лазерное заживление дефектов; лазерное упрочнение материала.

Воздействие импульсного лазерного излучения на наноструктурные металлические сплавы может сопровождаться их упрочнением. Повышение механической прочности материала связывают с заживлением дефектов и релаксацией высоких механических напряжений. В этом случае при сохранении высокой микротвердости будет возрастать пластичность материала.

Одним из самых опасных дефектов является трещина. Трещина представляет собой зародыш разрушения, а в ее вершине, как правило, присутствуют значительные механические напряжения. В случае, если образец подвергается воздействию значительных механических напряжений, то острые (не состаренные) трещины способны к скачкообразному росту. При росте таких трещин может высвободиться значительная энергия, в результате чего происходит катастрофическое разрушение образца [1].

В случае заживления трещин, расположенных на поверхности и/или в объеме образца, следует ожидать значительное упрочнение материала, в т. ч. повышение его пластических свойств [2–3]. Заживление трещин исследовали во многих материалах. Как правило, рассматривали заживление трещин под действием температуры и давления. В этих условиях возможно полное или частичное заживление трещин в металлах, щелочногалоидных кристаллах и других материалах. Очевидно, что при достаточном давлении и предплавленных температурах происходит размягчение материала, заживление трещин. Но заживление трещин можно стимулировать воздействием электрического тока, лазерных и не лазерных источников электромагнитного излучения (для прозрачных материалов).

Заживление трещин может быть полным и частичным. В реальных физических условиях идеальное заживление трещин невозможно. На месте бывшей трещины всегда остаются какие-то дефекты, например, повышенная плотность дислокаций. Но в любом случае, после «полного» или частичного заживления трещин

наблюдается повышение прочности. Под частичным заживлением понимаем: закругление вершины трещины; снижение высоких механических напряжений в ее вершине; снижение плотности дефектов в окрестности трещины; уменьшение длины трещины; возникновение локальных контактов между поверхностями трещины.

Заживление трещины возможно в прогретом аморфно-нанокристаллическом металлическом сплаве под действием шокового давления [4]. Использование серии лазерных импульсов способствует заживлению. Для оптимизации процесса заживления трещин необходимо выявить основные закономерности процесса заживления. После этого станет возможным формулировать требования к параметрам лазерной обработки. К сожалению, в настоящее время прямое экспериментальное исследование лазерно-стимулированного процесса заживления трещин в наноструктурных материалах невозможно. Возможно исследование процесса лазерно-стимулированного заживления нано- и микротрещин в наноструктурных металлических сплавах компьютерным моделированием с последующей экспериментальной проверкой, что и является целью данной работы.

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для проведения эксперимента необходима подготовка образцов для лазерного воздействия. Для этого делим тонкую аморфную ленту марки 82K3XCP на отдельные образцы размером 15×25 мм. Далее образцы необходимо отжечь в печи для перевода материала в аморфно-нанокристаллическое состояние. Обработанные образцы помещаем на полимерную подложку с металлическим основанием. После чего можно воздействовать на образцы при помощи оптического квантового генератора (ELS-01,  $\nu_{\text{имп}}$  до 50 Гц,  $\lambda = 1064$  нм,  $E_{\text{имп}}$  50–100 мДж,  $\tau \approx 15$ –20 нс; LS 2137,  $E_{\text{имп}} \approx 250$  мДж,

$\lambda = 1064$  нм,  $\tau \approx 15\text{--}17$  нс). Подробно методика эксперимента описана в работах [2–4].

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

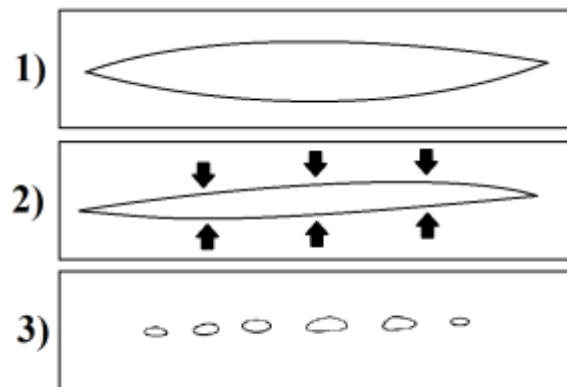
Аморфно-нанокристаллический сплав 82К3ХСР имеет сложный химический состав, а многообразие кристаллических решеток нанокристаллов не позволяет их идентифицировать при рентгеноструктурном анализе. Проблемы расшифровки рентгенограмм касаются не только сплава 82К3ХСР, но и других многокомпонентных аморфно-нанокристаллических металлических сплавов [5–8]. В настоящее время неизвестен химический состав межзеренной прослойки и многих кристаллитов. Неизвестна кристаллическая решетка кристаллитов, т. к. рентгеноструктурный анализ только лишь позволяет сделать предположения о структуре сплава.

В работе [9] была сделана попытка анализа метастабильных фаз, формирующихся в сплаве 82К3ХСР при изотермическом отжиге. Идентифицировать метастабильные фазы не удалось, т. к. существует слишком много кристаллических структур, которые могут (в совокупности) давать фиксируемые рентгенограммы. Удалось сделать только качественный анализ фазового состава. Рентгенограммы свидетельствуют о наличии структур, схожих со структурами гексагонального кобальта, кубического кобальта,  $\text{Co}_2\text{Si}$ ,  $\text{VCo}_2$ ,  $\text{B}_7\text{Co}_{13}$  и пр. Таким образом, в настоящее время невозможно строгое решение задачи компьютерного моделирования заживления трещин из-за слишком большого количества неизвестных факторов.

В данной работе развивается компьютерное моделирование заживления трещин в наноструктурном материале. Часть результатов модельного эксперимента может быть прямо или косвенно верифицирована экспериментальными данными. Кроме того, предсказания модели помогают оптимизировать план экспериментальных исследований и скорректировать режим лазерной обработки.

Определим основные положения модели. В аморфно-нанокристаллических металлических сплавах, получаемых контролируемой кристаллизацией из аморфного состояния, возможно появление высоких механических напряжений. О форме трещин в таких материалах возможно судить как по фотографиям, выполненным с использованием оптических и электронных микроскопов, так и по данным компьютерного моделирования.

К настоящему времени установлено, что поверхности таких трещин могут быть неровными, а сама трещина имеет сложную форму. В том случае, если трещина имеет сравнительно простую геометрическую форму и расположена параллельно поверхности, то в случае воздействия на нее ударной волны (особенно в прогревом материале) возможно полное или частичное заживление (рис. 1). В трещинах может находиться газ, в результате чего полное заживление трещин будет невозможно. Однако в этом случае возможно возникновение вместо трещины системы пор. Будем считать, что частичное заживление произошло в том случае, если вместо трещины получаем систему пор (рис. 1), при этом отсутствуют концентраторы механических напряжений. Предложенная модель относится, прежде всего, к тем трещинам, которые параллельны поверхности образца.



**Рис. 1.** Схема заживления трещин: 1) перед воздействием лазерного импульса; 2) при воздействии на трещину лазерным импульсом; 3) заживленная трещина с образовавшимися порами (частичное заживление)

Для моделирования заживления трещин разработаны специальные программы [1; 10], модернизированную версию которых использовали в данной работе. Программа основана на следующем алгоритме.

1. Определяются (фиксированные) размеры образца, подвергаемого воздействию лазерной плазмы.
2. Определяется количество импульсов лазерного излучения, воздействующих на образец.
3. Определяются коэффициенты, связанные с пластическими свойствами материала, в т. ч. подвергаемого нагреву.
4. Произвольным образом вводят значение угла (раскрытия) трещины.
5. Подбираются две матрицы различного размера (от  $100 \times 100$  до  $2000 \times 2000$ ) для моделирования трещины (поверхности). Сопоставляя межатомное расстояние (0,2 нм) с матрицей, получаем, что трещина размером  $\approx 200 \times 200$  соответствует матрице точек размером  $1000 \times 1000$ . Значит, данный размер матрицы согласуется с реальными размерами трещины.
6. При помощи генератора случайных (псевдослучайных) чисел заполняются две матрицы  $N_{max1}$  и  $N_{max2}$ , которые моделируют две поверхности трещины. Генератор случайных чисел задает координаты центров неоднородностей рельефа на обеих сторонах трещины  $csx11[i]$ ,  $csy11[i]$ ,  $csx21[i]$ ,  $csy21[i]$ .
7. С использованием генератора случайных чисел программа задает площадь каждой неоднородности на поверхности трещины.
8. Для расчета площади неоднородности на поверхности трещины используем формулу:

$$S_{sum} = \sum_{i=1}^{N_{max1}} S_i + \sum_{i=1}^{N_{max2}} S_i, \quad (1)$$

где  $N_{max1}$  и  $N_{max2}$  – количество неоднородностей рельефа на первой и второй поверхностях трещины;  $S_i$  – площадь поверхности  $i$ -й неоднородности.

9. В связи с тем, что площадь неоднородностей задается случайным образом, программа контролирует суммарно допустимую площадь неоднородностей, которая не должна превышать площадь поверхности трещины и/или определенный процент от площади поверхности трещины.

$$0,5S_{sum} \leq \sum_{i=1}^{N_{max}} S_i, \quad (2)$$

Если условие, определяемое формулой (2), не выполняется, то уменьшается количество неоднородностей.

10. Затем определяем сумму неоднородностей на поверхностях трещины:

$$N_{но} = \min(N_{max1}, N_{ms1}) + \min(N_{max2}, N_{ms2}), \quad (3)$$

где  $N_{max1}$  и  $N_{max2}$  – это количество неоднородностей рельефа заданных генератором случайных чисел на поверхностях трещины.

11. С использованием генератора случайных чисел определяем высоту неоднородностей  $h$ . Высота неоднородностей не может превышать расстояние между трещинами. В данном случае в качестве максимальной высоты неоднородностей задается половина расстояния между поверхностями трещины. Для этого с использованием генератора случайных чисел задается значение в диапазоне от нуля до биссектрисы угла раскрытия трещины.

12. Определяется объем материала, который вытесняется в процессе залечивания трещины:

$$V_{sum} \leq \sum_{i=1}^n S_i \cdot h_i \cdot k, \quad (4)$$

где  $S_i$  – площадь неоднородности;  $h_i$  – высота неоднородности;  $k$  – коэффициент, связанный с формой неоднородности.

13. При определении объема материала, который вытесняется при залечивании трещины, делаем поправку на температуру нагрева образца. Кроме того, при облучении серией лазерных импульсов поверхность материала может плавиться.

14. Учитываем изменение пластических свойств материала при повышении температуры образца.

15. Получаем безразмерные величины, которые пропорциональны энергии, необходимой для залечивания трещины. Каждый модельный эксперимент включает моделирование залечивания тысячи трещин. С использованием полученных данных строим зависимость вероятности залечивания трещин от количества импульсов в серии.

В ходе разработки программы использовали данные, полученные экспериментально, а также теоретически при расчете специфики прогрева образца, облучаемого серией лазерных импульсов.

На рис. 2 показаны зависимости вероятности залечивания трещин от угла раскрытия и от количества импульсов. При построении графиков (и проведении моделирования) было принято, что вероятность залечивания трещины с углом раскрытия  $5^\circ$  при однократном облучении равна 0,5. Зависимость № 1 построена для одного импульса при изменении угла раскрытия трещины. При данных условиях обработки эффективно залечиваются только трещины с углом  $1-3^\circ$ . Зависимость № 2 построена для 5 импульсов. Эффективность залечивания резко возрастает для трещин с углом раскрытия до  $5^\circ$ . Третья зависимость соответствует 10 импульсам и эффективности залечивания трещин с углом раскрытия до  $8-9^\circ$ . На рис. 3 показаны зависимости вероятности залечивания трещин при увеличении количества импульсов до 12 (зависимость № 1) и 15 (зависимость № 2).

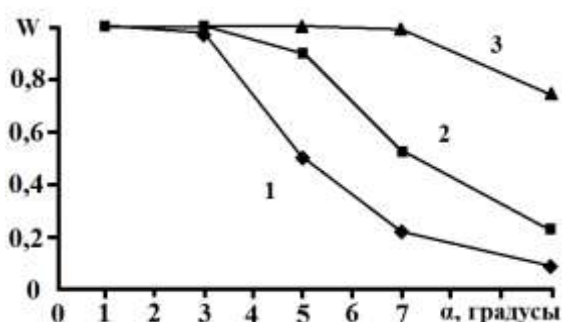


Рис. 2. Зависимости вероятности залечивания трещин от угла раскрытия и от количества импульсов: 1 – при однократном импульсе; 2 – при 5 импульсах; 3 – при 10 импульсах

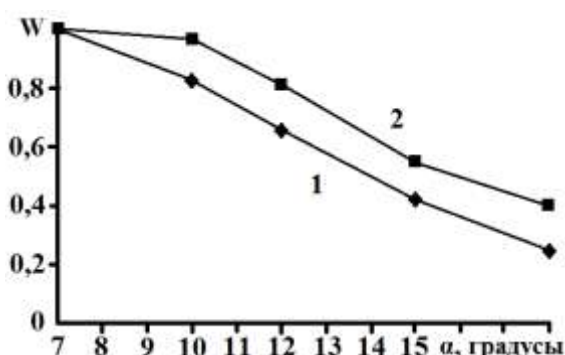


Рис. 3. Зависимости вероятности залечивания трещин от угла раскрытия и от количества импульсов: 1 – при 12 лазерных импульсах; 2 – при 15 импульсах

Из анализа полученных зависимостей следует, что с увеличением количества импульсов вероятность залечивания трещин резко возрастает. Это связано с рядом факторов: облегчается пластическое деформирование при прогреве материала; возрастает вероятность залечивания (повторного залечивания) при повторном сжатии; испаряется поверхностный трещиноватый слой материала; часть материала в поверхностном слое образца плавится (в последнем случае не вполне корректно говорить о залечивании). Для серии из 10 лазерных импульсов вероятность залечивания почти 100 % для трещин с углом раскрытия менее  $7^\circ$ . Для серии из 12 и 15 лазерных импульсов для угла раскрытия  $12^\circ$  залечивается, соответственно, 65 и 82 % трещин.

Можно предположить, что уже при серии из 10–12 импульсов эффективность залечивания трещин фактически перестает расти (если пренебречь исчезновением трещин в расплавленном слое материала). Залечиваются практически все трещины с малым углом раскрытия, ориентированные параллельно поверхности образца, при условии, что в них нет газа. Количество трещин может несколько возрастать после резкого охлаждения материала и возникновения механических напряжений.

Полученные зависимости свидетельствуют о неэффективности проведения селективной лазерной обработки слишком большими сериями импульсов. С одной стороны, при этом достигается «насыщение», и количество залеченных трещин практически перестает воз-

растать. Трещины со слишком большими углами раскрытия, а также ориентированные под значительными углами к поверхности образца, заживать не будут. Кроме того, с увеличением количества трещин в серии значительная часть материала плавится, а в остальной проходят процессы кристаллизации/рекристаллизации, и назвать такое воздействие селективно заживающим трещины уже нельзя.

Полученные результаты находят косвенное экспериментальное подтверждение. В частности, при обработке серий лазерных импульсов аморфно-нанокристаллического металлического сплава 82К3ХСР отмечено резкое (2–3-кратное) возрастание пластических свойств материала при сохранении высокой микротвердости [1–3]. При увеличении серии лазерных импульсов до 12–15 наблюдается формирование оплавленного слоя, а в остальном материале, по данным рентгеноструктурного анализа, начинаются процессы рекристаллизации, что в целом подтверждает результаты компьютерного моделирования.

### ВЫВОДЫ

1. Определены зависимости вероятности заживания трещин, ориентированных параллельно поверхности от угла их раскрытия и количества импульсов. Показано, что с увеличением количества импульсов вероятность заживания трещин резко возрастает, и при серии из 12–15 импульсов для углов раскрытия трещины менее  $10^\circ$  заживает почти 100 % трещин.

2. При увеличении количества импульсов в серии сверх 12–15 эффективность заживания трещин с углами раскрытия менее  $10^\circ$  существенно не возрастает, одновременно возрастает доля расплавленного и рекристаллизованного материала. Лазерная обработка теряет свою селективность. Следовательно, для указанного материала и параметров лазерного излучения оптимальная серия импульсов при частоте 20–50 Гц должна состоять из 8–12 импульсов.

3. Предложенный алгоритм для компьютерного моделирования позволяет определять оптимальные

параметры лазерной обработки, при которых заживание трещин происходит селективно, т. е. не меняя структуру и свойства остального материала.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Финкель В.М.* Физика разрушения, рост трещин в твердых телах. М.: Изд-во «Металлургия», 1970. 376 с.
2. *Сафронов И.С.* Выявление механизмов формирования механических свойств тонкой ленты металлического сплава при импульсной лазерной обработке: дис. ... канд. физ.-мат. наук. В. Новгород, 2013. 190 с.
3. *Ушаков И.В., Сафронов И.С.* Механические характеристики аморфного металлического сплава подвергнутого обработке импульсным лазерным излучением в глубоком вакууме // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2013. Т. 18. Вып. 1. С. 133-134.
4. *Ушаков И.В., Сафронов И.С.* Механические характеристики тонкой ленты многокомпонентного аморфно-нанокристаллического металлического сплава, обработанного серий наносекундных лазерных импульсов // Тяжелое машиностроение. 2012. № 10. С. 6-9.
5. *Абросимова Г.Е.* Эволюция структуры аморфных сплавов // Успехи физических наук. 2011. Т. 181. № 12. С. 1265-1281.
6. *Абросимова Г.Е., Арошин А.С., Зверькова И.И., Гуров А.Ф., Кирьянов Ю.В.* Образование, структура и микротвердость нанокристаллических сплавов Ni-Mo-B // Физика твердого тела. 1998. Т. 40. № 1. С. 10-16.
7. *Suk J. Kim, Kyung-Sook Jeon, Chun I.S., Kim C.K., Yoon C.S.* Magnetic properties and crystallization of  $\text{Co}_{68}\text{Mn}_{10}\text{B}_{10}\text{Si}_{12}$  and  $\text{Co}_{58}\text{Mn}_{20}\text{B}_{10}\text{Si}_{12}$  amorphous alloys // Elsevier science. Journal of alloys and compounds. 2005. V. 386. P. 276-282.
8. *Gibson M.A., Delamore G.W.* Crystal morphologies in iron- and cobalt-based metallic glasses // Journal of crystal growth. 1989. V. 96. P. 763-768.
9. *Kalabushkin A.E., Ushakov I.V., Polikarpov V.M., Titovets Y.F.* Revealing of qualitative correlation between mechanical properties and structure of amorphous-nanocrystalline metallic alloy 82K3XCP by microindentation on substrates and X-ray powder diffraction // Proc. SPIE. Proceedings of the international society for optical engineering. 2007. V. 6597. P. 65970P1-65970P6.
10. *Ушаков И.В., Сафронов И.С.* Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014610797 «Компьютерное моделирование неоднородностей рельефа поверхностей трещин в наноструктурном материале «COMP\_SIM\_RELIEF\_SURFACE\_CRACKS». Заявка № 2013660756. Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 17 января 2014 г.

Поступила в редакцию 1 февраля 2016 г.

UDC 620.178.15

DOI: 10.20310/1810-0198-2016-21-1-630-634

## MODELING OF HEALING PROCESS OF CRACKS IN NANOSTRUCTURED METAL ALLOY PROCESSED BY A SERIES OF LASER IMPULSES

© I.V. Ushakov, A.Y. Batomunkuev

The main model parameters of cracks healing in thin films of amorphous-nanocrystalline metal alloys under the action of pulsed laser radiation are discussed. The proposed model adequately describes the healing process of little angle cracks oriented parallel to the sample surface. After exposure to 8–12 impulses more than 90 % of the cracks described in the model are healed. It is shown that increasing the number of pulses more than for 12–15 without increasing the effectiveness of the heal leads to melting of the material and starting the process of recrystallization. The proposed model allows determine the optimal parameters of selective laser treatment.

*Key words:* computer modeling; cracks healing; laser healing of defects; laser strengthening of material.

## REFERENCES

1. Finkel' V.M. *Fizika razrusheniya, rost treshchin v tverdykh telakh*. Moscow, Metallurgiya Publ., 1970. 376 p.
2. Safronov I.S. *Vyyavlenie mekhanizmov formirovaniya mekhanicheskikh svoystv tonkoy lenty metallicheskogo splava pri impul'snoy lazernoy obrabotke*. Dissertatsiya ... kandidata fiziko-matematicheskikh nauk, Velikiy Novgorod, 2013. 190 p.
3. Ushakov I.V., Safronov I.S. Mekhanicheskie kharakteristiki amorfno metallicheskogo splava podvergnutogo obrabotke impul'snym lazernym izlucheniem v glubokom vakuume. *Vestnik Tambovskogo universiteta. Seriya Estestvennye i tekhnicheskie nauki – Tambov University Reports. Series: Natural and Technical Sciences*, Tambov, 2013, vol. 18, no. 1, pp. 133-134.
4. Ushakov I.V., Safronov I.S. Mekhanicheskie kharakteristiki tonkoy lenty mnogokomponentnogo amorfno-nanokristallicheskogo metallicheskogo splava, obrabotannogo serией nanosekundnykh lazernykh impul'sov. *Tyazheloe mashinostroenie*, 2012, no. 10, pp. 6-9.
5. Abrosimova G.E. Evolyutsiya struktury amorfnykh splavov. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2011, vol. 181, no. 12, pp. 1265-1281.
6. Abrosimova G.E., Aronin A.S., Zver'kova I.I., Gurov A.F., Kir'yanov Yu.V. Obrazovanie, struktura i mikrotverdost' nanokristallicheskikh splavov Ni-Mo-B. *Fizika tverdogo tela*, 1998, vol. 40, no. 1, pp. 10-16.
7. Suk J. Kim, Kyung-Sook Jeon, Chun I.S., Kim C.K., Yoon C.S. Magnetic properties and crystallization of Co<sub>68</sub>Mn<sub>10</sub>B<sub>10</sub>Si<sub>12</sub> and Co<sub>58</sub>Mn<sub>20</sub>B<sub>10</sub>Si<sub>12</sub> amorphous alloys. *Elsevier science. Journal of alloys and compounds*, 2005, vol. 386, pp. 276-282.
8. Gibson M.A., Delamore G.W. Crystal morphologies in iron- and cobalt-based metallic glasses. *Journal of crystal growth*, 1989, vol. 96, pp. 763-768.
9. Kalabushkin A.E., Ushakov I.V., Polikarpov V.M., Titovets Y.F. Revealing of qualitative correlation between mechanical properties and structure of amorphous-nanocrystalline metallic alloy 82K3XCP by microindentation on substrates and X-ray powder diffraction. *Proc. SPIE. Proceedings of the international society for optical engineering*, 2007, vol. 6597, pp. 65970P1-65970P6.
10. Ushakov I.V., Safronov I.S. *State registration certificate of program for EVM № 2014610797 «Komp'yuternoe modelirovanie neodnorodnostey rel'efa poverkhnostey treshchin v nanostrukturnom materiale "COMP\_SIM\_RELIEF\_SURFA-CE\_CRACKS"». Requirement № 2013660756. Registered in register of programs for EVM 17 January 2014.*

Received 1 February 2016

Ушаков Иван Владимирович, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Российская Федерация, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры физики; Тамбовский государственный технический университет, г. Тамбов, Российская Федерация, профессор кафедры «Автоматика и компьютерные системы управления», e-mail: ushakoviv@mail.ru

Ushakov Ivan Vladimirovich, National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russian Federation, Doctor of Technics, Associate Professor, Professor of Physics Department; Tambov State Technical University, Tambov, Russian Federation, Professor of "Automatics and Computer Systems of Control" Department, e-mail: ushakoviv@mail.ru

Батомункуев Амагалан Юрьевич, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Российская Федерация, аспирант, кафедра физики, e-mail: amgalan-ngu-621@yandex.ru

Batomunkuev Amagalan Yurevich, National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russian Federation, Post-graduate Student, Physics Department, e-mail: amgalan-ngu-621@yandex.ru