

УДК 538.9, 539.5, 539.3

Исследование влияния свойств межфазных границ на механические характеристики металлокерамических композитов

С.В. Астафуров^{1,2}, Е.В. Шилько^{1,2}, В.Е. Овчаренко¹, С.Г. Псахье^{1,3,4}¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634055, Россия² Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, 634050, Россия³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, 634050, Россия⁴ Сколковский институт науки и технологий, Сколково, 143025, Россия

Работа посвящена теоретическому исследованию влияния геометрических (ширина) и механических характеристик межфазных границ на прочность, величину предельной деформации и работу разрушения металлокерамических композиционных материалов. Исследование проведено путем компьютерного моделирования методом подвижных клеточных автоматов с использованием развитой «мезоскопической» структурной модели композита, явным образом учитывающей наличие широких переходных зон «армирующие включения – матрица». Показано, что формирование в материале относительно широких межфазных границ, характеризующихся плавным изменением механических свойств материала при переходе от керамических включений к связующему, позволяет существенно повысить механические характеристики композита. При этом большое значение имеет не только ширина, но и величина градиента изменения механических свойств в переходной зоне. Так, наличие в межфазных областях дефектов и включений наноскопического и атомарного масштабных уровней может приводить к росту внутренних напряжений в интерфейсных зонах, формированию в них резкого градиента механических свойств и, как следствие, снижению деформационных характеристик и работы разрушения композита.

Ключевые слова: металлокерамический композит, межфазные границы, компьютерное моделирование, прочность, работа разрушения, модификация поверхностных слоев

Influence of interface properties on mechanical characteristics of metal ceramic composites

S.V. Astafurov^{1,2}, E.V. Shilko^{1,2}, V.E. Ovcharenko¹, and S.G. Psakhie^{1,3,4}¹ Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, 634055, Russia² National Research Tomsk State University, Tomsk, 634050, Russia³ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, 634050, Russia⁴ Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo, 143025, Russia

The paper reports on theoretical study to elucidate the influence of geometric (width) and mechanical characteristics of interfaces on strength, ultimate strain, and fracture energy of metal ceramic composites. The study was performed by computer simulation with the movable cellular automata method and a well-developed mesoscale structural composite model which takes explicit account of wide «reinforcing inclusion – matrix» transition zones. It is shown that the formation of relatively wide «ceramic inclusions – binder» interfaces with gradual variation in mechanical properties allows a considerable increase in the mechanical properties of the composite. Of great significance is not only the interface width but also the gradient of mechanical properties in the transition zone. The presence of defects and inclusions of nano- and atomic scales in interface regions can increase the internal stresses in these regions, induce a steep gradient of mechanical properties in them, and hence decrease the strain characteristics and fracture energy of the composite.

Keywords: metal ceramic composite, interfaces, computer simulation, strength, fracture energy, surface layer modification

1. Введение

Металлокерамические сплавы являются яркими представителями класса дисперсно-упроченных композиционных материалов, характеризующихся высокими значениями механических и служебных характеристик, таких как прочность, твердость, трещиностойкость,

износостойкость, работа разрушения, термическая стабильность и т.д. Это делает их весьма привлекательными для широкого применения в различных отраслях промышленности в качестве материалов, используемых в экстремальных условиях эксплуатации [1–3]. В частности, такие материалы широко применяют при произ-

водстве металлообрабатывающих инструментов. Детали машин и механизмов, работающие в условиях абразивного воздействия, высоких температур и агрессивных сред, изготавливают преимущественно из металло-керамических сплавов на основе тугоплавких и высокопрочных химических соединений (карбидов, нитридов, карбонитридов) с металлическими связующими (сплавы преимущественно на основе никеля и железа) [4–6]. Отметим, что одним из основных способов получения данного класса материалов является применение методов порошковой металлургии [7]. Прочностные и физические свойства спеченных металлокерамических композитов, помимо фазового состава, определяются целым рядом структурных факторов. Среди них можно выделить объемное содержание, дисперсность, геометрию и дефектность частиц тугоплавких соединений, структурно-фазовое состояние металлического связующего, качество адгезии между включениями и матрицей [1, 8–11].

Возрастающие требования к служебным характеристикам деталей современных машин и механизмов и, в частности, металлообрабатывающего инструмента определяют необходимость создания новых материалов, обладающих высокими эксплуатационными свойствами. Одним из перспективных способов повышения механических характеристик инструментальных сплавов является формирование в приповерхностных слоях высокопрочных мультимодальных термически стабильных структур под воздействием концентрированных потоков заряженных частиц [5, 12–14]. Например, электронно-пучковое облучение поверхности металлокерамического сплава 50 об. % TiC – 50 об. % NiCr приводит к значительному повышению механических и служебных характеристик поверхностного слоя и, как следствие, металлокерамического изделия в целом [5, 13, 14]. Результаты экспериментальных исследований показали, что повышение эксплуатационных характеристик модифицированного композита связано с тем, что облучение

приводит к частичному растворению армирующих частиц в расплаве связующего и последующей кристаллизации TiC в виде вторичных частиц субмикронного и наноскопического масштабов (рис. 1, а). Таким образом, в результате обработки в поверхностных слоях композита формируется многомасштабная внутренняя структура [12–14]. Одними из основных ее элементов являются вторичные частицы TiC субмикронного (100–250 нм) и наноразмерного (50–100 нм) масштабов, распределенные в объеме металлического связующего (рис. 1, б). Кроме того, электронно-пучковая обработка приводит к формированию в поверхностных слоях относительно протяженных диффузионных зон переменного состава на границах раздела частиц карбида титана с металлическим связующим (рис. 1, в). Данные зоны (в дальнейшем будем их также называть переходными областями и межфазными границами) характеризуются наличием градиента концентрации химических элементов (в данном случае Ti, C, Ni и Cr) и, как следствие, градиента механических свойств по мере удаления от поверхности включения.

Необходимо отметить, что границы раздела частиц тугоплавких соединений с металлическим связующим являются одними из ключевых элементов внутренней структуры металлокерамических композитов. Влияние межфазных границ на эксплуатационные свойства композиционных материалов обсуждается во многих экспериментальных и теоретических исследованиях [2, 15–18]. Таким образом, межфазные границы в металлокерамических композитах являются важными структурными элементами, обладающими комплексом собственных размерных (ширина), структурных и механических характеристик. Поэтому формирование протяженных межфазных границ в поверхностном слое металлокерамического композита (наряду с его упрочнением дисперсными вторичными частицами, залечиванием повреждений и микротрещин в мезоскопических карбидных включениях) в результате электронно-пучковой

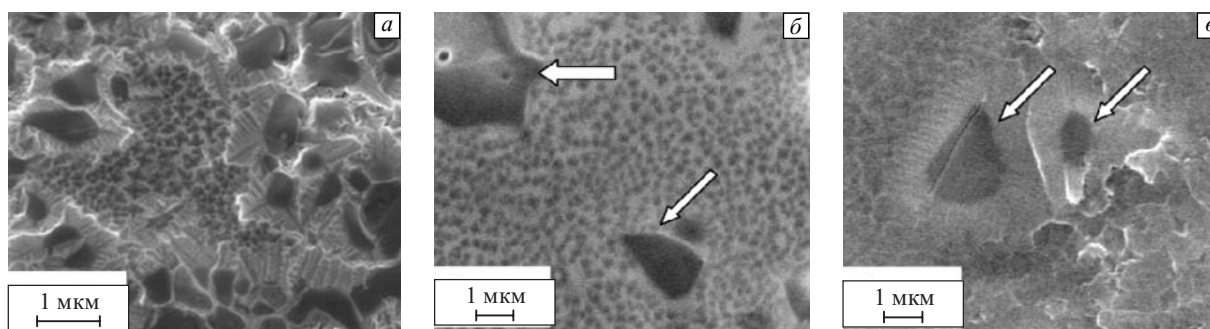


Рис. 1. Микроструктуры поверхности металлокерамического сплава после электронно-пучкового облучения (40 Дж/см², 15 импульсов, частота следования импульсов 1 с⁻¹, длительность импульсов 200 мкс): пример внутренней структуры модифицированной поверхности (а); субмикронные и наноразмерные вторичные частицы карбида титана в межчастичных прослойках металлического связующего (б); диффузионные зоны переменного состава на границах раздела карбидных частиц с металлическим связующим (в)

обработки должно являться одной из основных причин повышения эксплуатационных характеристик материала. При этом экспериментальное изучение влияния данного фактора на свойства металлокерамического композита является достаточно сложной задачей, которая не может быть в полной мере решена без применения современных методов компьютерного моделирования. Поэтому настоящая работа посвящена теоретическому изучению влияния геометрических (ширина) и механических свойств межфазных границ раздела «карбидные включения – металлическое связующее» на механические характеристики металлокерамического композита при внешних динамических воздействиях.

Исследование проводилось на основе компьютерного моделирования методом подвижных клеточных автоматов [19–22]. Данный метод является представителем группы методов дискретных элементов [23–25]. В рамках метода подвижных клеточных автоматов моделируемый материал представляется ансамблем взаимодействующих частиц конечного размера (объема) и заданной формы, которая может изменяться в процессе нагружения. Эволюция системы определяется численным решением системы уравнений Ньютона–Эйлера. Следует отметить, что основным преимуществом метода подвижных клеточных автоматов является способность непосредственно моделировать сложные процессы образования и накопления повреждений в материале, зарождения и развития трещин (в том числе множественное разрушение), перемешивание масс и т.д. Это обуславливает его привлекательность для моделирования разрушения сложных гетерогенных материалов, таких как металлокерамические композиты. Отметим, что для корректного моделирования процессов деформирования и разрушения гетерогенных упругопластических материалов в рамках метода подвижных клеточных автоматов используется многочастичная форма записи потенциалов/сил межэлементного взаимодействия [19–22, 26, 27].

2. Структурно-реологическая модель металлокерамического композита

Как отмечалось во введении, при моделировании особенностей механического отклика таких сложных гетерогенных материалов, как металлокерамические композиты, необходимо принимать во внимание особенности строения их внутренней структуры и, в частности, наличие протяженных зон переменного фазового состава на границах раздела «керамические включения – матрица». Для этого в работе в рамках метода подвижных клеточных автоматов была разработана двумерная структурно-реологическая модель композиционного материала. В качестве прототипа для данной модели был взят композит, состоящий из нихромовой матрицы (Ni–Cr-сплав) с включениями карбида титана TiC пос-

ле электронно-пучкового облучения (пример внутренней структуры такого материала приведен на рис. 1). Объемное содержание карбидных включений составляло 50 об. %. Как видно из рисунка, карбидная составляющая состоит из частиц достаточно сложной геометрической формы. Средний размер частиц составляет $D_{av} = 3 \pm 1$ мкм. В рамках развитой модели каждый из компонентов композита моделируется ансамблем подвижных клеточных автоматов с соответствующими реологическими параметрами (таким образом, клеточный автомат моделирует некоторую область/фрагмент включения, связующего, либо интерфейсной зоны). В качестве примера на рис. 2 приведена структура идеализированного металлокерамического композита с включениями TiC, имеющими сложную геометрическую форму и средний размер $D_{TiC} = 3$ мкм. Объемное содержание карбидных частиц в модельном композите составляет 45 %, что близко к соответствующему значению (50 %) в реальном композите. Для задания такой мезоскопической внутренней структуры был разработан специальный алгоритм, основанный на разбиении рабочей области на многоугольники Вороного (диаграмма Вороного). Отметим, что использование данного алгоритма позволяет задавать внутреннюю структуру модельного композита, содержащую включения нерегулярной формы, случайным образом распределенные в объеме материала.

Компоненты металлокерамических композитов характеризуются весьма различными реологическими характеристиками (упругохрупкие высокопрочные карбидные частицы и упругопластическое металлическое связующее). Для моделирования процессов деформирования и разрушения таких сложных гетерогенных систем методом подвижных клеточных автоматов использована развитая авторами двумерная модель упругопластического взаимодействия клеточных автоматов. В

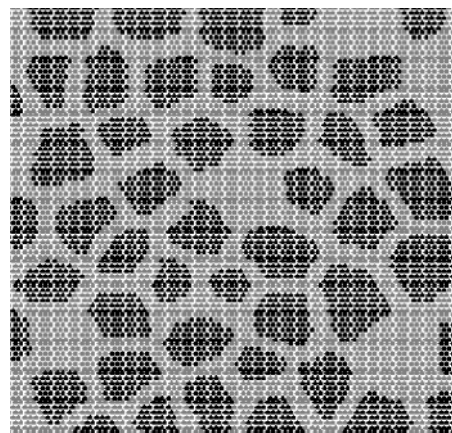


Рис. 2. Пример внутренней структуры модельного композиционного материала, полученной с использованием алгоритма многоугольников Вороного

ее основе лежит использование многочастичных потенциалов/сил взаимодействия дискретных элементов (клеточных автоматов) [20–22]. Принципиальным преимуществом такого подхода является возможность реализации различных моделей пластичности деформируемого твердого тела. Для описания механического отклика пластичного никельхромового связующего применялась модель пластического течения изотропных сред с критерием пластичности Мизеса [20–22]. Данная модель реализована с использованием алгоритма Уилкинса. Возможности развитой модели позволяют описывать механический отклик (включая разрушение) упруго-хрупких и упруго-пластических изотропных сред в приближении плосконапряженного и плоскодеформированного состояний.

В качестве входных параметров модели межавтоматного взаимодействия используются упругие константы и диаграмма одноосного нагружения материала, которые определяют функцию отклика подвижного клеточного автомата. Эта функция по аналогии с диаграммой нагружения также выражается в терминах σ – ϵ и определяет реологические характеристики клеточных автоматов. Функция отклика клеточных автоматов, моделирующих нихромовую матрицу, характеризуется упруго-пластической диаграммой нагружения с линейным упрочнением (кривая 1 на рис. 3), полученной аппроксимацией диаграммы одноосного растяжения макроскопических образцов Ni–Cr-сплава. Механические свойства автоматов, моделирующих хрупкие высокопрочные включения, отвечают идеализированным свойствам реальных частиц карбида TiC (линейно-упругое поведение вплоть до разрушения, кривая 2 на рис. 3).

Важное значение при моделировании разрушения композитов имеет корректное определение критерия прочности компонентов системы (TiC и Ni–Cr) и параметров этого критерия. При этом, поскольку разрушение связано с разрывом межатомных связей и пространственным разнесением атомных слоев, критерий разрушения материала, в отличие от критерия пластичности, не может определяться только величиной касательных напряжений и должен учитывать влияние гидростати-

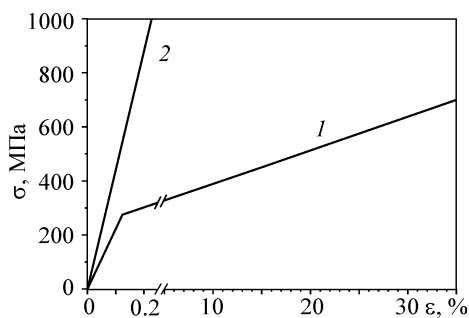


Рис. 3. Функции отклика подвижных клеточных автоматов, моделирующих Ni–Cr-сплав (1) и карбид титана TiC (2)

ческого давления. Поэтому в настоящей работе в качестве критерия разрушения применялся двухпараметрический критерий Друкера–Прагера в следующей формулировке:

$$\sigma_{\text{int}} 0.5(a + 1) + \sigma_{\text{mean}} 1.5(a - 1) > \sigma_c, \quad (1)$$

где σ_c — прочность материала на сжатие; $a = \sigma_c / \sigma_t$ — отношение прочностей материала при осевых сжатии σ_c и растяжении σ_t ; $\sigma_{\text{int}}, \sigma_{\text{mean}}$ — локальные значения интенсивности напряжений и давления.

В рамках метода подвижных клеточных автоматов разрушение реализуется через изменение состояния пары взаимодействующих клеточных автоматов из связанного состояния (химически связанные пары, оказывающие сопротивление относительному сжатию/растяжению и сдвиговому деформированию) в несвязанное состояние (два автомата, между которыми имеется только контактное взаимодействие) [20, 22, 23, 28]. Поскольку разрушение является локальным процессом, при применении критерия (1) в рамках метода подвижных клеточных автоматов переменные σ_{int} и σ_{mean} вычисляются для каждой взаимодействующей пары автоматов на поверхности их взаимодействия. При этом параметры σ_c и σ_t соответствуют прочности сцепления моделируемых этими автоматами фрагментов материала [20, 22]. В настоящей работе использовались следующие значения параметров критерия разрушения:

- 1) Ni–Cr-сплав: $a_{\text{NiCr}} = \sigma_c^{\text{NiCr}} / \sigma_t^{\text{NiCr}} = 3$, $\sigma_t^{\text{NiCr}} = 700$ МПа.
- 2) TiC: $a_{\text{TiC}} = \sigma_c^{\text{TiC}} / \sigma_t^{\text{TiC}} = 5$, $\sigma_t^{\text{TiC}} = 2000$ МПа.

Выше отмечалось, что для корректного моделирования особенностей механического отклика композиционных материалов необходимо учитывать наличие широких зон переменного состава между керамическими включениями и нихромовой матрицей. В рамках настоящей работы это осуществлялось с использованием мезоскопической модели «широкой» переходной зоны, ширина которой сопоставима или превышает размер подвижного клеточного автомата [27]. В данном приближении границы раздела включения и связующего представляются как зоны (области), в которых имеет место систематическое изменение объемной концентрации основных компонентов композита C (в данном случае TiC и NiCr) и, как следствие, реологических свойств по мере удаления от поверхности керамических частиц в объем связующего (рис. 4). Данная модель может эффективно использоваться при моделировании механического отклика композитов в случае, когда ширина переходной зоны в реальном композите превышает размер подвижного клеточного автомата.

Вид распределения $C(r)$ (где r — расстояние от поверхности «мезоскопического» включения) определяется на основе экспериментальных данных или теоретических моделей физических процессов, протекающих в поверхностных слоях при электронно-пучковом

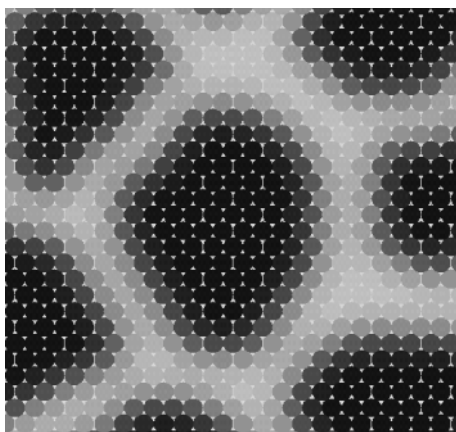


Рис. 4. Внутренняя структура фрагмента модельного металло-керамического композита с явным учетом зоны переменного состава между включениями TiC (показаны черным цветом) и нихромовой матрицей (показана светло-серым цветом). Различными оттенками серого цвета показаны области переходной зоны с соответствующим объемным содержанием TiC

воздействии. На рис. 5, а приведен пример реального профиля распределения концентрации карбида титана при переходе от мезочастиц TiC к связующему в изучаемом металлокерамическом сплаве 50 об. % Ni–Cr – 50 об. % TiC. Анализ данных элементного анализа в переходных зонах поверхностных слоев композита позволил развить алгоритм модификации («размытия») межфазных границ в модельных образцах металлокерамического сплава. Данный алгоритм основан на использовании линейного «установившегося» радиального распределения компонентов вокруг неполностью растворенной карбидной частицы. Использование развитого подхода позволяет формировать в модельном композите вокруг карбидных включений переходные области с заданным градиентом концентраций химических элементов. При этом имеет место уменьшение размеров исходных частиц (рис. 4). На рис. 5, б приведены примеры профилей распределения концентраций элементов при

переходе от включений к связующему, соответствующие различным значениям ширины переходной зоны L . Можно видеть, что они с хорошей точностью аппроксимируют реальные концентрационные профили вблизи поверхностей керамических мезочастиц в металло-керамических композитах (рис. 5, а).

Важнейшей составляющей мезоскопической модели межфазных границ является установление зависимости механических характеристик подвижных клеточных автоматов (в том числе параметров кривой течения и прочностных параметров σ_c и σ_t), моделирующих переходные области, от величины локальной концентрации компонентов системы. В работе зависимости базовых параметров механического отклика автоматов (плотности, модуля сдвига и коэффициента всестороннего сжатия) от локального содержания NiCr и TiC определялись с использованием модели смеси фаз:

$$P_{\text{mix}} = P_{\text{cer}} C_{\text{cer}} + P_{\text{met}} C_{\text{met}}, \quad (2)$$

где P — вычисляемый параметр отклика автомата; C_{cer} и C_{met} — локальные концентрации «керамической» и «металлической» фаз ($C_{\text{cer}} + C_{\text{met}} = 1$). Аналогичным образом вычислялись прочностные характеристики:

$$\sigma_{\text{mix}} = \sigma_{\text{cer}} C_{\text{cer}}^2 + \sigma_{\text{met}} C_{\text{met}}^2 + 2\sigma_{\text{cer-met}} C_{\text{cer}} C_{\text{met}}, \quad (3)$$

где σ_{cer} , σ_{met} и $\sigma_{\text{cer-met}}$ — соответствующие значения прочности керамической и металлической фаз, а также прочности их адгезии.

Для определения реологических параметров автоматов, моделирующих различные участки переходной зоны, в работе применялась линейная интерполяция соответствующих значений для TiC и NiCr (рис. 6). Из рисунка видно, что наклон интерполяционной линии (линия на рис. 6, соединяющая кривые 1 и 2) определяет скорость увеличения жесткости материала (в частности, предела упругости и коэффициента деформационного упрочнения) с ростом содержания карбидной фазы. Очевидно, что данная характеристика должна быть непосредственно связана с особенностями наноскопической и кристаллической структуры переходных зон на границах раздела фаз.

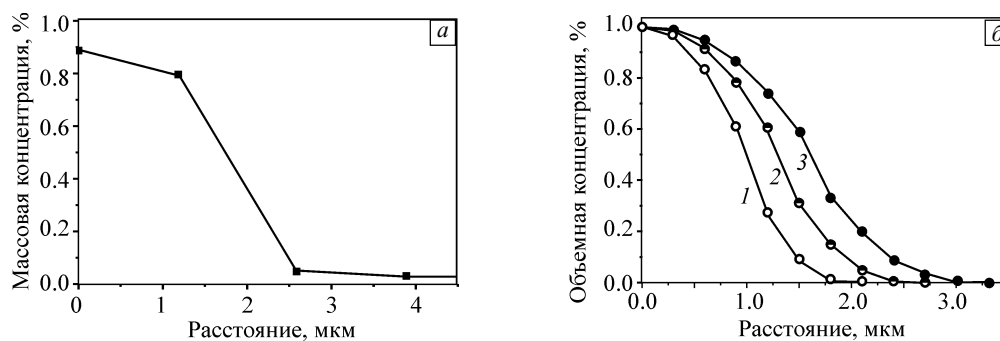


Рис. 5. Примеры реального (а) и модельных (б) профилей распределения концентраций TiC при переходе от мезочастиц к связующему в металлокерамическом композите Ni–Cr/TiC, на рисунке (б) $L = 1.0$ (1), 1.3 (2), 1.6 мкм (3)

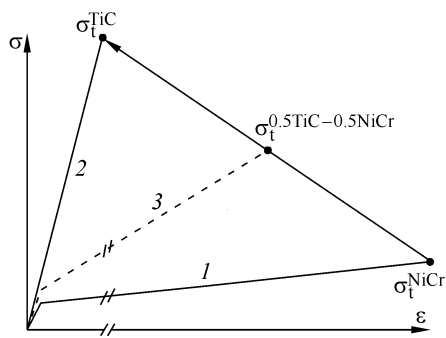


Рис. 6. Пример определения функции отклика подвижных клеточных автоматов, моделирующих переходную зону на границе раздела Ni–Cr-сплава с мезочастицами TiC: функция отклика автоматов Ni–Cr-сплава (1); функция отклика автоматов TiC (2); функция отклика автоматов, моделирующих область переходной зоны с содержанием TiC 50 об. % (3). Соединяющая кривые 1, 2 прямая является интерполяционной линией

Необходимо отметить, что исследование особенностей механического отклика модифицированных поверхностных слоев металлокерамического композита осуществлялось с использованием многоуровневого подхода. В рамках данного подхода элементы внутренней структуры мезоскопического масштаба (связующее, первичные частицы TiC и протяженные межфазные границы) учитываются явным образом. Учет элементов структуры более низких масштабных уровней (в частности, наличия вторичных наночастиц карбида титана в зонах переменного состава) осуществляется путем построения структурных моделей более низкого масштаба (в рассматриваемом случае субмикронного) с непосредственным заданием концентрации, размеров и пространственного распределения наноразмерных элементов. По результатам моделирования механических испытаний образцов субмикронного размера определяются их интегральные механические (в том числе реологические) характеристики. В последующем они используются в качестве входных данных для клеточных автоматов при моделировании отклика композита на мезоскопическом масштабном уровне. В настоящей работе данный подход применялся, в частности, для определения наклона интерполяционной линии.

3. Обсуждение результатов компьютерного моделирования

Для исследования влияния геометрических (ширина) и механических свойств межфазных границ на механические характеристики модифицированных поверхностных слоев металлокерамических композитов в работе моделировался тест на трехточечный изгиб. Отметим, что включения TiC в реальном металлокерамическом композите могут содержать повреждения и микротрещины. Для исключения влияния этого фактора на

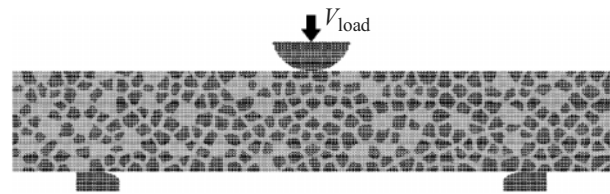


Рис. 7. Схема моделирования испытаний модельного композита на трехточечный изгиб

результаты моделирования в работе полагалось, что частицы TiC в модельном материале имеют «монокристаллическую» структуру и не содержат дефектов значимого масштаба. На рис. 7 приведена структура моделируемой системы. Цилиндрическую оправку диаметром 20 мкм вдавливали в образец размерами 24×130 мкм с постоянной скоростью V_{load} . При этом анализировались величина максимального сопротивления образца изгибному деформированию (прочность), соответствующее значение смещения оправки, а также работа разрушения. Как отмечалось во введении, изделия из металлокерамических композитов материалов зачастую эксплуатируются в сложных экстремальных условиях, поэтому в работе рассматривался динамический режим нагружения со скоростью $V_{load} = 1$ м/с. Отметим, что задача решалась в двумерной постановке в приближении плосконапряженного состояния.

Хорошо известно, что геометрия армирующих частиц может существенно влиять на интегральные механические характеристики композитов [1, 8]. Поскольку в работе моделируется композиционный материал с включениями сложной геометрической формы, получаемой с использованием алгоритма многоугольников Вороного, то результаты моделирования могут в значительной степени зависеть от особенностей рассматриваемой внутренней структуры. Поэтому для оценки корректности использования развитой структурной модели было проведено теоретическое изучение влияния данного фактора на параметры механического отклика металлокерамического композита. Для этого в работе рассматривались образцы, характеризующиеся различным пространственным распределением карбидных включений сложной формы (максимум распределения частиц по размерам во всех случаях был равен 3 мкм, структура всех образцов была подобна представленной на рис. 7). Отметим, что в данных тестовых расчетах использовалась упрощенная модель «узких» границ раздела «включение – связующее» [27]. В рамках данной модели полагается, что ширина межфазной границы значительно меньше размера подвижного клеточного автомата. При этом использовалось предположение об идеальной адгезии компонентов композита (включений TiC и никромовой матрицы). Это подразумевает, что прочностные характеристики межфазной границы равны соответствующим значениям для наименее проч-

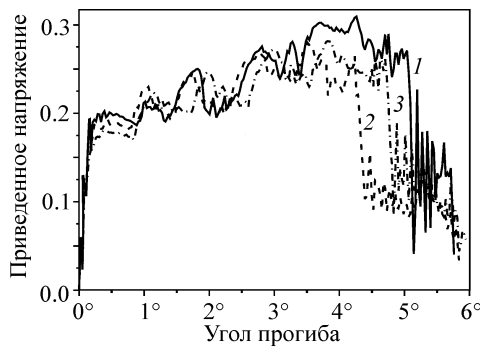


Рис. 8. Диаграммы нагружения модельных образцов, характеризующихся различным пространственным распределением карбидных включений сложной формы при испытании на трехточечный изгиб. Кривая 1 соответствует образцу, показанному на рис. 7

ного компонента композиционного материала (в данном случае Ni–Cr-сплава). На рис. 8 приведены примеры диаграмм нагружения для трех образцов, характеризующихся различным пространственным распределением мезочастиц TiC. Отметим, что здесь и далее диаграммы построены в координатах «приведенное напряжение σ/σ_t^{NiCr} – угол прогиба α », где σ — величина силы сопротивления вдавлению оправки, отнесенная к площади ее верхней поверхности; σ_t^{NiCr} — прочность никельхромового связующего на растяжение. Результаты моделирования показали, что различия в величине прочности и соответствующего предельного угла изгиба для разных образцов могут достигать 20 %. При этом сами диаграммы нагружения имеют схожий характер. Таким образом, полученные результаты показывают адекватность развитой модели и говорят о возможности использования одной из рассмотренных внутренних структур в качестве некоторого представительного объекта для изучения влияния свойств и ширины межфазных границ на интегральные механические характеристики металлокерамических композитов. Поэтому представ-

ленные ниже результаты были получены с использованием модельного образца, приведенного на рис. 7.

Существующие экспериментальные данные о структуре межфазных границ «включение – связующее» показывают, что эти зоны содержат значительное количество вторичных дисперсных частиц карбида титана (с размером 50–100 нм). При этом объемное содержание этих частиц уменьшается с удалением от поверхности включения в объем матрицы. Поэтому учет данного фактора может быть осуществлен с применением модели «широкой» переходной зоны. Основная сложность в использовании данного подхода связана с корректной оценкой наклона интерполяционной линии (рис. 6), который может быть определен с использованием вышеописанной процедуры многоуровневого моделирования. Для оценки зависимости реологических параметров зоны переменного состава от содержания упрочняющих наночастиц проводилось компьютерное моделирование испытания на трехточечный изгиб субмикронных образцов металлокерамики, характеризующихся различным пространственным распределением и концентрацией наночастиц TiC, имеющих сложную геометрическую форму (средний размер наночастиц составлял 100 нм). Отметим, что в проведенных расчетах для субмикронных образцов также использовалась модель «узкой» межфазной границы «включение – связующее».

На рис. 9 приведены примеры зависимостей эффективного предела упругости и коэффициента деформационного упрочнения образцов субмикронного масштаба от объемной концентрации керамических наночастиц, анализ которых показал, что по крайней мере для основных реологических параметров переходных зон является адекватным приближение их линейной зависимости от локальной концентрации вторичных наночастиц. Таким образом, полученные результаты моделирования субмикронных образцов дают возможность оценить характерное значение наклона интерполирующей линии на рис. 6 и определить зависимость

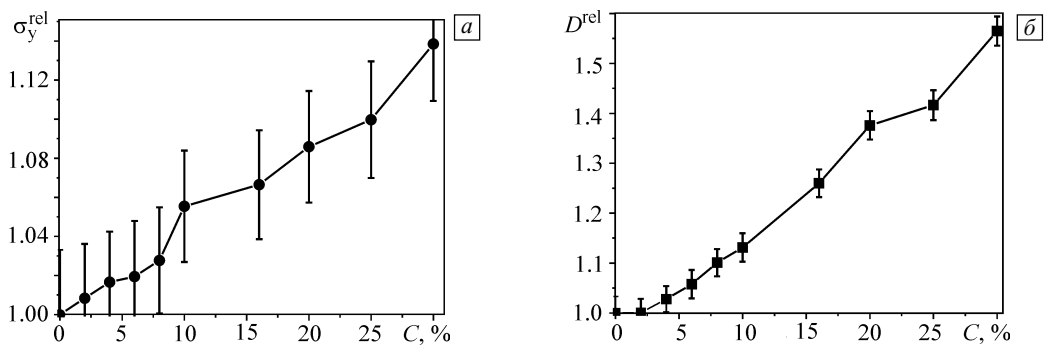


Рис. 9. Примеры зависимости эффективного предела упругости σ_y^{rel} и коэффициента деформационного упрочнения D_{rel} (полученного линеаризацией кривой нагружения) от объемной концентрации C наночастиц карбида. Параметры σ_y^{rel} и D_{rel} приведены в безразмерном виде, полученном нормированием на их значения при $C = 0$

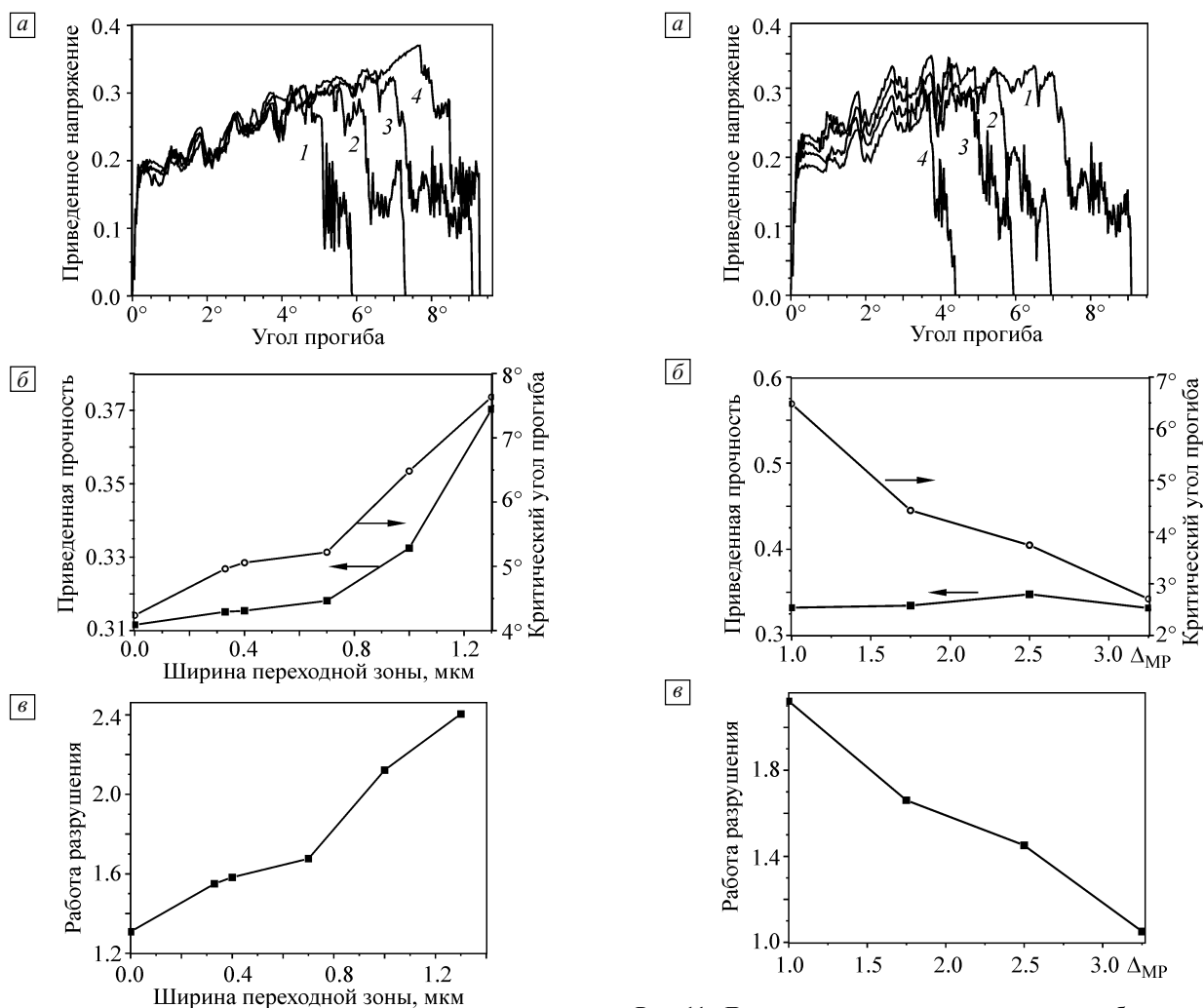


Рис. 10. Диаграммы нагружения модельных образцов металлокерамического композита, характеризующихся различной шириной межфазной границы L , при испытании на трехточечный изгиб (а), а также зависимости приведенной прочности и критического угла прогиба (б) и работы разрушения (в) от параметра L . На рисунке (а) $L = 1.00$ нм (1), 0.7 (2), 1.0 (3), 1.3 мкм (4)

Рис. 11. Диаграммы нагружения модельных образцов металлокерамического композита, характеризующихся различным углом наклона интерполяционной линии, при испытании на трехточечный изгиб (а), а также зависимости приведенной прочности и критического угла прогиба (б) и работы разрушения (в) от приведенного угла наклона интерполяционной линии Δ_{MP} . На рисунке (а) $\Delta_{MP} = 1.00$ (1), 1.75 (2), 2.5 (3), 3.25 (4)

реологических характеристик переходной зоны от объемного содержания вторичных включений TiC. С использованием этой информации в работе проведено исследование влияния ширины зон переменного состава на интегральные механические характеристики металлокерамического композита.

На рис. 10, а приведены диаграммы нагружения композитов, характеризующихся различной шириной межфазных границ L . Можно видеть, что увеличение ширины межфазных границ сопровождается значительным возрастанием изгибной прочности и предельной деформации композита, а также работы разрушения. На рис. 10, б, в показаны соответствующие зависимости этих интегральных механических характеристик композита от ширины зоны переменного состава. Отметим,

что работа разрушения определялась как площадь под соответствующими кривыми нагружения на рис. 11, а. Как следует из анализа представленных зависимостей, основной эффект от увеличения ширины зон переменного состава химических элементов проявляется в возрастании критической деформации материала (до 1.9 раза) и, следовательно, работы разрушения.

Отметим, что существующие экспериментальные данные свидетельствуют о том, что, помимо рассмотренных выше вторичных дисперсных включений (с характерным размером 50–100 нм), керамический компонент в переходных зонах может содержаться в виде частиц TiC, характерный размер которых составляет первые десятки нанометров, а также твердого раствора Ti и C в кристаллической решетке никромового сплава.

Очевидно, что такие включения и примеси, наряду с другими дефектами кристаллической решетки (в дальнейшем будем их называть структурными элементами наноскопического и атомарного масштабных уровней), могут создавать дополнительные внутренние напряжения в металлической матрице. Это может оказывать существенное влияние на величину предела упругости и деформационного упрочнения переходных зон, сопоставимое или даже превышающее влияние дисперсных включений более высоких масштабных уровней. Относительно высокое содержание таких структурных элементов в сплаве NiCr может достигаться в результате сверхбыстрого плавления и последующего сверхбыстрого остывания (данные условия соответствуют электронно-пучковой обработке с малыми временами импульса 50 мкс и менее). Более «плавный» термический режим в процессе обработки поверхностного слоя (достигающийся, в частности, при больших длительностях импульса 150–200 мкс) обеспечивает больше возможностей для уменьшения содержания структурных элементов наноскопического и атомарного масштабных уровней за счет образования дисперсных карбидных наночастиц (размером 50–100 нм). Таким образом, реологические свойства межфазных границ в поверхностном слое композита определяются не только их шириной (т.е. величиной градиента концентрации химических элементов), но и условиями, реализующимися в процессе обработки поверхности. Отметим, что прямой учет содержания структурных элементов наноскопического и атомарного масштабных уровней в переходных зонах является достаточно сложной задачей. Поэтому в работе данный эффект учитывался неявно путем увеличения угла наклона интерполяционной линии, который характеризовался безразмерным параметром Δ_{MP} :

$$\Delta_{MP} = \alpha_C / \alpha_0,$$

где α_C, α_0 — значения углов наклона интерполяционных линий при концентрации примесных атомов C и O соответственно. При этом α_0 соответствует углу, определенному в ходе проведения модельных расчетов с использованием субмикронных образцов и учитывающему упрочнение межфазных границ только за счет присутствия в них вторичных дисперсных частиц карбида титана. Таким образом, величина $\Delta_{MP} = 1$ отвечает модельной переходной зоне, не содержащей структурных элементов наноскопического и атомарного масштабных уровней.

На рис. 11, *a* приведены диаграммы нагружения композитов, реологические характеристики межфазных границ которых определялись с использованием различных углов наклона интерполяционной линии (на рис. 12 представлены результаты, полученные для образца с межфазной границей шириной 1 мкм). Из рис. 11, *a* видно, что с увеличением параметра Δ_{MP} возрастает интегральный коэффициент упрочнения композита (наклон

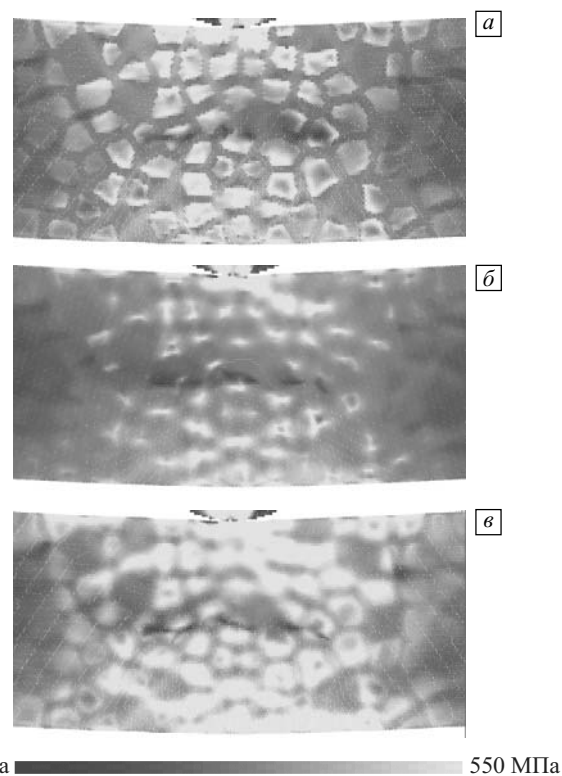


Рис. 12. Распределение интенсивности напряжений в образцах металлокерамического композита с «резкими» (*a*) и «широкими» (*b, в*) межфазными границами ($\alpha = 3^\circ$). Распределение соответствует $L = 1.0$ нм (*a*), 1.0 мкм (*b, в*)

участка необратимого деформирования). Это сопровождается «охрупчиванием» материала. В частности, как видно из рис. 11, *b, в*, при практически неизменной прочности композита с увеличением объемного содержания структурных элементов наноскопического и атомарного масштабных уровней величина критического угла прогиба снижается приблизительно в 2.5 раза, что сопровождается более чем двукратным снижением работы разрушения.

Анализ результатов компьютерного моделирования показал, что увеличение прочности и величины предельной деформации композиционного материала с увеличением ширины межфазных границ обусловлено значительным расширением области снижения напряжений от высоких значений в армирующих частицах (которые являются концентраторами напряжений в композите) к существенно более низким значениям в пластичном связующем. На рис. 12 показаны поля распределения интенсивностей напряжений. Видно, что формирование около частиц протяженных переходных зон, упрочненных дисперсными вторичными карбидными включениями, приводит к «размытию» поля напряжений, т.е. снижению градиента напряжений на межфазных границах. При этом использование режимов обработки поверхностных слоев, не приводящих к появ-

лению высоких внутренних напряжений в кристаллической решетке связующего, обеспечивает достаточно низкий общий уровень напряжений в переходных зонах (рис. 12, а, б) и тем самым способствует повышению деформационной способности модифицированных поверхностных слоев при одновременном увеличении прочности. В то же время с ростом внутренних напряжений в прослойках связующего в переходных зонах (с формированием структурных элементов наноскопического и атомарного масштабных уровней, что может иметь место, в частности, при электронно-пучковом облучении с малыми временами импульса) возрастает общий уровень напряжений даже на достаточно широких межфазных границах (рис. 12, а, в). Это приводит к более раннему достижению предела прочности в областях концентрации напряжений и, как следствие, к снижению деформационной способности и работы разрушения композита.

4. Заключение

Одним из важнейших структурных факторов, определяющих служебные характеристики металлокерамических композитов, являются границы раздела высокопрочных частиц и пластичного связующего. Причиной этого является существенное различие упругих и реологических характеристик компонентов таких композитов. Это приводит к концентрации локальных напряжений на межфазных границах в процессе нагружения материала. Поэтому учет физических и механических свойств границ раздела включений и связующего является важной задачей при разработке композиционных материалов.

В настоящей работе на основе компьютерного моделирования методом подвижных клеточных автоматов проведено теоретическое исследование влияния геометрических (ширина) и механических характеристик межфазных границ «включения – связующее» на механические характеристики металлокерамических композитов TiC–(Ni–Cr) в условиях динамических воздействий. Для этого в работе построена структурно-реологическая модель металлокерамического композита, учитывающая основные особенности его мезоскопической структуры. Результаты моделирования показали, что наличие широких переходных зон (зон переменного состава химических элементов) на границах раздела керамических включений и матрицы, армированных дисперсными карбидными частицами, приводит к увеличению прочности, величины предельной деформации и работы разрушения композита. Данный эффект связан с существенным снижением градиента напряжений на широких межфазных границах, характеризующихся плавным изменением механических свойств материала в переходных зонах.

Отметим, что одним из перспективных способов повышения эксплуатационных характеристик металло-

керамических композиционных материалов является модификация их поверхностных слоев в процессе электронно-пучкового облучения. Как свидетельствуют экспериментальные данные, такая обработка приводит к формированию в поверхностных слоях композита многомасштабной внутренней структуры, содержащей широкие межфазные границы, армированные дисперсными частицами карбида титана. При этом механические и эксплуатационные характеристики получаемых композитов (прочность, твердость, износостойкость и др.) в значительной степени зависят от параметров высокоэнергетического воздействия (длительности импульсов, плотности энергии пучка электронов и т.д.). Как показали результаты проведенных теоретических исследований, это в значительной степени связано с особенностями внутреннего строения и, как следствие, механическими свойствами формируемых в процессе электронно-пучкового облучения широких переходных зон. Так, использование режимов обработки поверхностных слоев, не приводящих к появлению высоких внутренних напряжений в кристаллической решетке связующего, способствует повышению прочностных и деформационных характеристик материала. В то же время наличие в переходной зоне большого количества дефектов, примесных атомов, наномасштабных керамических включений (что может иметь место при электронно-пучковом облучении с малыми временами импульса) приводит к росту внутренних напряжений в прослойках связующего и формированию более резкого градиента механических свойств в межфазных областях «включение – матрица». Следствием этого являются охрупчивание модифицированных поверхностных слоев металлокерамического композита, снижение его деформационных характеристик и работы разрушения даже в случае формирования широких межфазных границ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 гг. С.В. Астафуров и Е.В. Шилько благодарят за финансовую поддержку Российский научный фонд (грант № 14-19-00718).

Литература

1. *Chawla N., Chawla K.K.* Metal Matrix Composites. – New York: Springer, 2006. – 401 p.
2. *Kainer K.U.* Metal Matrix Composites: Custom-Made Materials for Automotive and Aerospace Engineering / Ed. by K.U. Kainer. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag, 2006. – P. 1–54.
3. *Mortensen A.* Concise Encyclopedia of Composite Materials. – Oxford: Elsevier, 2000. – 959 p.
4. *Pramanik A., Zhang L.C., Arsecularante J.A.* Prediction of cutting forces in machining of metal matrix composites // Int. J. Mach. Tools Manufacture. – V. 46. – No. 14. – P. 1795–1803.
5. *Ovcharenko V.E., Yu B., Psakhie S.G.* Electron-beam treatment of tungsten-free TiC/NiCr cermet. I: Influence of subsurface layer microstructure on resistance to wear during cutting of metals // J. Mater. Sci. Tech. – 2005. – V. 21. – No. 3. – P. 427–429.

6. Yu B., Ovcharenko V.E., Psakhie S.G., Lapshin O.V. Electron-beam treatment of Tungsten-free TiC/NiCr cermet II: Structural transformations in the subsurface layer // *J. Mater. Sci. Tech.* – 2006. – V. 22. – No. 4. – P. 511–513.
7. Витязь П.А., Гречихин Л.И. Нанотехнология получения металлокерамики на основе титана // *Физ. мезомех.* – 2004. – Т. 7. – № 5. – С. 81–87.
Vityaz P.A., Grechikhin L.I. Nanotechnology for producing titanium-based cermets // *Phys. Mesomech.* – 2004. – V. 7. – No. 5–6. – P. 51–56.
8. Chawla N., Chawla K.K. Microstructure-based modeling of deformation in particle reinforced metal matrix composites // *J. Mater. Sci.* – 2006. – V. 41. – P. 913–925.
9. Ayyar A., Chawla N. Microstructure-based modeling of crack growth in particle reinforced composites // *Compos. Sci. Technol.* – 2006. – V. 66. – P. 1980–1994.
10. Кульков С.Н. Формирование микро- и мезоструктур в металлокерамических композитах при механическом нагружении // *Физ. мезомех.* – 2005. – Т. 8. – № 6. – С. 79–87.
Kulkov S.N. Formation of micro- and mesostructures in metal matrix composites under mechanical loading // *Phys. Mesomech.* – 2006. – V. 9. – No. 1–2. – P. 73–80.
11. Бондарь М.П., Корчагин М.А., Ободовский Е.С., Панин С.В., Лукьянов Я.Л. Мезоструктурный материал с включениями, содержащими нанокристаллические частицы, полученный квазидинамическим методом прессования // *Физ. мезомех.* – 2008. – Т. 11. – № 6. – С. 87–94.
Bondar M.P., Korchagin M.A., Obodovskii E.S., Panin S.V., Lukyanov Ya.L. Quasidynamic compaction of a mesostructural material with inclusions reinforced by nanocrystalline particles // *Phys. Mesomech.* – 2009. – V. 12. – No. 1–2. – P. 94–100.
12. Иванов Ю.Ф., Коваль Н.Н., Овчаренко В.Е. Электронно-пучковая модификация твердого сплава TiC–NiCr. Рельеф поверхности обработки // *Изв. вузов. Черная металлургия.* – 2007. – № 12. – С. 59–60.
Ivanov Yu.F., Koval N.N., Ovcharenko V.E. Electron-beam modification of TiC–NiCr solid solution. Surface relief // *Izv. Vuzov. Chern. Metal.* – 2007. – No. 12. – P. 59–60.
13. Овчаренко В.Е. Эволюция структуры плазменного металлокерамического покрытия при импульсной электронно-пучковой обработке // *Физика и химия обработки материалов.* – 2010. – № 1. – С. 71–77.
Ovcharenko V.E. Structural evolution of a plasma-sprayed metal-ceramic coating due to pulsed electron-beam treatment // *Fiz. Khim. Obrab. Mat.* – 2010. – No. 1. – P. 71–77.
14. Псахье С.Г., Овчаренко В.Е., Князева А.Г., Шилько Е.В. Формирование многомасштабной структуры в поверхностных слоях и стойкость металлокерамического сплава в условиях механических воздействий // *Физ. мезомех.* – 2011. – Т. 14. – № 6. – С. 23–34.
Psakhie S.G., Ovcharenko V.E., Knyazeva A.G., Shilko E.V. Formation of a multiscale structure in surface layers and resistance of cermet alloy to mechanical action // *Fiz. Mezomekh.* – 2011. – V. 14. – No. 6. – P. 23–34.
15. Волков-Богородский Д.Б., Евтушенко Ю.Г., Zubov V.I., Лурье С.А. Численно-аналитический учет масштабных эффектов при расчете деформаций нанокмполитов с использованием блочного метода мультиполей // *Журнал вычислительной математики и вычислительной физики.* – 2006. – Т. 46. – № 7. – С. 1302–1321.
Volkov-Bogorodsky D.B., Evtushenko Yu.G., Zubov V.I., Lurie S.A. Calculation of deformations in nanocomposites using the block multipole method with the analytical-numerical account of the scale effects // *Comput. Math. Math. Phys.* – 2006. – V. 46. – No. 7. – P. 1234–1253.
16. Singh G., Yu Y., Ernst F., Raj R. Shear strength and sliding at a metal-ceramic (aluminium-spinel) interface at ambient and elevated temperatures // *Acta Mater.* – 2007. – V. 55. – P. 3049–3057.
17. Lurie S., Belov P., Volkov-Bogorodsky D., Tuckkova N. Interphase layer theory and application in the mechanics of composite materials // *J. Mater. Sci.* – 2006. – V. 41. – P. 6693–6707.
18. Tran K.N., Ding Y., Gear J.A. Finite element modelling of the interphase region on the mechanical behavior of a composite containing micrometer sized spherical particles // *ANZIAM J.* – 2010. – V. 51. – P. 16–31.
19. Psakhie S.G., Horie Y., Ostermeyer G.P., Korostelev S.Yu., Smolin A.Yu., Shilko E.V., Dmitriev A.I., Blatnik S., Spegel M., Zavsek S. Movable cellular automata method for simulating materials with mesostructure // *Theor. Appl. Fract. Mech.* – 2001. – V. 37. – P. 311–334.
20. Псахье С.Г., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Димаки А.В., Дмитриев А.И., Коноваленко Иг.С., Астафуров С.В., Завшек С. Развитие подхода к моделированию деформирования и разрушения иерархически организованных гетерогенных, в том числе контрастных, сред // *Физ. мезомех.* – 2011. – Т. 14. – № 3. – С. 27–54.
Psakhie S.G., Shilko E.V., Smolin A.Yu., Dimaki A.V., Dmitriev A.I., Konovalev I.G.S., Astafurov S.V., Zavshek S. Approach to simulation of deformation and fracture of hierarchically organized heterogeneous media, including contrast media // *Phys. Mesomech.* – 2011. – V. 14. – No. 5–6. – P. 224–248.
21. Psakhie S.G., Horie Y., Shilko E.V., Smolin A.Yu., Dmitriev A.I., Astafurov S.V. Discrete element approach to modeling heterogeneous elastic-plastic materials and media // *Int. J. Terraspace Sci. Engin.* – 2011. – V. 3(1). – P. 93–125.
22. Psakhie S., Shilko E., Smolin A., Astafurov S., Ovcharenko V. Development of a formalism of movable cellular automaton method for numerical modeling of fracture of heterogeneous elastic-plastic materials // *Fract. Struct. Integrity.* – 2013. – No. 24. – P. 26–59.
23. Cundall P.A., Strack O.D.L. A discrete numerical model for granular assemblies // *Geotechnique.* – 1979. – V. 29. – No. 1. – P. 47–65.
24. Bicanic N. Discrete Element Methods // *Encyclopedia of Computational Mechanics* / Ed. by E. Stein, R. de Borst, J.R. Hughes. – Chichester: Wiley, 2004. – P. 311–337.
25. Munjiza A. The Combined Finite-Discrete Element Method. – Chichester: Wiley, 2004. – 333 p.
26. Astafurov S.V., Shilko E.V., Dimaki A.V., Psakhie S.G. Development of multiscale approach to modeling mechanical response of high-strength intermetallic alloys on the base of movable cellular automaton method // *Proc. III Int. Conf. on Particle-Based Methods. Fundamentals and Applications (Particles-2013).* – 2013. – P. 624–629.
27. Psakhie S., Ovcharenko V., Yu B., Shilko E., Astafurov S., Ivanov Yu., Byeli A., Mokhovikov A. Influence of features of interphase boundaries on mechanical properties and fracture pattern in metal-ceramic composites // *J. Mater. Sci. Tech.* – 2013. – V. 29. – No. 11. – P. 1025–1034.
28. Jing L., Stephansson O. Fundamentals of Discrete Element Method for Rock Engineering: Theory and Applications. – Amsterdam: Elsevier, 2007. – 545 p.

Поступила в редакцию
17.02.2014 г.

Сведения об авторах

Астафуров Сергей Владимирович, к.ф.-м.н., нс ИФПМ СО РАН, нс ТГУ, svastafurov@gmail.com

Шилько Евгений Викторович, д.ф.-м.н., внс ИФПМ СО РАН, проф. ТГУ, shilko@ispms.tsc.ru

Овчаренко Владимир Ефимович, д.ф.-м.н., проф., зав. лаб. ИФПМ СО РАН, ove45@mail.ru

Псахье Сергей Григорьевич, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, дир. ИФПМ СО РАН, проф. ТГУ, зав. каф. ТПИУ, sp@ispms.tsc.ru