



(12)

BREVET DE INVENȚIE

(21) Nr. cerere: **a 2009 01037**

(22) Data de depozit: **11.12.2009**

(45) Data publicării mențiunii acordării brevetului: **30.12.2013** BOPI nr. **12/2013**

(41) Data publicării cererii:
29.07.2011 BOPI nr. **7/2011**

(73) Titular:
• **UNIVERSITATEA "DUNĂREA DE JOS"**
DIN GALAȚI, STR.DOMNEASCĂ NR.47,
GALAȚI, GL, RO

(72) Inventatori:
• **BANU MIHAELA, STR.SATURN NR.10,**
BL.B 2, SC.3, AP.28, GALAȚI, GL, RO;
• **BURUIANĂ ALICE NICOLETA,**
STR.SLĂNIC NR.1, BL.4 G, AP.36, GALAȚI,
GL, RO;

• **STAN FELICIA, STR.CĂLUGĂRENI NR.11,**
BL.L 1 A, SC.2, PARTER, AP.21, GALAȚI,
GL, RO;

• **MARINESCU VASILICĂ,**
STR.GEORGE COȘBUC NR.37, BL.C 20,
AP.35, GALAȚI, GL, RO;

• **EPUREANU ALEXANDRU,**
STR.ALEXANDRU LĂPUȘNEANU NR.16,
BL.B 6, AP.16, GALAȚI, GL, RO

(56) Documente din stadiul tehnicii:
RO 123274 B1; US 20040060620 A1

(54) **METODĂ PENTRU ÎMBUNĂTĂȚIREA CARACTERISTICILOR
MECANICE ALE MATERIALELOR METALICE
POLICRISTALINE NANOSTRUCTURATE, PRIN DEFORMARE
PLASTICĂ SEVERĂ**



RO 126481 B1

1 Invenția se referă la o metodă de îmbunătățire a caracteristicilor mecanice finale ale
materialelor policristaline care se nanostructurează prin deformare plastică severă, cum ar
3 fi spre exemplu modulul de forfecare, prin intermediul căruia se evaluează plasticitatea mate-
rialului.

5 Metoda poate fi aplicată la acele procese de nanostructurare prin deformare plastică
severă la care direcția după care are loc deformarea plastică a materialului poate fi modi-
7 ficată în cursul procesului, cum ar fi spre exemplu metoda de forfecare multidirecțională
controlată.

9 Se cunoaște faptul că nanostructurarea metalelor are ca efect diminuarea mărimii
grăunților cristalini. În funcție de nivelul de diminuare, caracteristicile mecanice ale mate-
11 rialelor metalice se modifică în sensul creșterii rezistenței la tracțiune a materialului sau
creșterii plasticității acestuia. În prezent, modificarea caracteristicilor mecanice este un
13 rezultat natural al procesului de nanostructurare prin deformare plastică severă, fiind obținut
fără niciun fel de intervenție în procesul de nanostructurare, nici în ceea ce privește carac-
15 teristica mecanică ce se modifică prin nanostructurare și nici în ceea ce privește nivelul
acestei modificări.

17 Privitor la metodele de nanostructurare prin deformare plastică severă, o metodă
recent apărută este aceea bazată pe forfecare multidirecțională controlată, la care cine-
19 matica procesului de deformare plastică este controlată numeric și permite schimbarea
permanentă a direcției de forfecare.

21 Unul dintre dezavantajele actualelor metode de nanostructurare prin deformare
plastică severă este acela că nu se ține cont de legătura ce există între caracteristicile
23 structurii cristaline a materialului, starea de tensiune la care acesta este supus în timpul
procesului de nanostructurare, direcția după care are loc deformarea plastică, pe de o parte,
25 și, pe de altă parte, valorile finale ale caracteristicilor mecanice ale materialului nanostructurat.

 O metodă de nanostructurare care realizează un control al nanostructurării este
27 prezentată în documentul **RO123274 B1**, care prezintă o metodă pentru nanostructurarea
materialelor prin deformare plastică severă, conform căreia, în scopul realizării unei
29 nanostructurări uniforme, cu grad mare de rafinare a grăunților cristalini ai materialului,
deformarea plastică are loc în una sau mai multe secțiuni ale semifabricatului, prin forfecare
31 perpendiculară pe axa semifabricatului după o direcție, cu o mărime și cu o viteză de
deformare ce se modifică permanent de-a lungul unei traiectorii programate, asociată cu
33 comprimarea axială severă a semifabricatului și cu modificarea permanentă a secțiunii de
forfecare, urmare a deplasării axiale repetate a semifabricatului pentru nanostructurare
35 completă și uniformă, până la nanostructurarea acestuia pe toată lungimea.

 Problema tehnică pe care o rezolvă invenția constă în stabilirea unor faze de control
37 al nanostructurării prin deformare plastică severă a unui material metalic în sensul
îmbunătățirii caracteristicilor mecanice, prin care să se poată asigura utilizarea mai completă
39 a capacității materialului de a-și îmbunătăți prin nanostructurare anumite proprietăți
mecanice, cum ar fi de exemplu modulul de elasticitate, modulul de forfecare sau rezistență
41 la rupere, și anume acele proprietăți care corespund nevoilor tehnologice ori funcționale,
specifice unui anumit caz concret.

43 Metoda pentru îmbunătățirea caracteristicilor mecanice ale materialelor metalice
policristaline nanostructurate prin deformare plastică severă, conform invenției, rezolvă
45 această problemă tehnică, prin aceea că este realizată prin controlul distribuției dislocațiilor,
prin modificarea permanentă a direcției după care are loc deformarea plastică severă, dis-
47 tribuția dislocațiilor bazându-se pe controlul densității de dislocații care, la rândul ei, se obține
printr-un anumit patern al deplasării și intersecției dislocațiilor, patern care în continuare este

RO 126481 B1

controlat prin modificarea după program a traiectoriei liniei de forfecare a materialului, program stabilit de operatorul instalației de nanostructurare și obținut printr-un model biomimetic ce determină succesiunea de secvențe pe care dislocațiile ar trebui să o urmeze astfel încât să se obțină densitatea de dislocații necesară, a cărei valoare a fost în prealabil determinată prin simulări bazate pe modelare utilizând dinamică moleculară și identificare cu modele ARMA.	1 3 5
Invenția prezintă următoarele avantaje:	7
- asigură în permanență folosirea completă a capacității materialelor de îmbunătățire prin nanostructurare a caracteristicilor lor mecanice;	9
- se poate aplica la toate instalațiile de nanostructurare unde starea de tensiuni și deformații la care este supus materialul în timpul nanostructurării poate fi modificată, atât în ceea ce privește mărimea, cât și direcția.	11
Invenția este prezentată în continuare printr-un exemplu de aplicare a invenției, în legătură și cu fig. 1...5, care reprezintă:	13
- fig. 1a, secțiune longitudinală prin dispozitivul de nanostructurare de aplicare a metodei;	15
- fig. 1b, traiectoria pe care o are orice punct material aparținând semifabricatului și care se află în zona de nanostructurare;	17
- fig. 2, algoritmul de aplicare a metodei de nanostructurare conform invenției;	19
- fig. 3, funcția de formă a energiei necesare tranziției de la o stare la alta;	
- fig. 4, analogia dintre traiectoria dislocațiilor la nanostructurarea cuprului, (a) și traiectoria de deformare a proteinei CI2 (inhibitor chimostripsina) la 225°C, (b);	21
- fig. 5, evoluția energiei libere în funcție de densitatea de dislocații.	23
În fig. 1a, reprezentând dispozitivul de nanostructurare, se prezintă un semifabricat 1, supus nanostructurării în două semimatrițe de deformare 2, 3.	25
În fig. 2, prezentând algoritmul de aplicare a metodei, s-au folosit notațiile:	
G_1 - modulul de forfecare inițial al materialului înainte de nanostructurare, G_F - modulul de forfecare final al materialului după nanostructurare, δ_D - densitatea de dislocații μm^{-2} , N - funcția de forma pentru energia liberă, $F_{1,2}$ - forțele aplicate materialului supus nanostructurării în procesul de deformare plastică la rece prezentat în fig. 1, s - avansul semifabricatului în procesul prezentat în fig. 1a, v - viteza de deplasare a semimatriței 3 față de semimatrița 2.	27 29
Coordonatele traiectoriei de deformare sunt cele corespunzătoare traiectoriei pe care o urmează orice punct material aparținând semifabricatului și care se află în zona de nanostructurare, așa cum acest lucru este exemplificat în figura 1 b;	31 33
În fig. 3, prezentând funcția de formă a energiei necesare tranziției de la o stare la alta, notațiile sunt: A - traiectoria dislocației la energie de activare minimă la un grad de deformare plastică normală; N - traiectoria dislocației la energie de activare mare, corespunzător unui grad de deformare mare (structură ordonată).	35 37 39
Aceste funcții de formă se obțin la anumite succesiuni de pliere - depliere ale proteinei CI2. Astfel, prin analogie între traiectoria urmată de un reziduu aparținând unei proteine și atomii dintr-un plan transversal al unui canal de dislocație, se alege o funcție de formă corespunzătoare acelor secvențe de pliere - depliere care prin cumulare duc la o energie echivalentă cu ΔG_D , unde: a) este traiectoria unei dislocații obținută pentru Cu, prin simulare cu dinamică moleculară în următoarele condiții: modul de forfecare inițial $G_1 = 42$ GPa, coeficientul lui Poisson $\nu = 0,347$, vectorul Burger $b = 0,256$ nm, raza de indentare $r_i = 50$ nm, modulul de elasticitate longitudinal $E = 123$ GPa; numărul de atomi folosiți în simulare 149, într-un volum reprezentativ de $6.9 \times 6.9 \mu\text{m}$ cu un increment de timp de 0,5-0,6ns și o tensiune	41 43 45 47

1 tangențială de forfecare $\tau_{max}=10,7\text{GPa}$, temperatura fiind de 225°C , iar c) este traiectoria prin
 care proteina CI2 se depliază (starea N - nativă este pliata în care energia liberă este maxi-
 3 mă, iar starea D - denaturată în care energia liberă este minimă și corespunde cu starea de
 entropie minimă, adică starea amorfă).

5 În fig. 5, prezentând evoluția energiei libere în funcție de densitatea de dislocații, se
 observă că atunci când densitatea de dislocații crește, se ajunge la o valoare critică, ρ_{crit} ,
 7 care verifică egalitatea dintre energia liberă a dislocațiilor și energia liberă corespunzătoare
 stării amorse. Această stare corespunde superplasticității, când deformarea în continuare se
 9 bazează pe alunecarea atomilor unii față de ceilalți.

11 Procesul de nanostructurare a materialelor policristaline la care se exemplifică
 aplicarea metodei este acela bazat pe forfecarea multidirecțională controlată a materialului,
 a cărui schemă este prezentată în fig. 1. Bara de material 1 este supusă unei compresiuni
 13 axiale prin aplicarea forțelor F_1 și F_2 și unei forfecări transversale, prin deplasarea semima-
 triței 2 în raport cu semimatrița fixă 3. Deplasarea semimatriței 2 are loc după traiectoria T
 15 și este controlată cu ajutorul unui sistem de comandă numerică. Forma traiectoriei T poate
 fi programată. De exemplu, în cazul din fig. 1, traiectoria (paternul de deformare) programată
 17 este O-t1-t2-t3-t4-t5...O. În plus, prin deplasarea s a semifabricatului, în direcția axială, zona
 de deformare este deplasată de-a lungul axei semifabricatului, iar paternul de deformare se
 19 schimbă sau nu periodic. În acest fel, în două secțiuni transversale vecine, paternul de
 deformare realizat poate fi același sau diferit. Distanța dintre două secțiuni vecine reprezintă
 21 pasul de nanostructurare și poate fi reglată corespunzător.

23 Metoda constă în aplicarea unei succesiuni de pași, astfel stabiliți încât
 caracteristicile mecanice finale ale materialului nanostructurat să fie superioare celor ale
 materialului supus nanostructurării.

25 Pasul 1 constă în determinarea mărimii parametrului ce corespunde proprietăților
 mecanice finale ale materialului nanostructurat.

27 Pasul 2 constă în exprimarea variației de energie (ΔG_d) în funcție de densitatea de
 dislocații (ρ_d) într-un cristal cu volum molar cunoscut (M_p), vectorul Burger (b) și modulul de
 29 forfecare (G_F), [Tromans and Meech, *Miner. Eng.* 12 (6), 1999], folosind legătura dintre
 aceste mărimi în următoarea formă:

$$31 \Delta G_d = \rho_d M_v \frac{b^2 G_F}{4\pi} \ln \left(\frac{2\rho_d^{-1/2}}{b} \right) \quad (1)$$

35 În starea amorfă, energia este exprimată prin relația (2):

$$37 \Delta G_{am} = \left(\frac{\Delta H_f}{T_m} \right) (T_m - T) \quad (2)$$

39 unde ΔG_{am} reprezintă energia necesară transformării de la starea cristalină la starea
 41 amorfă, ΔH_f este căldura de topire necesară trecerii de la stare cristalină la stare amorfă, T_m
 este temperatura lichidus, iar T este temperatura curentă.

43 Starea de nanostructurare sub 20 nm este similară stării amorse. Din acest motiv,
 energia liberă poate fi exprimată prin relația:

$$45 \Delta G_d = \Delta G_{am} \quad (3)$$

RO 126481 B1

Înlocuind (1) și (2) în (3), se calculează densitatea de dislocație corespunzătoare trecerii de la stare cristalină la stare amorfă, corespunzătoare unei nanostructurări cu grăunți de 20 nm.	1
Pasul 3 constă în aceea că, pentru a obține, în microstructură, valoarea densității de dislocație calculată, se determină coordonatele paternului de deformare O-t1-t2-t3-t4-t5...O, ce va fi utilizat în nanostructurare.	3
Pentru a ajunge la nivelul energetic necesar, se consideră o anumită evoluție a acestei mărimi, ale cărei funcții de formă se asimilează cu funcția de formă a energiei de activare a plierii-deplierii proteinelor. Această funcție de formă, corespunzătoare plierii-deplierii proteinelor, este prezentată în fig. 3.	5
La anumite succesiuni de pliere - depliere ale proteinei Cl2, aceste funcții de formă sunt specifice. Prin analogie între traiectoria urmată de un reziduu aparținând unei proteine și atomii dintr-un plan transversal al unui canal de dislocație, se alege o funcție de formă corespunzătoare acelor secvențe de pliere - depliere care prin cumulare duc la o energie echivalentă cu cea necesară.	7
Pasul 4 constă în stabilirea succesiunii paternurilor pe care canalele de dislocație din material trebuie să le urmeze.	9
Pasul 5 constă în aceea că, prin simulare de dinamică moleculară, se generează o bază de date, cu diferite traiectorii ale canalelor de dislocație, corespunzătoare diferitelor condiții de proces, (diferite traiectorii Q-t1-t2-t3-t4-t5...Q).	11
Folosind un model ARMA, se identifică acea traiectorie O-t1-t2-t3-t4-t5...O care corespunde secvențelor de pliere-depliere ale canalelor de dislocație ce conduc la obținerea densității de dislocație calculate și implicit la valoarea caracteristicii mecanice țintită, de exemplu - la valoarea modulului de forfecare - țintă.	13
	15
	17
	19
	21
	23

RO 126481 B1

Revendicare

1

3

5

7

9

11

13

Metodă pentru îmbunătățirea caracteristicilor mecanice ale materialelor metalice policristaline nanostructurate prin deformare plastică severă, care în scopul obținerii îmbunătățirii caracteristicilor mecanice ale materialului, realizează controlul nanostructurării prin modificarea permanentă a direcției după care are loc deformarea plastică severă, **caracterizată prin aceea că**, controlul nanostructurării este realizat prin controlul distribuției dislocațiilor prin determinarea densității de dislocații care se obține printr-un anumit patern al deplasării și intersecției dislocațiilor, care la rândul lui este controlat prin modificarea după un program a traiectoriei liniei de forfecare a materialului, stabilit printr-un model biometric, prin care se determină succesiunea de secvențe pe care dislocațiile trebuie să o urmeze, astfel încât să se obțină densitatea de dislocații necesară, a cărei valoare a fost predeterminată prin simulări bazate pe modelare dinamică moleculară și identificare cu modele ARMA.

(51) Int.Cl.
C21D 7/02 (2006.01);
B82B 3/00 (2006.01);
B21J 1/02 (2006.01);
C30B 29/00 (2006.01)

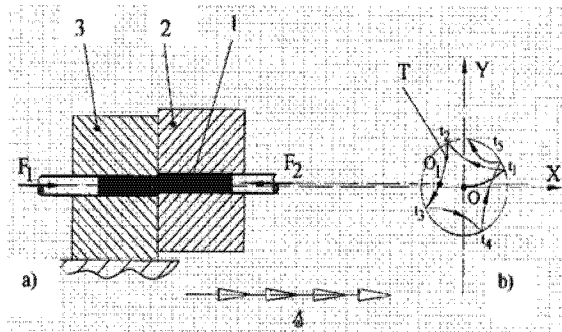


Fig. 1

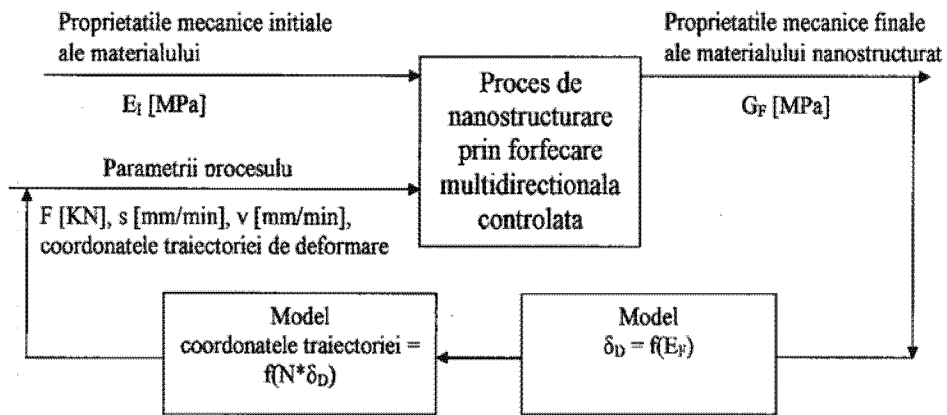


Fig. 2

(51) Int.Cl.
C21D 7/02 (2006.01),
B82B 3/00 (2006.01),
B21J 1/02 (2006.01),
C30B 29/00 (2006.01)

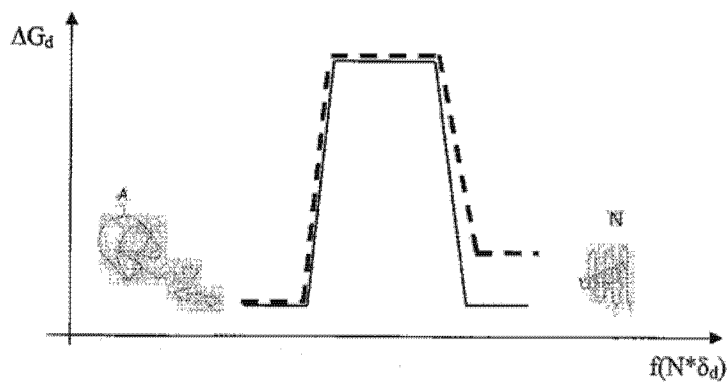


Fig. 3

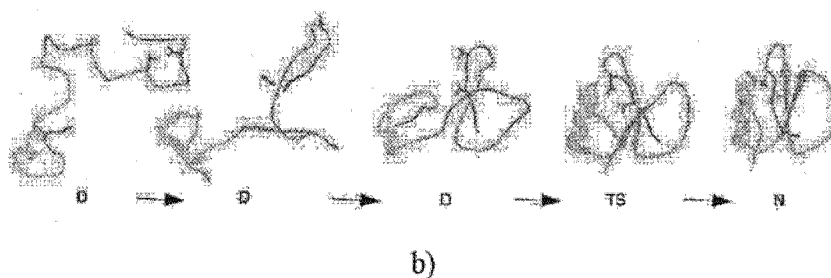
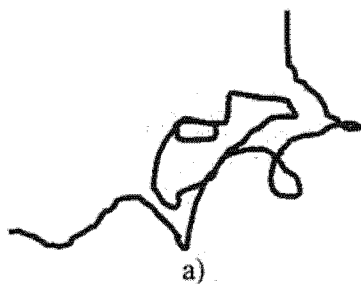


Fig. 4

(51) Int.Cl.
C21D 7/02 (2006.01);
B82B 3/00 (2006.01);
B21J 1/02 (2006.01);
C30B 29/00 (2006.01)

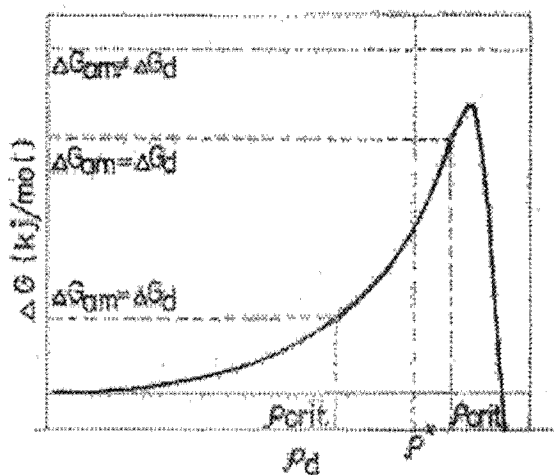


Fig. 5



Editare și tehnoredactare computerizată - OSIM
 Tipărit la: Oficiul de Stat pentru Invenții și Mărci
 sub comanda nr. 1153/2013