

УДК: 539.3

Е.Г. Скрипняк, В.А. Скрипняк, С.С. Кульков,
М.В. Коробенков, В.В. Скрипняк

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ С ТРАНСФОРМАЦИОННО-УПРОЧНЕННОЙ МАТРИЦЕЙ ПРИ ДИНАМИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ¹

Представлена физико-математическая модель, разработанная в рамках подхода вычислительной механики материалов. Модель предназначена для изучения закономерностей деформации и разрушения керамических композитов с трансформационно-упрочненной матрицей на мезоскопическом и макроскопическом уровнях при интенсивном динамическом нагружении.

Ключевые слова: динамическое нагружение, керамические композиты, трансформационное упрочнение.

Керамические материалы с трансформационным упрочнением широко применяются в инженерной практике как конструкционные материалы. Подавляющее количество таких керамических материалов разработано на основе диоксида циркония, частично стабилизированного в тетрагональной фазе [1 – 10]. Под действием растягивающих напряжений в области микроконцентраторов (на границах частиц упрочняющих фаз, вершине трещин и др.) тетрагональная фаза способна испытывать мартенситный фазовый переход в моноклинную фазу. Фазовый переход сопровождается развитием сдвиговых и объемных деформаций, обеспечивающих релаксацию напряжений и смыкание поверхностей трещин. Реализующийся эффект упрочнения позволяет достигать в керамических материалах прочностных характеристик (трещиностойкости, прочности), сопоставимых с конструкционными сплавами. С целью повышения стойкости трансформационно-упрочненных керамических материалов к локальным контактным нагрузкам и образованию поверхностных повреждений материалы дополнительно упрочняются введением высокопрочных частиц карбидов, нитридов, боридов и оксидов металлов, а также металлическими (Ni, Nb) микрочастицами и волокнами [3]. Опытные композиционные материалы обладают высокой трещиностойкостью и прочностью в статических условиях нагружения. Вместе с тем механические свойства трансформационно-упрочненных керамических материалов при высокоэнергетических воздействиях исследованы слабо. Описание механического поведения трансформационно-упрочненных керамических композитов при динамических нагрузках представляет существенную сложность. Это связано с недостаточной изученностью процессов эволюции структуры композитов в условиях динамического нагружения и отсутствием адекватных моделей механического поведения композитов, позволяющих учесть особенности протекания деформации, фазовых превращений, развития повреждений и разрушение материалов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. и АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (проекты 2.1.1/5993, 2.1.2/6809).

Целью данной работы является развитие подхода с точки зрения вычислительной мезомеханики для изучения механического поведения композиционных керамических материалов с трансформационно-упрочненной матрицей при динамических воздействиях.

Постановка задачи

В диоксиде циркония за счет небольшого количества дополнительно вводимых примесей оксидов Y_2O_3 , MgO , CeO удается при пониженных температурах частично стабилизировать высокотемпературные фазы (тетрагональную или кубическую), обладающие отличающимися физико-механическими свойствами. Массовые плотности фаз диоксида циркония приведены в табл. [3].

Массовая плотность полиморфных модификаций диоксида циркония

Фазы диоксида циркония	ZrO ₂	Температура, °С
Молекулярная масса	123,22 г/моль	
Массовая плотность в моноклинной фазе (monoclinic)	5,6 г/см ³	до 1000
Массовая плотность в тетрагональной фазе (tetragonal)	6,1 г/см ³	выше 1000...1150
Массовая плотность в кубической фазе (cubic)	6,27 г/см ³	выше 2350
Температура плавления		2715

Под действием внешней нагрузки в керамической матрице могут происходить мартенситные фазовые превращения, которые сопровождаются не только развитием сдвигов, но и существенным изменением объема материала. Переход из тетрагональной в моноклинную фазу сопровождается увеличением объема фазы на 4 % [3, 5].

Локально протекающие мартенситные превращения $t \rightarrow m$ в ZrO_2 способствуют смыканию краев трещин или коллапсу микропор, благодаря чему уменьшается интенсивность концентраторов напряжений вблизи дефектов. В результате существующие или вновь образовавшиеся микротрещины становятся стабильными при сохранении уровня внешней нагрузки. Данный эффект получил название трансформационного упрочнения [5].

В настоящее время интенсивно ведутся исследования по созданию высокопрочных керамических материалов диоксид-циркониевой матрицей, упрочненных дисперсными частицами боридов и карбидов металлов.

Для прогнозирования механического поведения керамических композитов с трансформационно-упрочняемой матрицей в условиях интенсивных динамических воздействий представляет интерес использование подхода вычислительной механики материалов [4]. В рамках указанного подхода может быть построена иерархическая модель структурированной среды. Для создания реалистичной модели могут быть использованы данные оптической, зондовой сканирующей и электронной микроскопии. В данной работе использованы результаты исследования структуры композитов $ZrO_2 - Y_2O_3 - Al_2O_3$ [8–10].

Модельный объем материала с сечением 12×12 мкм, содержащий стохастическую систему частиц Al_2O_3 , показан на рис. 1. Частицы имеют форму, близкую к тетраэдральной с характерным размером $\sim 19,6$ нм. Концентрация Al_2O_3 в ячейке соответствует средним значениям соответствующей концентрации в макроскопическом образце материала.

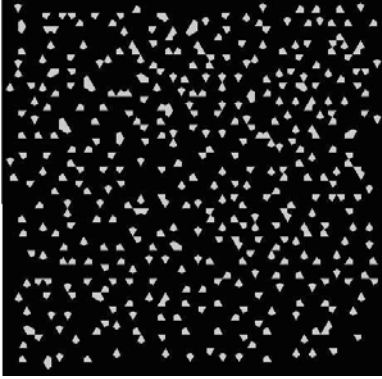


Рис. 1. Модельная структура репрезентативной ячейки композита $ZrO_2 - 3 \text{ мол. \% } Y_2O_3 - 5 \text{ об. \% } Al_2O_3$

Кинематика структурированной среды в репрезентативной ячейке с размерами, превышающими 10 нанометров, может быть описана параметрами (массовой скоростью u_i , скоростью деформации $\dot{\epsilon}_{ij}$). Размеры материальных микрочастиц в этом случае составляют десятки нанометров. В этом случае для описания неупругих деформаций могут быть использованы континуальные представления.

Возникающие в ячейке напряжения, температура, массовые скорости имеют распределения. Осредненная массовая плотность определяется соотношением (1) с учетом распределения локальных значений массовой плотности матрицы и упрочняющих частиц.

Эффективные механические параметры определяются соотношениями (1) – (4). Компоненты эффективных тензоров скорости деформации и скорости изгиба-кручения определяются формулами (3), а компоненты тензора эффективных напряжений – формулой (4):

$$\langle \rho \rangle = \frac{1}{V} \iiint_V \rho(x_k) dV ; \quad (1)$$

$$\langle u_i \rangle = \frac{1}{V} \iiint_V u_i(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3, \quad (2)$$

где $\langle u_i \rangle$ – осредненная массовая скорость, u_i – локальная массовая скорость в репрезентативной ячейке, V – объем;

$$\langle \dot{\epsilon}_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right], \quad \dot{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right]; \quad (3)$$

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d E_V}{dt \langle \dot{\epsilon}_{ij} \rangle}, \quad (4)$$

где $E_V = \iiint_V E dV$ – суммарная удельная внутренняя энергия в репрезентативной ячейке.

При изучении закономерностей деформации и разрушения керамических композитов при интенсивных динамических воздействиях одной из ключевых проблем является получение информации, позволяющей построить определяющее уравнение для макроскопического уровня. В рамках использованного подхода варьирование условий воздействия на репрезентативную ячейку композита позволяет получить данные об отклике структурированной среды при различных условиях деформирования.

Например, для репрезентативной ячейки, деформируемой во фронте плоской ударной волны, граничные условия могут быть заданы в соответствие со схемой на рис. 2:

$$\begin{aligned} \sigma_n(x_k, t) &= F(x_k, t), x_k \in \Gamma_1; \\ u_1(x_k, t) &= 0, x_k \in \Gamma_2 \cup \Gamma_3; \\ p &= u_N [\rho C]_{\Gamma_4}, x_k \in \Gamma_4, \end{aligned}$$

где ρ – массовая плотность вблизи границы, u_N – значения массовой скорости в направлении нормали к границе, значение параметра C уменьшается от величины продольной скорости звука в упругом предвестнике до C_B , $F(x_k, t)$ – функция, определяющая форму и длительность импульсного нагружения.

На границах Γ_5 включение – матрица заданы контактные условия

$$\sigma_{ij} n_j^+ = \sigma_{ij} n_j^-; u_i^+ = u_i^- \text{ для } x_k \in \Gamma_5,$$

где n_j^+, n_j^- – компоненты вектора нормали к внешней и внутренней поверхностям границы межфазного раздела.

В случае нарушения прочности межфазной границы раздела матрицы и включения граничные условия приобретают вид

$$\sigma_n^+ = -\sigma_n^-, \sigma_\tau = \eta P, \sigma_\tau^+ = \sigma_\tau^- \text{ для } x_k \in \Gamma_5,$$

где σ_n, σ_τ – нормальное и касательное напряжения в точках на межфазной границе, η – коэффициент трения.

Начальные условия для расчетной области для рассматриваемого случая приняты в виде

$$u_i(x_k) = u_i^{(0)}, \sigma_{ij}(x_k) = 0, \rho(x_k) = \rho^{(0)}(x_k), \varepsilon_{ij}(x_k) = 0, E(x_k) = 0.$$

Эффективные модули упругости определены с помощью (5) по полученным в расчете значениям продольной C_L и объемной C_B скоростям звука

$$\langle \mu \rangle = \bar{\rho} C_s^2, \langle K \rangle = \bar{\rho} C_B^2, C_L^2 = C_B^2 + \frac{4}{3} C_s^2, \quad (5)$$

где $\bar{\rho}$ – средняя массовая плотность в нагруженной области ячейки за фронтом соответствующей волны.

Динамика структурированной среды в ячейке описывается в лагранжевой системе отсчета уравнениями сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{du_i}{dt}, \frac{d\rho}{dt} = \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \rho \frac{dE}{dt} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}, \quad (6)$$

где σ_{ij} – компоненты тензора микронапряжений, ρ – массовая плотность, u_i – компоненты вектора перемещения, $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – компоненты тензора скорости деформаций, E – локальная удельная внутренняя энергия на единицу массы.

Приращения компонент тензора деформаций представляются в виде суммы упругих и неупругих составляющих

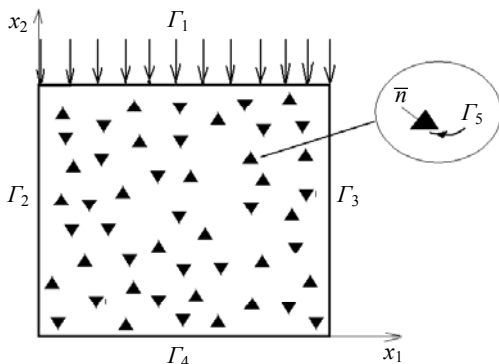


Рис. 2. Граничные условия для репрезентативной ячейки композита

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \quad (7)$$

где $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – компоненты тензора скорости деформации.

Компоненты тензора скорости неупругой деформации удобно представить в виде составляющих, связанных с дислокационными механизмами пластичности и механоактивируемыми механизмами мартенситных фазовых превращений

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_s + [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_m. \quad (8)$$

Такое представление учитывает, что дилатансия обусловлена только приращением объемной неупругой деформацией мартенситного превращения, а девиатор скорости неупругой деформации определяется вкладами сдвигов от обоих рассматриваемых механизмов пластичности

$$[\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_s = [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_s, \quad [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_m = \left[\frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_{kk}^p \right]_m \delta_{ij} + [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_m, \quad (9)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = (3/2) \dot{\varepsilon}_u^p [S_{ij} / \sigma_u], \quad (10)$$

где $\sigma_u = \sqrt{(3/2) S_{ij} S_{ij}}$, S_{ij} – компоненты девиатора тензора напряжения, $\dot{\varepsilon}_u^p = [(2/3) \dot{\varepsilon}_{ij}^p \dot{\varepsilon}_{ij}^p]^{1/2}$, $\dot{\varepsilon}_{ij}^p = [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_s + [\dot{\varepsilon}_{ij}^p]_m$.

Приращения неупругой деформации вследствие мартенситного превращения определяются скоростью изменения концентрации моноклинной фазы f . Величину концентрации моноклинной фазы f предлагается определять с помощью вероятности образования ламелей мартенсита:

$$f = 1 - \exp(-C_m V_p),$$

где C_m – объемная плотность центров зарождения мартенситной фазы, V_p – объем элементарной частицы материала.

Концентрация моноклинной фазы в начальном состоянии определяется соотношением $f_0 = 1 - \exp(-C_m(0) V_p)$.

Приращение объемной неупругой деформации вследствие протекания мартенситных фазовых превращений с дилатансионным эффектом предлагается определить соотношением

$$[\dot{\varepsilon}_{kk}^p]_m = \varepsilon_{\max}^p \dot{f}, \quad (11)$$

где ε_{\max}^p – теоретически возможная величина объемной неупругой деформации при полном мартенситном фазовом превращении, $\dot{f} = \dot{C}_m V_p \exp(-C_m V_p)$.

Приращение концентрации центров зарождения мартенситных ламелей \dot{C}_m зависит от термодинамического состояния материальной частицы:

$$\dot{C}_m = \frac{A C_m(0)}{[Q - W^P]^2} \exp\left(-\frac{B}{Q + W^P}\right), \quad (11)$$

где A, B – феноменологические коэффициенты, Q – энергия активации мартенситных превращений, $W^P = \frac{1}{3} p [\varepsilon_{kk}^p]_m + \sigma_u \varepsilon_u^p$.

Компоненты тензора напряжения Кирхгоффа представляются в виде суммы давления p и девиатора S_{ij}

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}. \quad (12)$$

Давление p в диапазоне до 10 ГПа может быть рассчитано с помощью уравнения состояния

$$p = K_1\theta + K_2\theta^2 + K_3\theta^3 + \Gamma\rho_0 E, \text{ при сжатии } \theta > 0,$$

$$p = K_1\theta, \text{ при растяжении } \theta \leq 0,$$

где K_1, K_2, K_3 – постоянные материала, $\theta = (\rho/\rho_0) - 1$, Γ – коэффициент Грюнайзена.

Значения постоянных для смеси фаз диоксида циркония могут быть в первом приближении получены в рамках смесевой модели.

Девиатор тензора напряжения вычисляется из решения релаксационного уравнения

$$\frac{DS_{ij}}{Dt} = 2\mu(\dot{\epsilon}_{ij}^e - \frac{1}{3}\dot{\epsilon}_{kk}^e\delta_{ij}), \quad (13)$$

где $\frac{DS_{ij}}{Dt} = \dot{S}_{ij} - S_{ik}\dot{\omega}_{jk} - S_{jk}\dot{\omega}_{ik}$ – производная Яумана, $\dot{\epsilon}_{ij}^e = \dot{\epsilon}_{ij} - [\dot{\epsilon}_{ij}^p]_m - [\dot{\epsilon}_{ij}^p]_s$.

Численные значения коэффициентов модели могут быть получены с использованием экспериментальных данных, приведенных в [3].

Для моделирования нагружения ячейки импульсом микросекундной длительности использован конечно-разностный метод, реализованный в программном комплексе ANSYS -11/ AUTODYN.

Результаты моделирования и их обсуждение

На рис. 3 показаны расчетные поля массовой скорости при нагружении элементарного объема композита $ZrO_2 - 10 \text{ об.}\% Al_2O_3$ плоской волной с амплитудой 2,5 ГПа.

Формирование блочных структур, разделенных полосами локализованной деформации, в композитах $ZrO_2 - 10 \text{ об.}\% Al_2O_3$ может происходить на субмикронном уровне. Размер формирующегося блока превышает размер включений и зависит от амплитуды ударной волны. В рассмотренном модельном композите процессы взаимодействия волн, отраженных от фазовых границ, существенной роли не играют. Релаксация сдвиговых напряжений в матрице сопровождается разделением фронта волны нагружения на упругий предвестник и волну объемного сжатия. Величина предела Гюгонио определяется сдвиговыми напряжениями в наноструктурной диоксид-циркониевой матрице. Результаты моделирования согласуются с данными экспериментов [3, 4].

На рис. 4 показано распределение локальных значений скорости деформации за фронтом ударной волны с амплитудой 2,7 ГПа в композите в $ZrO_2 - 10 \text{ об.}\% Al_2O_3$. Нелинейные эффекты механического поведения композита при указанных условиях нагружения обусловлены протеканием мартенситных фазовых превращений в матрице вблизи упрочняющих частиц.

На рис. 5 показаны зависимости интенсивности сдвиговых напряжений от деформации в процессе высокоскоростного нагружения композита $ZrO_2 - 10 \text{ об.}\% Al_2O_3$ во фронте ударной волны. Результаты моделирования показали, что релак-

сация сдвиговых напряжений локализуется в области концентраторов напряжения. Периодические изменения локальных значений давления, показанные на рис. 6, имеют квазистационарный характер и связаны с различной сжимаемостью конденсированных фаз ZrO_2 и Al_2O_3 .

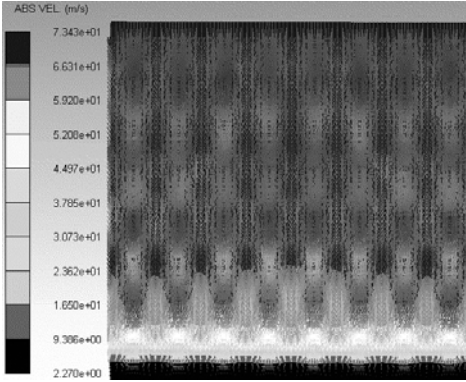


Рис. 3

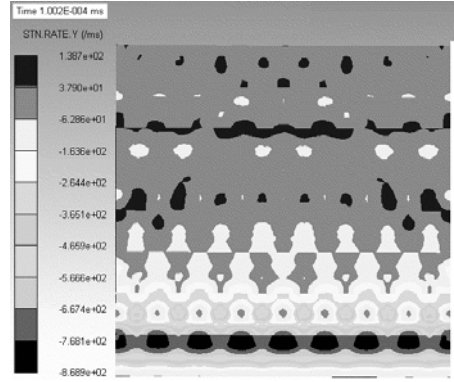


Рис. 4

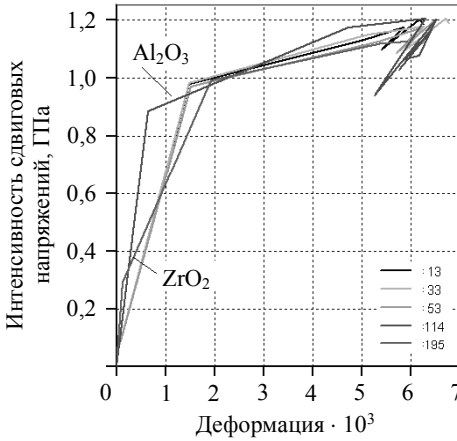


Рис. 5

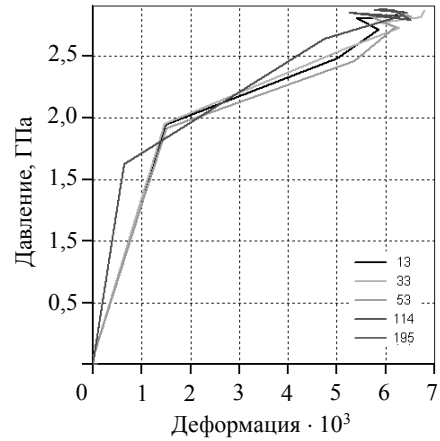


Рис. 5

Заключение

Показано, что нелинейные эффекты механического поведения керамических композитов $ZrO_2 - Al_2O_3$ с трансформационно-упрочненной матрицей проявляются при амплитудах ударного нагружения, близких или превышающих предел упругости Гюгонио σ_{HEL} .

Нелинейные эффекты при интенсивных динамических воздействиях на рассмотренные композиты связаны с процессами самоорганизации мод деформации на мезоскопическом уровне (формированием блочных субструктур), а также протеканием мартенситных фазовых превращений в прилегающих к упрочняющим частицам объемах матрицы.

В исследованных композиционных материалах эффективный размер блока существенно превышает средний размер включений и варьируется в зависимости

от амплитуды ударной волны. Блочные структуры формируются в ограниченном диапазоне интенсивности динамического воздействия. Обнаружено формирование блочных структур при нагружении волнами с амплитудами, превышающими 1,2 предела упругости Гюгонио. Блочные структуры не образуются при амплитудах, превышающих $\sim 3\sigma_{\text{HEL}}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кульков С.Н., Буякова С.П., Масловский В.И. Структура, фазовый состав и механическое поведение керамики на основе диоксида циркония // Вестник ТГУ. Бюллетень оперативной научной информации. 2003. Вып. 13. С. 61 – 87.
2. Hannink R. H. J., Kelly P.M., Muddle B. C. Transformation toughening in zirconia-containing ceramics // J. Am. Ceram. Soc. 2000. V. 83. P. 461 – 487.
3. Кульков С.Н., Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Буякова С.П. Механические свойства поликристаллических объёмных нанокристаллических керамических материалов на основе оксида алюминия и диоксида циркония // Синтез и свойства нанокристаллических и субмикроструктурных материалов / под ред. А.Д. Коротяева. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. С. 232 – 328.
4. Skripnyak V.A., Skripnyak E.G., Nazarov M.N. Mechanical behaviour of nanostructured materials at high strain rates. Computer simulation // Shock Compression of Condensed Matter. Ed. Furnish M.D., Elert M.L., Russel T.P., White C.T. N.Y.: AIP, 2005. P. 503 – 506.
5. Evans A.G., Cannon R.M. Toughening of brittle solids by martensitic transformation. Overview No 48 // Acta Metall. 1986. V. 34. No. 5. P. 761 – 800.
6. Basu B., Vleugels J., Van Der Biest O. Transformation behaviour of tetragonal zirconia: role of dopant content and distribution // Mater. Sci. and Eng. A366. 2004. P. 338 – 347.
7. Basu B., Vleugels J., Van der Biest O. Processing and mechanical properties of ZrO₂ – TiB₂ composites // J. European Ceramic Society. 2005. V. 25. P. 3629 – 3637.
8. Zhu T., Li W., Zhang X., et. al. Damage tolerance and R-curve behavior of ZrB₂ – ZrO₂ composites // Mater. Sci. and Eng.: A. 2009. V. 516. P. 297 – 301.
9. Guimaraes F.A.T., Silva K.L., Trombini V., et. al. Correlation between microstructure and mechanical properties of Al₂O₃/ZrO₂ nanocomposites // Ceramics International. 2009. V. 35. P. 741 – 745.
10. Tuan W.H., Chen R.Z., Wang T.C., et. al. Mechanical properties of Al₂O₃/ZrO₂ composites // J. European Ceramic Society. 2002. V. 22. P. 2827 – 2833.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

СКРИПНЯК Евгения Георгиевна – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры механики деформируемого твердого тела Томского государственного университета. E-mail: skrp@ftf.tsu.ru

СКРИПНЯК Владимир Альбертович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела Томского государственного университета. E-mail: skrp@ftf.tsu.ru

КУЛЬКОВ Сергей Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры механики деформируемого твердого тела Томского государственного университета. E-mail: kulkov@academ.tsc.ru

КОРОБЕНКОВ Максим Викторович – аспирант кафедры механики деформируемого твердого тела Томского государственного университета. E-mail: korobenkov@ftf.tsu.ru

СКРИПНЯК Владимир Владимирович – студент физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: skrp@ftf.tsu.ru

Статья принята в печать 08.05.2010 г.