



(12) CERERE DE BREVET DE INVENȚIE

(21) Nr. cerere: a 2010 01140

(22) Data de depozit: 19.11.2010

(41) Data publicării cererii:
30.10.2012 BOPI nr. 10/2012

(71) Solicitant:
• UNIVERSITATEA "DUNĂREA DE JOS"
DIN GALAȚI, STR. DOMNEASCĂ NR. 47,
GALAȚI, GL, RO

(72) Inventatori:
• BANU MIHAELA, STR. SATURN NR. 10,
BL. B2, SC. 3, AP. 28, GALAȚI, GL, RO;

• EPUREANU ALEXANDRU,
STR. ALEXANDRU LĂPUȘNEANU NR. 16,
BL. B6, AP. 16, 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;
• BURUIANĂ ALICE NICOLETA,
STR. SLĂNIC NR. 1, BL. 4G, AP. 36, GALAȚI,
GL, RO

(54) **METODĂ DE PROIECTARE A PATERNURILOR
DISLOCAȚIILOR LA DEFORMAREA PLASTICĂ SEVERĂ A
MATERIALELOR METALICE**

(57) Rezumat:

Invenția se referă la o metodă de determinare a unui model al dislocațiilor din structura materialelor metalice, apărute în urma procesului de deformare plastică la rece, în scopul stabilirii parametrilor de conducere a procesului de nanostructurare bazată pe deformare plastică severă, prin forfecare multidirecțională controlată, care permite obținerea unor materiale metalice superplastice, cu mărimi diminuate ale grăunților cristalini, ceea ce determină o ameliorare a caracteristicilor mecanice în sensul creșterii rezistenței la tracțiune sau a plasticității materialului. Metoda conform invenției are următoarele etape:

a. realizarea unei imagini cu microscopie cu transmisie electronică a unui volum finit de material metalic ce va fi supus nanostructurării, se analizează liniile de dislocații vizibile care se discretizează într-un număr de segmente finite, obținându-se coordonatele punctelor care definesc segmentele finite, ceea ce permite reconstituirea liniei de dislocație inițială în coordonate discrete;

b. prin simularea cu dinamica moleculară se generează forme conformaționale ale unor proteine lungi pe durate de ordinul nanosecundelor, care constituie baze de date, din care se selectează acele forme care corespund, într-una din stări, formei inițiale a liniei de dislocații din materialul care se supune nanostructurării;

c. se aleg formele țintă ale dislocației în timpul procesului de nanostructurare prin deformare plastică severă, bazate pe mimica evoluției proteinelor la tracțiune/compresiune, care să corespundă unui nivel mic de energie entropică la o lungime mai mare a dislocației, față de starea inițială;

d. în fază finală se construiește traiectoria de aplicare a deformației pe baza evoluției programate a entropiei elastice, aflată în legătură cu densitatea de dislocații din materialul supus nanostructurării.

Revendicări: 4
Figuri: 6



OFICIUL DE STAT PENTRU INVENȚII ȘI MĂRCI	
Cerere de brevet de invenție	
Nr.	a 2016 01140
Data depozit	19-11-2016

Descrierea invenției

Invenția se referă la o metodă de proiectare a paternului dislocațiilor la deformarea plastică la rece în scopul stabilirii parametrilor de conducere a procesului de nanostructurare bazată pe deformare plastică severă prin FMC (forfecare multidirecțională controlată) ce permite obținerea de materiale metalice superplastice.

Se cunoaște faptul că nanostructurarea metalelor are ca efect diminuarea mărimii graunților cristalini. Funcție de nivelul de diminuare caracteristicile mecanice ale materialelor metalice se modifică, în sensul creșterii rezistenței la tracțiune a materialului sau creșterii plasticității acestuia. În prezent, modificarea caracteristicilor mecanice este un rezultat natural al procesului de nanostructurare prin deformare plastică severă, obținut fără nici un fel de intervenție în procesul de nanostructurare, nici în ceea ce privește caracteristica mecanică ce se modifică prin nanostructurare și nici în ceea ce privește nivelul acestei modificări.

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

Unul dintre dezavantajele actualelor metode de nanostructurare prin deformare plastică severă este acela că nu se ține cont de legătura ce există între caracteristicile 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, și, pe de altă parte, proprietățile finale ale materialului nanostructurat.

În prezent, nu se cunosc metode de proiectare a paternurilor dislocațiilor la deformarea plastică severă a materialelor metalice.

Problema tehnică pe care o rezolvă invenția este proiectarea paternurilor dislocațiilor la deformarea plastică severă a unui material metalic astfel încât efectul superplasticizare, urmare a nanostructurării, să fie maximizat.

Metoda de proiectare a paternurilor dislocațiilor la deformarea plastică severă a materialelor metalice, caracterizată prin aceea că a) mai întâi se realizează o imagine cu microscopie cu transmisie electronică a unui volum finit de material metalic ce va fi supus nanostructurării, apoi se analizează liniile de dislocații vizibile care se discretizează într-un număr de segmente finite obținându-se coordonatele punctelor ce definesc segmentele finite, ceea ce permite reconstituirea liniei de dislocație inițială în coordonate discrete, și prin aceea că b) prin simularea cu dinamica moleculară se generează forme conformationale ale proteinelor lungi pe durate de ordinul ns, ce constituie baze de date, și din acestea se selectează acele forme care corespund într-una din stări cu forma inițială a liniei de dislocații din materialul ce se supune nanostructurării, precum și prin aceea că c) se aleg forme țintă ale dislocației în timpul procesului de nanostructurare prin deformare plastică severă (FMC) bazate pe mimica evoluției proteinelor la tracțiune/compresiune, care să corespundă unui nivel mic de energie entropică și o lungime mai mare a dislocației, față de starea inițială, și prin aceea că în final se construiește

[Handwritten signatures and scribbles]



traectoria de aplicare a deformatiei pe evolutiei programate a entropiei elastice aflata in legatura cu densitatea de dislocatii din materialul supus nanostructurarii.

Mai jos se prezinta un exemplu de aplicare a inventiei in legatura cu figurile 1..6, dupa cum urmeaza:

Fig. 1 – Discretizarea unui front de dislocatii in segmente L_i

Fig. 2 Evolutia frontului de dislocatii pe un interval Δt_i , avand ca patern tinta o configuratie inspirata din mecanismul de indoire – dezdoire al unei proteine

Fig. 3 Discretizarea dislocatiilor la deformarea Al si vizualizarea interactiunilor cu un film de Al_2O_3 . Imagine TEM pentru deformarea. (a-c) 400 kV, $T=325^\circ C$. (a) $t=0$ s. (b) $t=0,76$ s, dislocatia face un salt la interactiunea cu Al_2O_3 . (c) $t=13,0$ s, re-intersectia cu suprafata filiforma. (d-g) 1 MV, $T=250^\circ C$, al doilea ciclu de incalzire. (d) $t=0$ s. (e) $t=0,40$ s. (f) $t=7,96$ s. (g) $t=8,88$ s. bazata pe [B. J. Inkson, G. Dehm and T. Wagner, In situ TEM observation of dislocation motion in thermally strained Al nanowires, Acta Materialia, Volume 50, Issue 20, 3 December 2002, Pages 5033-5047]

Fig. 4 Stari conformationale ale proteinei UBIQUITIN la intindere

Fig. 5 Energia potentiala (energia interna totala U) corespunzatoare UBIQUITIN la intinderea cu o forta de 500pN, dupa un timp $t=80$ ns de aplicare a fortei.

Fig. 6 Conceperea paternului tinta pentru evolutia dislocatiei considerate

Metoda consta in parcurgerea urmatoilor pasi:

(a) Vizualizarea dislocatiilor dintr-un volum finit de material metalic supus unei deformari plastice severe la s incremente de timp din timpul deformatii. Timpul este exprimat in secunde. Imaginea este obtinuta prin microscopie cu transmisie electronica (TEM) cu o magnitudine ce pune in evidenta frontul de dislocatii. Frontul de dislocatii este compus din segmente drepte si curbe.

(b) Discretizarea acestui front de dislocatii in segmente infinitenzimale. Fiecare segment este marginit de doi atomi virtuali. In explicarea metodei se face ipoteza ca un front de dislocatie va fi reprezentat printr-o insiruire de n sfere mici, numiti atomi virtuali, aflati la distante L_i unul de celalalt. Pozitia fiecarui atom virtual, la momentul $t_0=0$ s al deformarii, este notata cu P_i , unde $i=1-n$, asa cum este aratat in fig. 1.

(c) Cu aceasta configuratie a atomilor virtuali, se face modelul de simulare in dinamica moleculara, si se da o evolutie de ordinul Δt (ns) pentru a se putea estima starea energetica a acestei configuratii. Se noteaza cu U_1 starea energetica corespunzatoare acestei configuratii, la momentul $t=t_0+\Delta t$; Se masoara si densitatea dislocatiilor din imaginile TEM. Aceasta marime este notata cu δ_1 .

(d) Prin simulare cu dinamica moleculara se genereaza o baza de date continand diferite succesiuni de stari conformationale ale proteinelor cu lanturi lungi de atomi. Pentru a se obtine stari conformationale in intervale de timp de ordinul ns, proteinelor li se aplica tensiuni de intindere si apoi de compresiune. Astfel, prin simularea cu dinamica moleculara se obtine configuratia proteinelor in diferite stari de indoiri si dezdoiri. Fiecare stare este caracterizata de stari energetice diferite. Probabilitatea de a trece de la o stare energetica la alta este data de potentialul Gibbs (energia libera) corespunzatoare fiecarei stari. Din aceasta baza de date se alege



sucesiunea de configuratii a proteinei, cu nivelul energetic, de tensiuni si deformatii corespunzator si care serveste ca patern tinta pentru evolutia dislocatiei considerate la punctul (b).

(e) In modelul de dinamica moleculara al dislocatiei considerate, se da o evolutie de ordinul ns impunand conditii de evolutie corespunzatoare unor tensiuni si deformatii alese la punctul, precum si deplasari ($P_i - P'_i$) fiecarui atom. Astfel, dupa evolutie pe un interval Δt_i , noua configuratie a frontului de dislocatie va fi ca cea din fig. 2.

(f) Se calculeaza densitatea de dislocatie in aceasta stare conformationala corespunzatoare timpului $t + \Delta t_i$, si careia ii corespunde o stare energetica U_2 , prin aplicarea ecuatiei fundamentale a termodinamicii (1)

$$dU = TdS - PdV \quad (1),$$

unde U este energia potentiala la starea 2, adica U_2 , cunoscuta din calculul cu dinamica moleculara; T , P si V sunt temperatura, presiunea si volumul care sunt mentinute constant (sistem microcanonic), iar S este entropia elastica.

Astfel, se determina entropia elastica (S) corespunzatoare acestei stari caracterizata de o anumita densitate de dilocatii $\delta_2 > \delta_1$.

In concret, pentru a genera superplasticitate in materialul supus deformarii, ar trebui ca in intervalul $[0-0,76 \text{ s}]$, alegand unitatea de timp ns, de exemplu, sa avem o multitudine de stari conformationale, in care dislocatia se dezvolta pe paternuri de folding-unfolding, similar cu cel al proteinelor. Generarea acestor stari conformationale intermediare se poate obtine prin controlarea nivelului de tensiuni de forfecare, combinata cu directia de deformare care sa respecte curbele de incarcare/descarcare (reproduse la o anumita scara) realizate pentru proteine.

Acest patern de incarcare/descarcare reprezinta suma trecerilor dintr-o stare in alta caracterizate de salturi energetice ale fiecarui atom de la frontiera unei dislocatii.

In modelarea dinamica, presupunem ca un canal energetic corespunzator unei dislocatii este modelat prin sfere ce au atribuite formele de energie descrise anterior

$$U_{\text{total}} = U_{\text{bond}} + U_{\text{angle}} + U_{\text{dihedral}} + U_{\text{van der Waals}} + U_{\text{Coulomb}} \quad (2)$$

La nivelul deformatiilor plastice ce duc la obtinerea structurilor "ultrafine grained", lungimea y_c si rectilitatea liniei dislocatiei este limitata de marimea grauntelui. Daca procedeul de nanostructurare duce la obtinerea nanograuntilor ($<20\text{nm}$), aceasta linie de dislocatie va putea fi considerata o granita intre doua fronturi de graunti. In mecanica continua, este foarte dificil de modelat, de aceea modalitatea de studiu la acest nivel este bazata pe dinamica moleculara.

Consideram ca dislocatia este formata din atomi (virtuali) si este divizata intr-un numar finit de segmente P_i , definite intre doi atomi.

Prin simulare cu dinamica moleculara generam stările conformationale ale proteinei UBIQUITIN, a carei structura cristalina a fost descarcata din Banca de Proteine, pentru un timp de evolutie de 80ns. In fig. 4 sunt exemplificate 3 stari (initiala, intermediara ($t=40\text{ns}$) si finala ($t=80\text{ns}$) din evolutia UBIQUITIN supusa la tractiune prin algoritmul "viteza constanta".





Din conformatia proteinei la 80ns sunt extrase coordonatele atomilor virtuali in care a fost discretizata aceasta curba, pentru a se putea trasa paternul tinta al dislocatiei de la materialul metalic.

Energia interna totala asociata starii corespunzatoare lui t=80ns este prezentata in graficul din fig. 5.

Tabel nr. 1 – Pozitia paternului tinta determinat prin coordonate in sistemul cartezian

Eticheta atomului virtual	x	y	z
P1	x1	y1	z1
P2	x2	y2	z2
P3	x3	y3	z3
P4	x4	y4	z4
P5	x5	y5	z5
Pi	xi	yi	zi
.	.	.	.
Pn	xn	yn	zn

In fig. 6 se prezinta conceperea paternului tinta, pe baza valorilor obtinute din mimica proteinei UBIQUITIN, prezentate in tabelul 1.

Se calculeaza densitatea de dislocatii in aceasta varianta, dupa relatia (3)

$$\dot{\rho}_{SSD}^{\xi} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{d_e^{\alpha\xi} L^{\alpha\xi}} - 2y_c \rho_{SSD}^{\xi} \right) d_e^{\alpha\xi} |\dot{\gamma}^{\alpha}| \quad \text{si} \quad \rho_{SSD}^{\xi}(t=0) = \rho_{SSD_0} \quad (3)$$

ce reprezinta relatia generalizata propusa de [Essmann and Mughrabi, 1979]. Viteza de acumulare (primul termen din partea dreapta a ecuatiei 11) este legat de media lungimii segmentului de dislocatii ale dislocatiilor mobile (SSD's) in sistemul αL^{α} , care este determinat de microstructura, adica de starea dislocatiilor reale, exprimata prin relatia [Tabourot et al., 1997; Arsenlis and Parks, 2002].

$$L^{\alpha} = \frac{K}{\sqrt{\sum_{\xi} H^{\alpha\xi} |\rho_{SSD}^{\xi}| + \sum_{\xi} H^{\alpha\xi} |\rho_{GND}^{\xi}|}} \quad (4)$$

Aici, este o constanta si $H\alpha\xi$ indica imobilizarea mutuala dintre dislocatiile diferitelor sisteme de alunecare. Viteza de anihilare (al doilea termen in membrul drept al ecuatiei (4)) este controlat de lungimea y_c de anihilare, care este un parametru de material ce caracterizeaza media distantei dintre doua dislocatii de semn opus care tind spre neutralizare.

Cunoscand densitatea de dislocatii, se determina deformatia $\dot{\gamma}^{\alpha}$ ce corespunde lui L^{α} , din fig. 6. Prin integrarea lui $\dot{\gamma}^{\alpha}$ pe un interval de timp exprimat in secunde, corespunzator procesului de nanostructurare prin FMC, se afla curba de solicitare ce trebuie aplicata materialului de nanostructura, astfel incat la scara nano sa se obtina evolutia de dislocatii stabilita si, corespunzator, un nivel de superplasticitate programat.

Aceasta curba este posibil de programat, datorita facilitatii echipamentului de nanostructurare de comanda numerica a traiectoriei de deformare.

(Handwritten signatures)



19-11-2010

Inventia prezinta urmatoarele avantaje:

- se poate exploata la maximum capacitatea de deformare plastica a unui material ordinar;
- se poate aplica la toate instalatiile de nanostructurare unde starea de tensiuni si deformatii la care este supus materialul in timpul nanostructurarii poate fi modificata, atat in ceea ce priveste marimea, cat si directia.

[Handwritten signatures]



Revendicari

1) Metoda de proiectare a paternurilor dizlocatiilor la deformarea plastica severa a materialelor metalice, **caracterizata prin aceea ca**, mai intai se realizeaza o imagine cu microscopie cu transmisie electronica a unui volum finite de material metalic ce va fi supus nanostructurarii, apoi se analizeaza liniile de dislocatii vizibile care se discretizeaza intr-un numar de segmente finite obtinandu-se coordonatele punctelor ce definesc segmentele finite, ceea ce permite reconstituirea liniei de dislocatie initiala in coordonate discrete.

2) Metoda de proiectare a paternurilor dizlocatiilor la deformarea plastica severa a materialelor metalice, conform revendicarii 1, **caracterizata prin aceea ca**, prin simularea cu dinamica moleculara se genereaza forme conformationale ale proteinelor lungi pe durate de ordinul ns, ce constituie baze de date, si din acestea se selecteaza acele forme care corespund intr-una din stari cu forma initiala a liniei de dislocatii din materialul ce se supune nanostructurarii.

3) Metoda de proiectare a paternurilor dizlocatiilor la deformarea plastica severa a materialelor metalice, conform revendicarii 1, **caracterizata prin aceea ca**, se aleg forme tinta ale dislocatiei in timpul procesului de nanostructurare prin deformare plastica severa (FMC) bazate pe mimica evolutiei proteinelor la tractiune/compresiune, care sa corespunda unui nivel mic de energie entropica la o lungime mai mare a dislocatiei, fata de starea initiala.

4) Metoda de proiectare a paternurilor dizlocatiilor la deformarea plastica severa a materialelor metalice, conform revendicarii 1, **caracterizata prin aceea ca**, in final se construiesc traiectoria de aplicare a deformatiei pe evolutiei programate a entropiei elastice aflata in legatura cu densitatea de dislocatii din materialul supus nanostructurarii.



Lista figurilor

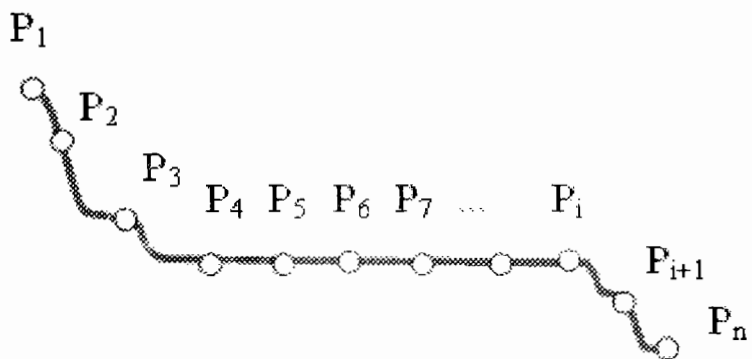


Fig. 1 – Discretizarea unui front de dislocatii in segmente L_i

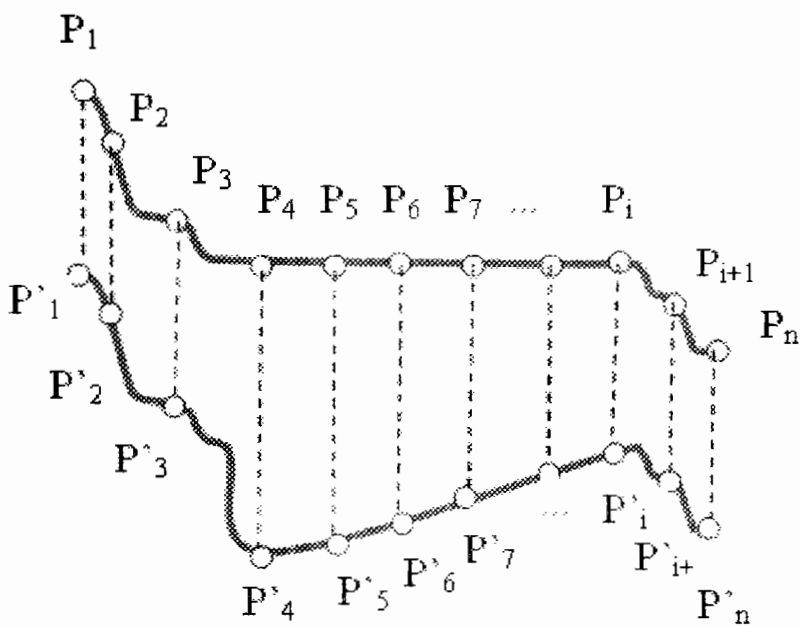


Fig. 2 Evolutia frontului de dislocatii pe un interval Δt_i , avand ca patern tinta o configuratie inspirata din mecanismul de indoire – dezdoire al unei proteine

[Handwritten signatures]



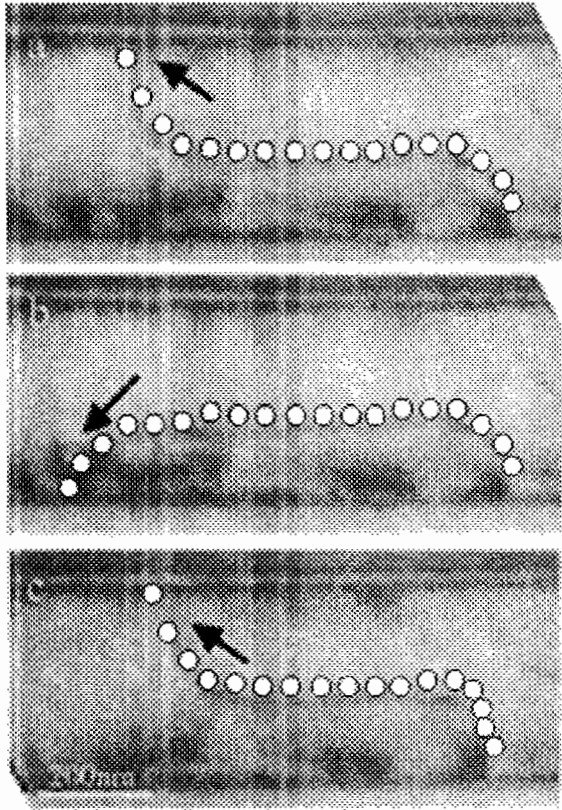


Fig. 3 Discretizarea dislocatiilor la deformarea Al si vizualizarea interactiunilor cu un film de Al_2O_3 . Imagine TEM pentru deformarea. (a-c) 400 kV, $T=325^\circ C$. (a) $t=0$ s. (b) $t=0,76$ s, dislocatia face un salt la interactiunea cu Al_2O_3 . (c) $t=13,0$ s, re-intersectia cu suprafata filiforma. (d-g) 1 MV, $T=250^\circ C$, al doilea ciclu de incalzire. (d) $t=0$ s. (e) $t=0,40$ s. (f) $t=7,96$ s. (g) $t=8,88$ s. bazata pe [B. J. Inkson, G. Dehm and T. Wagner, In situ TEM observation of dislocation motion in thermally strained Al nanowires, Acta Materialia, Volume 50, Issue 20, 3 December 2002, Pages 5033-5047]

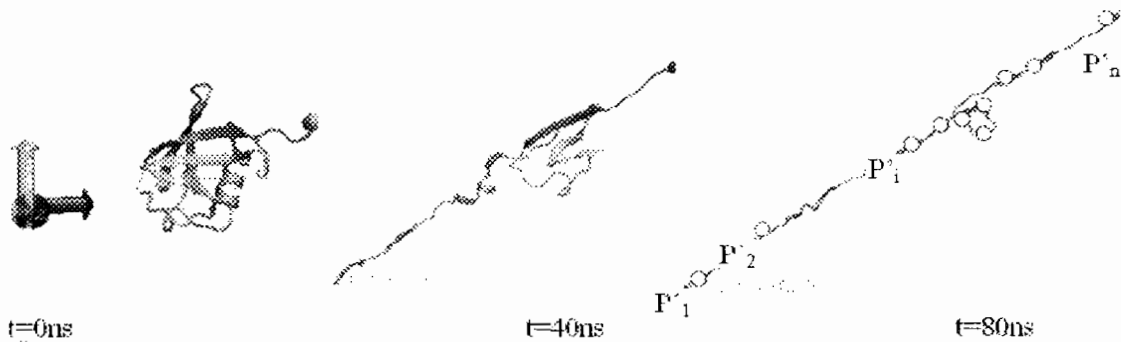


Fig. 4 Stari conformationale ale proteinei UBIQUITIN la intindere

Handwritten signatures and marks at the bottom left of the page.



19-11-2010

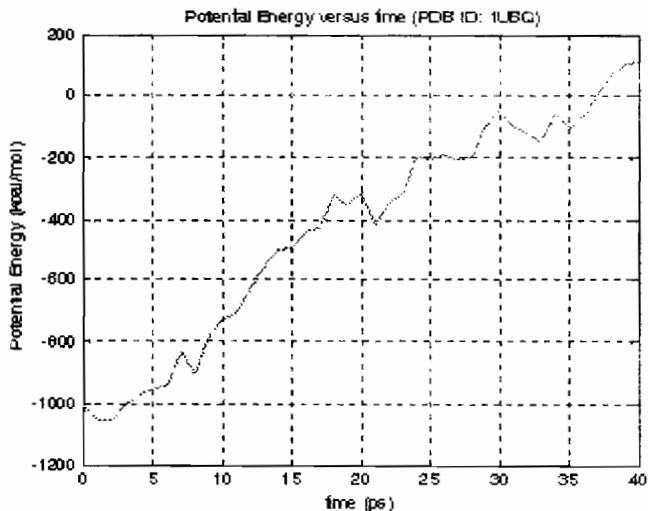


Fig. 5 Energia potentiala (energia interna totala U) corespunzatoare UBIQUITIN la intinderea cu o forta de 500pN, dupa un timp $t=80ns$ de aplicare a fortei.

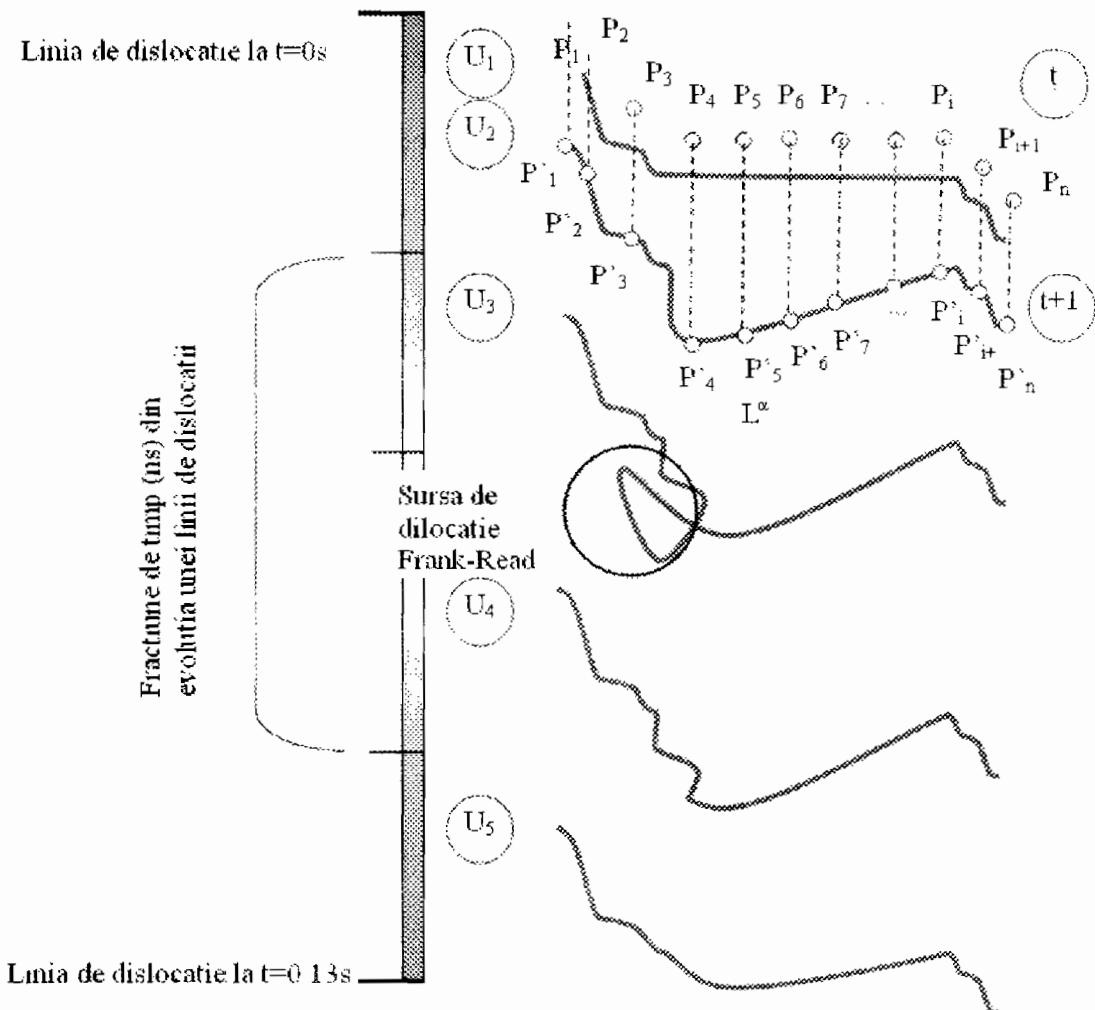


Fig. 6 Conceperea paternului tinta pentru evolutia dislocatiei considerate

(Handwritten signatures)

