

Энергетический спектр сигналов акустической эмиссии в сложных средах

В.В. Марасанов*, А.А. Шарко†

Херсонский национальный технический университет, ул. Бериславское Шоссе, 24, 73008 Херсон, Украина

(Получено 12.04.2017; опубликовано online 27.07.2017)

Предложена модель энергетического спектра сигналов акустической эмиссии в сложных структурах с внутренними степенями свободы. На основе вычислительного эксперимента данных рентгеноструктурного анализа выполнен квантовомеханический расчет применимости модели сложной среды, инициирующей возникновения сигналов акустической эмиссии. Установлена трансляционная и ротационная инвариантность энергии в энергетическом спектре сигналов акустической эмиссии сред со сложной структурой. Представленная модель энергетического спектра сигналов акустической эмиссии позволяет определить раздельный вклад низкочастотной и высокочастотной составляющих энергетического спектра сигналов акустической эмиссии в средах сложной структуры.

Ключевые слова: Спектр, Акустическая эмиссия, Силовые константы, Вычислительный эксперимент.

DOI: 10.21272/jnep.9(4).04024

PACS numbers: 43.40.Le, 46.70. – p 06.60.Ei

1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальность изучения энергетического спектра сигналов акустической эмиссии (АЭ) наноразмерных объектов объясняется важностью решения вопросов о характеристиках распространения акустических колебаний, предшествующих разрушению материалов. Возникновение сигналов АЭ и обнаружение развивающихся дефектов порождается стохастическими процессами, которые недоступны непосредственному наблюдению и фиксируются только их внешние проявления.

Характерной особенностью энергетического спектра АЭ сигнала является двойственный механизм образования сигналов АЭ: дискретный характер изменения структуры среды, инициирующей возникновение сигналов АЭ, [1] и непрерывное распространение акустических волн [2].

В [3] представлен математический формализм описания энергетического спектра в простой среде, инициирующей сигналы АЭ, в котором проблема спектрального анализа и синтеза сигналов АЭ решается с помощью преобразований Фурье. Установлена зависимость спектра акустических колебаний от параметров исследуемой структуры. Однако модель простой структуры сплошной среды, инициирующей возникновение сигналов АЭ, не позволяет выделять отдельно низкочастотную и высокочастотную часть спектра АЭ сигнала. Для этого следует перейти к рассмотрению более сложных структур.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА АЭ В СЛОЖНЫХ СТРУКТУРАХ

Использование классической модели сплошной среды для изучения энергетического спектра АЭ в средах микроструктуры наталкивается на неопределенность, связанную с существованием внутренних движений структурных составляющих среды. Эти положения являются побудительным мотивом к изу-

чению энергетического спектра предвестников возникновения сигналов АЭ в средах со сложной внутренней структурой.

В основу моделирования энергетического спектра сигналов АЭ в сложных структурах положено рассмотрение одномерной модели простой структуры в виде линейной цепочки точечных масс, соединённых упругими связями [4, 5].

Функция Лагранжа в такой модели представляет собой закон сохранения энергии [1]:

$$L = \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}^2(n,t) - \frac{1}{2} \sum_{nn'} \Phi(n,n') u(n,t) u(n',t) + \sum_n q(n,t) u(n,t) \quad (1)$$

где n, n' – номера взаимодействующих частиц, $\Phi(n, n')$ – силовые константы, m – масса частиц в цепочке, $u(n, t)$ – смещение, $q(n, t)$ – внешние силы.

С учетом функции Лагранжа, уравнение колебательного движения частиц, в линейной цепочке точечных масс принимает вид:

$$m\ddot{u}(n,t) + \sum_{n'} \Phi(n,n') u(n',t) = q(n,t) \quad (2)$$

Колебания атомов в кристаллической решетке не инициируют распространяющуюся волну. Для ее возникновения необходимы внешние возмущения, вызванные изменениями структуры, движением дислокаций, фазовыми превращениями и т.д.

Простейшим приближением сложной структуры, инициирующей возникновение сигналов АЭ, может служить двухатомная ячейка, состоящая из двух частиц разной массы, соединённых упругими связями. Ячейка рассматривается как конструкция, функционирование которой обеспечивается ее внутренним устройством и условиями сопряженности с окружением (рис. 1).

* volodymyr.marasanov@mail.ru

† sharko_artem@ukr.net

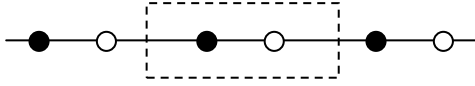


Рис. 1 – Модель элементарной ячейки дискретной сложной структуры

Отличие модели сложной структуры от одномерной модели простой структуры в виде точечных масс заключается в том, что в узлах пространственной решетки располагаются не точечные материальные частицы, а тела конечных размеров, имеющие внутренние степени свободы (зерна, домены, фуллерены, нанотрубки, молекулярные кластеры).

Силловые константы, определяющие характеристики упругих связей, при возникновении сигналов АЭ должны удовлетворять требованиям инвариантности энергии, относительно трансляции.

Уравнение движения частиц внутри n -ой ячейки имеет вид [1]:

$$m_j \ddot{w}(n, j) + \sum_{n', j'} \Phi(n - n', j, j') w(n', j') = f(n, j) \quad (3)$$

где n – номер ячейки, m_j ($j = 1, 2$) – массы частиц в ячейке, $w(n, j)$ – смещение j -й частицы в n -й ячейке, $\Phi(n - n', j, j')$ – силловые константы, $f(n, j)$ – внешняя сила, определяющая возникновение сигналов АЭ.

Функция Лагранжа в двухатомной ячейке выражается уравнением:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{nj} m_j \dot{w}^2(n, j) - \frac{1}{2} \sum_{nm'j'j''} \Phi(n - n', j, j') \cdot w(n, j) w(n', j') + \sum_{nj} f(n, j) w(n, j) \quad (4)$$

В основу описания предвестников возникновения сигналов АЭ положены дискретные представления механики сплошной среды.

В модели сложной структуры силловые константы модели должны удовлетворять условиям симметрии:

$$\Phi(n - n', j, j') = \Phi(n' - n, j', j), \quad (5)$$

$$w(n, j) \rightarrow w(n, j) + w_0 \quad (6)$$

где w_0 – произвольная постоянная.

Инвариантность энергии относительно трансляции при распространении АЭ сигнала позволяет заменить движение атомов в двухатомной ячейке движением – центра масс ячейки.

Для этого в модели среды, инициирующей возникновение сигналов АЭ, следует ввести переменные:

– относительное смещение частиц внутри ячейки:

$$\eta(n) = \frac{m_1 \xi_1 w(n, 1) + m_2 \xi_2 w(n, 2)}{I} \quad (8)$$

– смещение центра масс ячейки:

$$u(n) = \frac{1}{m} [m_1 w(n, 1) + m_2 w(n, 2)] \quad (7)$$

здесь m_1 и m_2 – массы атомов в ячейке, I – момент

инерции ячейки, ξ_1 и ξ_2 – координаты частиц в ячейке относительно координаты центра масс, $m = m_1 + m_2$, $I = m_1 \xi_1^2 + m_2 \xi_2^2$.

Обозначив через $q(n)$ и $\mu(n)$ обобщенные силы, соответствующие $u(n)$ и $\eta(n)$, получим уравнения движения всей ячейки в среде, инициирующей распространение АЭ сигнала:

$$m \dot{u}(n) + \sum_{n'} \Phi^{00}(n - n') u(n') + \sum_{n'} \Phi^{01}(n - n') \eta(n') = q(n), \quad (9)$$

$$I \dot{\eta}(n) + \sum_{n'} \Phi^{10}(n - n') u(n') + \sum_{n'} \Phi^{11}(n - n') \eta(n') = \mu(n). \quad (10)$$

Здесь матрица $\Phi^{ss'}(n)(s, s' = 0, 1)$ по координатно выражается через силловые константы $\Phi(n, j, j')$ предвестников АЭ сигнала.

Представленные в такой форме уравнения (9) (10) энергетического спектра сигналов АЭ, учитывают также требования трансляционной инвариантности энергии относительно вращения ячеек среды (рис. 2).

$$u(x) \rightarrow u(x) + ax \quad (11)$$

$$\eta(x) \rightarrow \eta(x) + a \quad (12)$$

где a – константа.

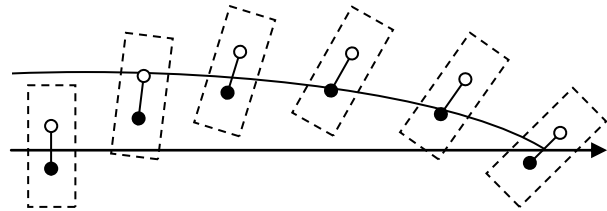


Рис. 2 – Кинематическая схема силового взаимодействия частиц сложной структуры

Рассматривая координату ξ как параметр при переходе к квазиконтинуальному представлению, можно заменить все функции дискретного аргумента n их x - и k - представлениями. Соответствующие выражения для лагранжиана в x - и k - представлениях получаются заменой сумм на интегралы.

Возможный механизм образования внутренних напряжений в материалах, инициирующий возникновение сигналов АЭ, может быть описан с помощью эволюционных представлений теории дислокаций. При деформации металла изменяется расстояние между атомами под действием внешних сил, линии и плоскости, проходящие через атомы, искривляются, за счёт чего искажается кристаллическая решетка. При устранении внешних сил атомы вновь занимают свои места в кристаллической решетке и материал полностью заполняет занимаемый им объем.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Поскольку экспериментальное подтверждение применимости предложенной модели энергетическо-

го спектра предвестников возникновения сигналов АЭ, представленной уравнениями (9) (10), на атомарном уровне выполнить невозможно, оценка ее основных положений произведена на основе вычислительного эксперимента путем обработки данных рентгеноструктурного анализа [6].

Общность эмиссионных процессов характеристического рентгеновского излучения и акустической эмиссии заключается в том, что эмиссия рентгеновского излучения обуславливается возбуждением внутренних оболочек атома внешними электронами, в то время как инициирование сигналов АЭ обуславливается структурными изменениями.

Квантовомеханический расчет для двухатомной ячейки показывает, что отталкивание на близких расстояниях определяется антисимметричностью волновой функции относительно перестановки электронов. При этом сила отталкивания экспоненциально убывает с расстоянием.

В основе систематики заполнения электронных состояний в атомах лежит принцип Паули, согласно которому в атоме каждый электрон обладает своим набором квантовых чисел, отличным от набора этих чисел для любого другого электрона. Электроны, занимающие совокупность состояний с одинаковым значением главного квантового числа, образуют электронную оболочку:

| | |
|-------------------------|-------------------------|
| главное квантовое число | 1 2 3 4 5 6 7 ... |
| символы оболочек | <i>K L M N O P Q...</i> |

Размеры атомов определяются размерами их электронных оболочек.

В каждой оболочке электроны располагаются по подгруппам:

| | |
|----------|----------------------|
| <i>l</i> | 0 1 2 3 4 ... |
| терм | <i>s p d f g ...</i> |

Характеристическое рентгеновское излучение возникает в результате вырывание электрона с одной из близких к ядру оболочек атома. На освобожденное место переходит электрон из более удаленных от ядра оболочек, с большими значениями главного квантового числа. Это приводит к возникновению рентгеновского фотона с частотой:

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h} \tag{13}$$

где E_m и E_n – это энергия электрона на соседних оболочках атома, h – постоянная Планка.

Механизм возникновения линейчатого спектра характеристического рентгеновского излучения может быть описан на основе электронных конфигураций. Феноменологически среду возникновения сигналов АЭ на атомном уровне можно представить взаимодействием атомов Fe.

Электронная конфигурация атомов железа представлена на рис. 3.

В состояниях электронов в атоме вместо обозначений $m_s = \pm \frac{1}{2}$ используются символы: $\uparrow\downarrow$.

Электроны заполняют орбитали в порядке повышения уровня энергии (рис. 4).

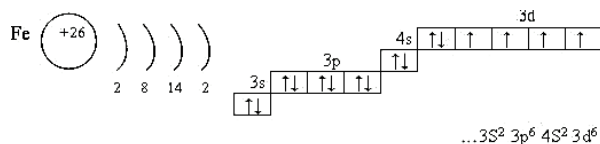


Рис. 3 – Электронная конфигурация атомов железа [6]

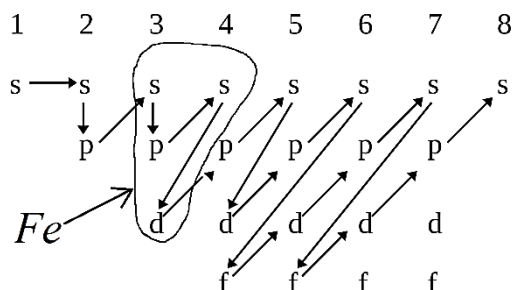


Рис. 4 – Схема застройки электронных состояний

Заполнение подгрупп отражается в рентгеновских спектрах атомов. При выбивании электрона из *K*-оболочки становятся возможными переходы в эту оболочку из *L*-, *M*- и других оболочек с последующими электронными переходами на освобождающиеся места в этих оболочках, пока этот процесс не закончится полным перераспределением электронов по состояниям.

Спектральные линии, обусловленные переходами электронов в *K*-, *L*-, *M*- оболочки атома, образуют *K*-, *L*-, *M*- серии характеристического спектра. Линии каждой серии обозначаются греческими буквами, с подстрочными индексами, расположенными в порядке убывания интенсивности спектральных линий. Буква *K* обозначает самую коротковолновую линию в спектре. Линии в *K*-серии являются дублетами.

Для атомов железа при напряжении $U = 7,1$ кВ значения этих величин в *K*-серии равны:

| λ , нм | | | |
|----------------|----------------|---------------|---------------|
| $K_{\alpha 1}$ | $K_{\alpha 2}$ | $K_{\beta 1}$ | $K_{\beta 2}$ |
| 0,1932 | 0,1936 | 0,1753 | 0,1740 |

Для частот, при которых энергия рентгеновских квантов становится достаточной для освобождения из атома электрона с *K*-, *L*-, *M*- оболочек, справедливо соотношение:

$$\frac{mv^2}{2} = h\nu_1 - h\nu_2 \tag{14}$$

где m – масса электрона, v – его скорость, ν_1 и ν_2 частоты рентгеновских квантов α и β в *K*-серии.

Отсюда:

$$v = \sqrt{\frac{2h(\nu_1 - \nu_2)}{m}} \tag{15}$$

или с учетом что $v = c / \lambda$ имеем:

$$v = \sqrt{\frac{2hc(\lambda_2 - \lambda_1)}{m\lambda_1\lambda_2}} \tag{16}$$

Связь частоты спектральных линий с атомным

номером элемента дается законом Мозли:

$$\sqrt{\nu} = A(Z - B) \quad (17)$$

где A – постоянная, зависящая от квантовых чисел оболочек между которыми совершаются переходы; B – постоянная экранирования; Z – порядковый номер элемента.

Графическое представление зависимости частоты рентгеновского излучения от атомного номера химического элемента для K и L серий имеет вид [6] (рис. 5).

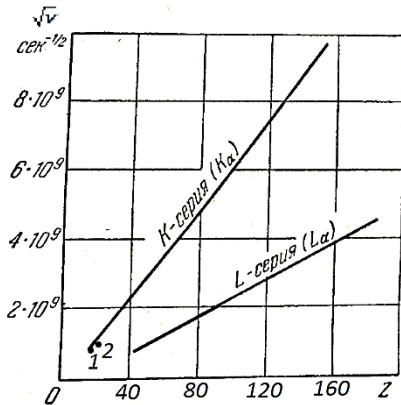


Рис. 5 – Зависимость частоты рентгеновского излучения от атомного номера химического элемента

Используя данные спектра атомов железа для K -серии и пользуясь формулой $\nu = c / \lambda$, можно определить частоты спектральных линий и по ним вычислить атомный номер элемента. Результаты такого вычислительного эксперимента на графиках (рис. 5) обозначены точками 1 и 2. Наблюдаемая в эксперименте разность абсцисс для одного и того же атома Fe объясняется тем, что внутренние электроны находятся в основном под воздействием поля ядра и электронов, находящихся ближе к ядру, в то время как внешние-испытывают экранирующее действие. Экранирование для K -серии будет слабее чем для L -серии, т.к. частичное участие в экранировании K оболочки принимают и электроны L оболочки.

Результаты расчетов по формуле (16) дали значения $v_1 = 68.2 \cdot 10^4$ м/с, $v_2 = 136.2 \cdot 10^4$ м/с. Разница этих значений обусловлена переходом электронов в другие оболочки. Кроме этого, поскольку $v_1 < v_2$, то изменение размеров пространственной решетки происходит в сторону ее сокращения, что является экспериментальным подтверждением предложенной модели энергетического спектра сигналов АЭ в сложной среде.

При распространении АЭ сигналов, отмеченное свойство трансляционной инвариантности энергии относительно вращения ячеек среды, проявляется в существовании продольных, сдвиговых и спиновых колебаний при образовании структурных дефектов и в количественном перераспределении энергии от предвестников сигналов акустической эмиссии.

Частотным пределом, который определяет применимость аппарата дискретных свойств материалов к непрерывным моделям энергетического спектра сигналов АЭ, является величина дисперсии [3].

В дисперсионных кривых волновых процессов, связанных с движением ансамбля частиц, возбуждаются три волны: одна продольная 1, с направлением поляризации вдоль смещения и две поперечные 2 и 3 с направлением поляризации вдоль двух взаимно перпендикулярных векторов [2] (рис. 6).

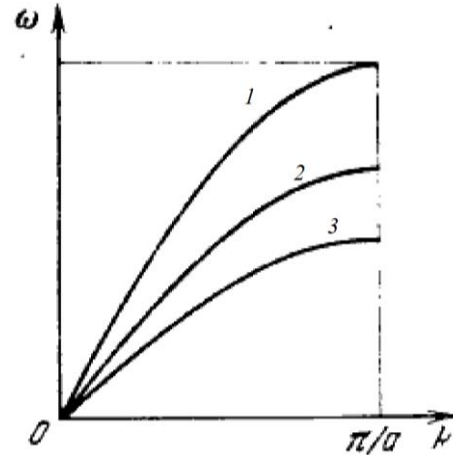


Рис. 6 – Дисперсионные кривые распространения АЭ сигналов в сложной структуре

Эти кривые особенно сильно различаются на больших длинах волн. На низких частотах при достаточно малых значениях волнового числа k происходят колебания центра масс, т.е. ячейка колеблется как единое целое. Внутри ячейки движения атомов относительно центра масс происходят на высокой частоте.

В среде, не обладающей дисперсией, скорость распространения волнового пакета не зависит от частоты и волна распространяется без искажения. В средах, обладающих дисперсией, волновой пакет искажается и высокочастотные составляющие, формирующие фронт сигнала, распространяются медленнее низкочастотных, формирующих вершину импульсов АЭ.

В случае, когда радиус дальнего действия АЭ сигналов много больше размеров ячейки, можно перейти от дискретной к непрерывной модели среды сложной структуры. Такой же переход возможен и для большего числа частиц в ячейке.

Сжатие АЭ сигнала во времени приводит к расширению его спектра, в то время как сдвиг АЭ сигнала во времени, вызывает фазовый сдвиг спектра пропорциональный частоте.

ВЫВОДЫ

В представленной модели энергетического спектра сигналов АЭ в сложных структурах установлена и трансляционная и ротационная инвариантность энергии относительно вращения ячеек среды при образовании предвестников АЭ.

В модели энергетического спектра АЭ сред со сложной внутренней структурой колебания частиц внутри ячейки характеризуют высокочастотную составляющую АЭ сигнала, в то время как колебания центра масс – его низкочастотную составляющую.

Energy Spectrum of Acoustic Emission Signals in Complex Media

V.V. Marasanov, A.A. Sharko

Kherson National Technical University, 24, Berislavskoe Highway, 73008 Kherson, Ukraine

A model of the energy spectrum of acoustic emission signals in complex structures with internal degrees of freedom is proposed. On the basis of the computational experiment of X-ray diffraction data, a quantum mechanical calculation of the applicability of the model of a complex medium initiating the formation of acoustic emission signals was performed. The translational and rotational invariance of energy in the energy spectrum of acoustic emission signals of media with a complex structure is established. The presented model of the energy spectrum of acoustic emission signals makes it possible to determine the separate contribution of the low-frequency and high-frequency components of the energy spectrum of acoustic emission signals in media of complex structure.

Keywords: Spectrum, Acoustic emission, Power constants, Computational experiment.

Енергетичний спектр сигналів акустичної емісії в складних середовищах

В.В. Марасанов, А.А. Шарко

Херсонський національний технічний університет, вул. Бериславське шосе, 24, 73008 Херсон, Україна

Запропоновано модель енергетичного спектру сигналів акустичної емісії в складних структурах з внутрішніми ступенями свободи. На основі обчислювального експерименту даних рентгеноструктурного аналізу виконаний квантовомеханічний розрахунок застосування моделі складного середовища, що ініціює виникнення сигналів акустичної емісії. Встановлено, що трансляційна і ротаційна інваріантність енергії в енергетичному спектрі сигналів акустичної емісії середовищ складною структурою. Представлена модель енергетичного спектру сигналів акустичної емісії дозволяє визначити роздільний внесок низькочастотної і високочастотної складових енергетичного спектру сигналів акустичної емісії в середовищах складної структури.

Ключові слова: Спектр, Акустична емісія, Силкові константи, Обчислювальний експеримент.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ:

1. I.V. Vojko, A.M. Grischuk, *J. Nano- Electron Phys.* **8** No 4, 04001 (2016).
2. L.Y. Kozak, *Physico-Chemical Mechanics of Materials* No 1, 15 (2016).
3. V. Marasanov, A. Sharko, *J. Nano- Electron Phys.* **9** No 2, 02012 (2017).
4. В.В. Марасанов, А.А. Шарко, *Наукові нотатки* **57**, 115 (2017) (V.V. Marasanov, A.A. Sharko, *Naukovi notatky* **57**, 115 (2017)) [Ukrainian].
5. V. Marasanov, A. Sharko, *International Fronter Science Letters* **10**, 37 (2016).
6. В.М. Чубаров, *Аналитика и контроль* **15** No 3, 339 (2011) (V.M. Chubarov, *Analitika i kontrol* **15** No 3, 339 (2011)) [Russian].