

УДК 539.32

Моделирование эффективных механических свойств керамик на основе градиентной теории межфазного слоя.

Соляев Ю. О.

В работе развивается градиентная континуальная модель механики материалов в приложении к материалам с высокой плотностью внутренних границ. Производится оценка эффективных свойств материалов с учётом внутренней структуры и масштабных эффектов. Предлагаемая модель основана на представлении границ внутри объёма среды в виде дополнительной фазы, в дополнении к этому учитываются особые свойства поверхностей зёрен, за счёт введения поверхностной составляющей энергии деформаций. Построенная модель учитывает как наличие переменных свойств внутри зёрен, так и масштабные эффекты, связанные с размером зёрен. Настоящее исследование касается только механических свойств, но оно автоматически распространяется на задачи теплопроводности, вследствие аналогий в постановке задач.

Керамика, эффективные свойства, межфазный слой, когезия, адгезия, градиентная модель, закон Холла-Петча

Введение.

Несмотря на усилия, направленные на экспериментальное и теоретическое изучение нанокомпозитов, актуальная проблема достоверного расчета и прогнозирования механических свойств материалов с наноструктурами в целом остается нерешенной.

В недавних работах [1-6] построена теория сред со спектром масштабных эффектов в объеме деформируемого тела и на его поверхности. Результаты этих исследований используются в данной работе для моделирования зернистых

материалов с высокой плотностью внутренних границ (например, наноструктурированные керамики). Отличительной особенностью керамических материалов, помимо зернистости, является наличие пор внутри зёрен и на межзёренных границах [7]. Размер пор связан с размером самих зёрен, а также с технологией изготовления керамики.

Задачей настоящей работы является построение модели в рамках градиентной теории упругости, позволяющей прогнозировать механические свойства керамик, с учётом размера зёрен, с учётом наличия межзёренной фазы внутри материала, обладающей собственными свойствами, а также с учётом пористости. Отметим, что существующие описания свойств мелкозернистых керамик основаны либо на экспериментальных исследованиях [8, 9], либо на прямых численных методах на основе метода конечных элементов [10, 11]. В работе [10] исследуется влияние пористости на механические свойства керамик, производится конечноэлементный расчёт пористой структуры, полученной с фотографии скола керамического образца. В некоторых работах (см. например [12]) предлагается использовать структурные модели в рамках классической теории упругости, что неизбежно сказывается на общности предлагаемых подходов.

Градиентная модель керамического материала.

В рамках подхода механики сплошных сред модель среды полностью определяется функционалом Лагранжа:

$$L = A_g - U,$$

где A_g – работа внешних сил, U – потенциальная энергии деформаций среды.

Для получения качественной оценки свойств исследуемого класса материалов с высокой плотностью внутренних границ будем использовать одномерную постановку задач. Функционал Лагранжа градиентной модели в одномерной постановке (случай растяжения прямолинейного образца в одном направлении) приведён в работе [6]:

$$L = A_g - \frac{1}{2} \int_{x_1}^{x_2} \left\{ E \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right)^2 + \frac{E^2}{C} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} \right)^2 \right\} dx - \frac{1}{2} A \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right)^2 \Big|_{x=x_1, x_2}, \quad (1)$$

где: R – перемещения точек среды; $\frac{\partial R}{\partial x}$ – деформации; $\frac{\partial^2 R}{\partial x^2}$ – градиентная составляющая энергии деформаций в объёме; E – классический модуль Юнга; C – неклассическая постоянная градиентной модели, характеризующая протяжённость межфазного слоя вблизи границ среды $l_f = tg(\sqrt{\frac{C}{E}}(x_2 - x_1)) / \sqrt{\frac{C}{E}}$ (см. [6]); A – неклассическая адгезионная постоянная, характеризующая энергию адгезионных взаимодействий на границе фазы; x_1, x_2 – граничные точки, рассматриваемой области.

Отметим, что приведённый лагранжиан сводится к классическому лагранжиану теории упругости при следующих значениях неклассических констант: $C \rightarrow \infty$ и $A = 0$:

$$L = A_g - \frac{1}{2} \int E \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right)^2 dx$$

Следуя вариационному принципу Лагранжа и интегрируя по частям, получим вариационную формулировку, градиентной модели,:

$$\delta L = 0:$$

$$\delta L = \delta A_g + \int_{x_1}^{x_2} \left\{ E \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} - \frac{E^2}{C} \frac{\partial^4 R}{\partial x^4} \right\} \delta R dx - \left(E \frac{\partial R}{\partial x} - \frac{E^2}{C} \frac{\partial^3 R}{\partial x^3} \right) \delta R \Big|_{x=x_1, x_2} - \left(\frac{E^2}{C} \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + A \frac{\partial R}{\partial x} \right) \delta \frac{\partial R}{\partial x} \Big|_{x=x_1, x_2} = 0. \quad (2)$$

Уравнение равновесия в объёме среды в (2) обладает повышенным четвёртым порядком по сравнению с классической моделью. При этом возникают естественные граничные условия двух типов. Первый тип – классические граничные условия при

вариации перемещений, которые по своему смыслу являются условием непрерывности классических напряжений [6]. Второй тип – это моментные статические граничные условия при вариации производной от перемещений. Заметим, что в одномерной постановке, слагаемое, отвечающее за адгезию, входит именно во второй неклассический тип граничных условий.

Далее определим геометрию рассматриваемой среды (см. рис 1.). Будем рассматривать внутреннюю структуру материала как двухфазную, состоящую из фазы керамических зёрен и межзёренной фазы. Будем предполагать, что поверхности зёрен обладают собственными свойствами, которые определяются, в рамках настоящей модели, параметром адгезии A (см. (1)). Добавление этого параметра позволит учесть явления адгезии, повреждённости или неспекания на поверхности зёрен. Для определения эффективного модуля Юнга фрагмента, зададим на его концах растягивающую единичную силу.

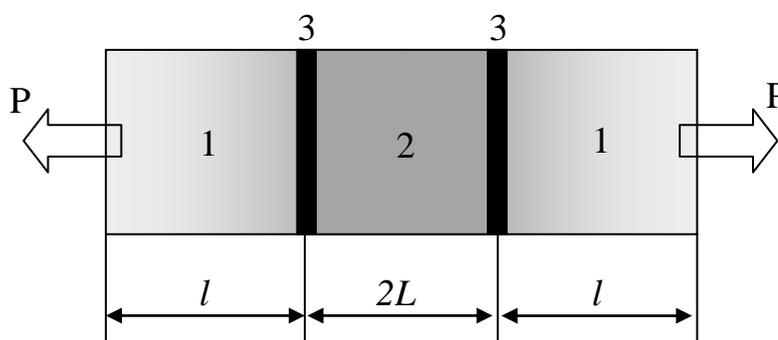


Рис.1. Двухфазный представительный фрагмент с учётом собственных свойств поверхности зёрен.(1: фаза керамических зёрен, 2: межзёренная фаза, 3: поверхности зёрен; $2L$ – ширина межзёренной фазы, l – размер зёрен, P – внешняя сила).

Лагранжиан предложенной двухфазной модели керамики, с учётом симметрии представительного фрагмента имеет вид:

$$L = A_g - U_1 - U_2 - U_f,$$

где U_1, U_2 - потенциальная энергия деформирования первой и второй фазы:

$$U_i = \frac{1}{2} \int \left\{ E_i \left(\frac{\partial R_i}{\partial x} \right)^2 + \frac{E_i^2}{C_i} \left(\frac{\partial^2 R_i}{\partial x^2} \right)^2 \right\} dx, \quad (i=1,2)$$

U_f - потенциальная энергия адгезионных взаимодействий на поверхности зёрен:

$$U_f = \frac{1}{2} \bar{A} \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right)^2 \Big|_{x=L}$$

$\bar{A} = A_1 - A_2$ - параметр адгезии контактной задачи, являющийся разностью параметров, отвечающих за адгезию каждой из фаз.

Используя одномерную постановку градиентной модели (2), запишем краевую контактную задачу для рассматриваемого представительного фрагмента:

Уравнения внутри фаз:

$$\begin{aligned} 0 < x < L: \quad E_1 \frac{\partial^2 R_1}{\partial x^2} - \frac{E_1^2}{C_1} \frac{\partial^4 R_1}{\partial x^4} &= 0 \\ L < x < L+l: \quad E_2 \frac{\partial^2 R_2}{\partial x^2} - \frac{E_2^2}{C_2} \frac{\partial^4 R_2}{\partial x^4} &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Граничные условия:

$$x = 0:$$

$$E_1 \frac{\partial R_1}{\partial x} - \frac{E_1^2}{C_1} \frac{\partial^3 R_1}{\partial x^3} = 1, \quad \frac{E_1^2}{C_1} \frac{\partial^2 R_1}{\partial x^2} + \bar{A} \frac{\partial R_1}{\partial x} = 0,$$

$$x = L:$$

$$R_1 = R_2, \quad R_1' = R_2',$$

$$E_1 \frac{\partial R_1}{\partial x} - \frac{E_1^2}{C_1} \frac{\partial^3 R_1}{\partial x^3} = E_2 \frac{\partial R_2}{\partial x} - \frac{E_2^2}{C_2} \frac{\partial^3 R_2}{\partial x^3},$$

$$\frac{E_1^2}{C_1} \frac{\partial^2 R_1}{\partial x^2} + \bar{A} \frac{\partial R_1}{\partial x} = \frac{E_2^2}{C_2} \frac{\partial^2 R_2}{\partial x^2}, \quad (4)$$

$$x = L+l:$$

$$E_2 \frac{\partial R_2}{\partial x} - \frac{E_2^2}{C_2} \frac{\partial^3 R_2}{\partial x^3} = 1, \quad \frac{E_2^2}{C_2} \frac{\partial^2 R_2}{\partial x^2} + \bar{A} \frac{\partial R_2}{\partial x} = 0.$$

Для упрощения модели будем считать, что когезионные параметры фаз равны друг другу ($C_1 = C_2$). Это допущение является оправданным, если считать, что градиентный параметр $C = C_1 = C_2$ характеризует область, прилежащую к границе среды (межфазный слой), который распространяется на обе фазы материала.

Решение краевой задачи (3)-(4) позволяет найти распределение перемещений, деформаций и напряжений. Эффективный модуль упругости среды \mathcal{E} определяется по методу асимптотического усреднения. Для рассматриваемой модели это дает следующее выражение для \mathcal{E} (см. [6]):

$$\mathcal{E} = \frac{E_1 E_2 (E_1 \alpha_2 + E_2 \alpha_1 - A \alpha_1 \alpha_2)}{Q} (L + l), \quad (5)$$

где: $\alpha_2 = \frac{\kappa_2}{\text{th}(\kappa_2 L)}$, $\alpha_1 = \frac{\kappa_1}{\text{th}(\kappa_1 l)}$, $\kappa_1 = \sqrt{C/E_1}$, $\kappa_2 = \sqrt{C/E_2}$,

$$Q = (E_2 l + E_1 L + A)(E_1 \alpha_2 + E_2 \alpha_1 - A \alpha_1 \alpha_2) - (E_1 - E_2 - A \alpha_1)(E_1 - E_2 + A \alpha_2).$$

По своему физическому смыслу величины κ_1 и κ_2 характеризуют ширину межфазного слоя (протяжённость когезионного поля) l_1 и l_2 в материале матрицы и включения соответственно:

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= l_1^{-1} = \sqrt{C/E_1} \\ \kappa_2 &= l_2^{-1} = \sqrt{C/E_2} \end{aligned}$$

Можно показать [6], что формула (5) при $C \rightarrow \infty$ сводится к классической формуле Рейса для расчёта эффективного модуля. Это соответствует случаю, когда в материале не происходит изменения морфологии фаз, то есть отсутствует межфазный слой.

Примеры расчётов и обсуждение результатов.

Далее продемонстрируем возможность моделирования свойств реальных керамических материалов, с учётом размера зерна.

Будем рассматривать керамический материал на основе оксида алюминия (Al_2O_3), модуль Юнга которого составляет $E_1 = 400$ ГПа при размере зёрен порядка 10 мкм. Концентрация межзёренной фазы f не превышает обычно одного процента, а размер зёрен достигает порядка 10^{-9} метра.

В результате расчетов на основании выражения (5) были получены следующие зависимости эффективного модуля Юнга материала от размера зёрен:

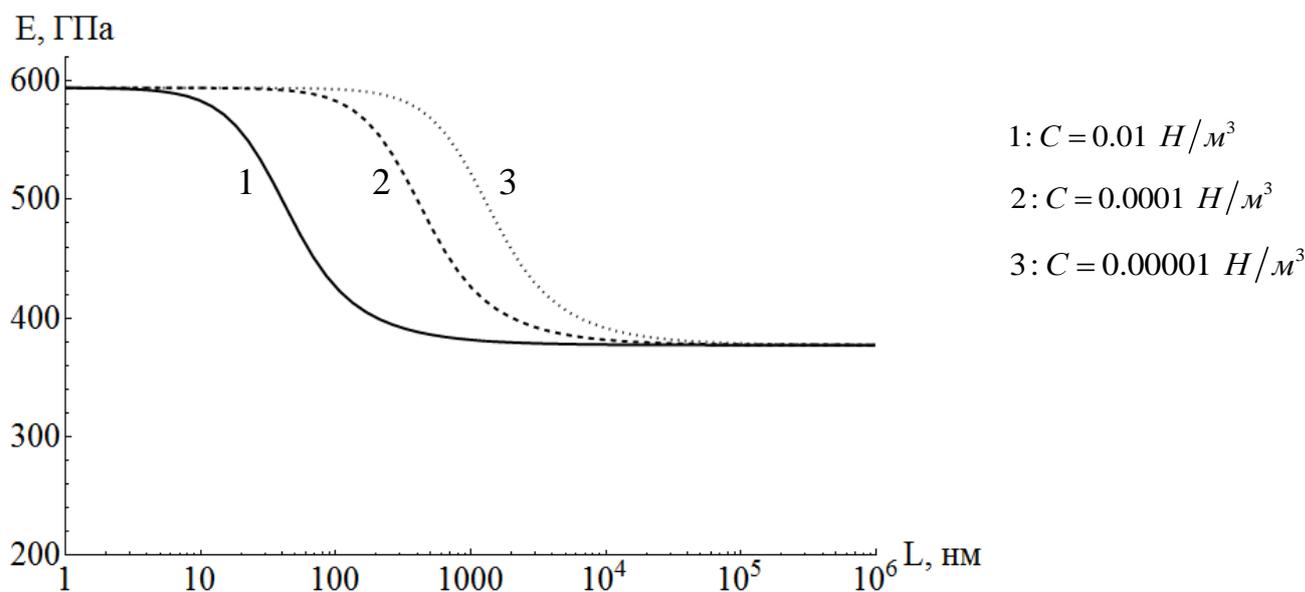


Рис.2: Увеличение эффективного модуля Юнга при уменьшении размера зёрен.

Как видно из рисунка 2, модель прогнозирует увеличение модуля Юнга при уменьшении размера зёрен. Начиная с некоторого размера зерна, порядка 10 нм (график 1), значение эффективного модуля выходит на асимптоту и дальнейшее измельчение структуры не вносит никаких изменений. При этом, в случае более широкого межфазного слоя (графики 2, 3), выход на асимптоту происходит раньше (при размере зёрен порядка 100 нм и 1 мкм, соответственно).

В рамках предложенной модели при учёте адгезии возможно прогнозирование известного эффекта аналогичного эффекту отклонения от закона Холла-Петча при уменьшении размера зёрен в материале. Обычно этот эффект реализуется в наноструктурных материалах. На рисунке 3 показан этот эффект возрастания, а

затем падения модуля Юнга при уменьшении размера зёрен для керамики на основе Al_2O_3 .

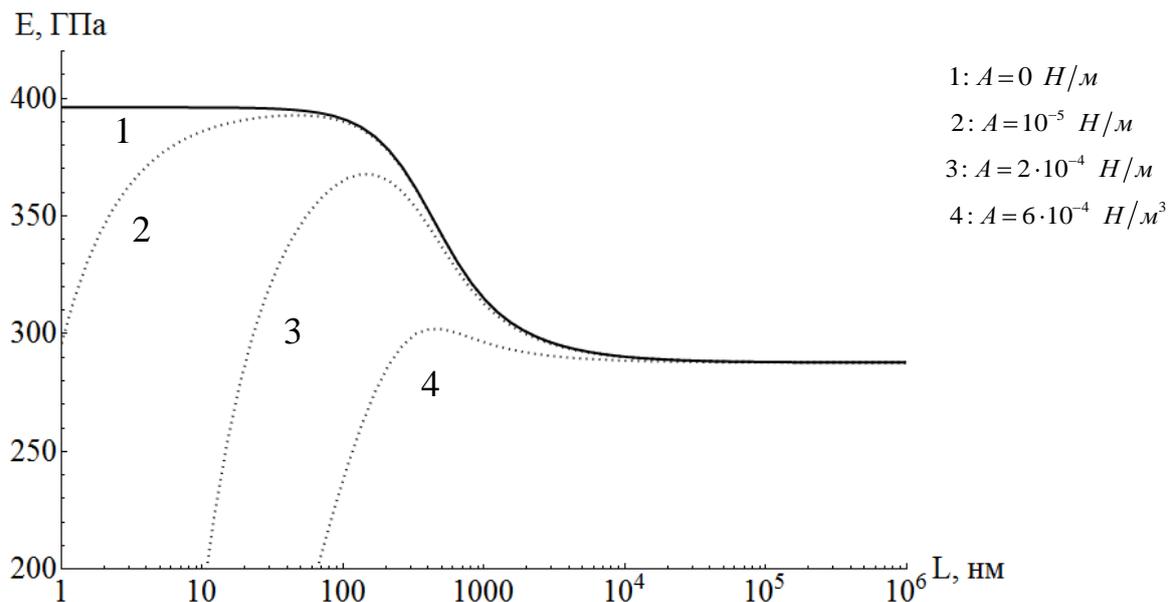


Рис. 3: Зависимость эффективного модуля Юнга от размера зёрен керамического материала при различных значениях параметра адгезии.

Графики, аналогичные представленным на рисунке 3, но полученные экспериментально, могут быть использованы для определения диапазонов градиентного параметра C и параметра адгезии A .

При помощи параметра адгезии A моделируется повреждённость границ зёрен, поэтому при измельчении структуры керамики (то есть при увеличении концентрации границ в материале) происходит падение модуля Юнга.

Создание мелкозернистых (наноструктурированных) керамик является сложной технологической задачей. В статье [13] приведены экспериментальные данные по керамикам, размер зёрен в которых измельчался до 100 нм. Проведённые расчёты по предложенной модели согласуются с результатами этих экспериментов (рис. 4).

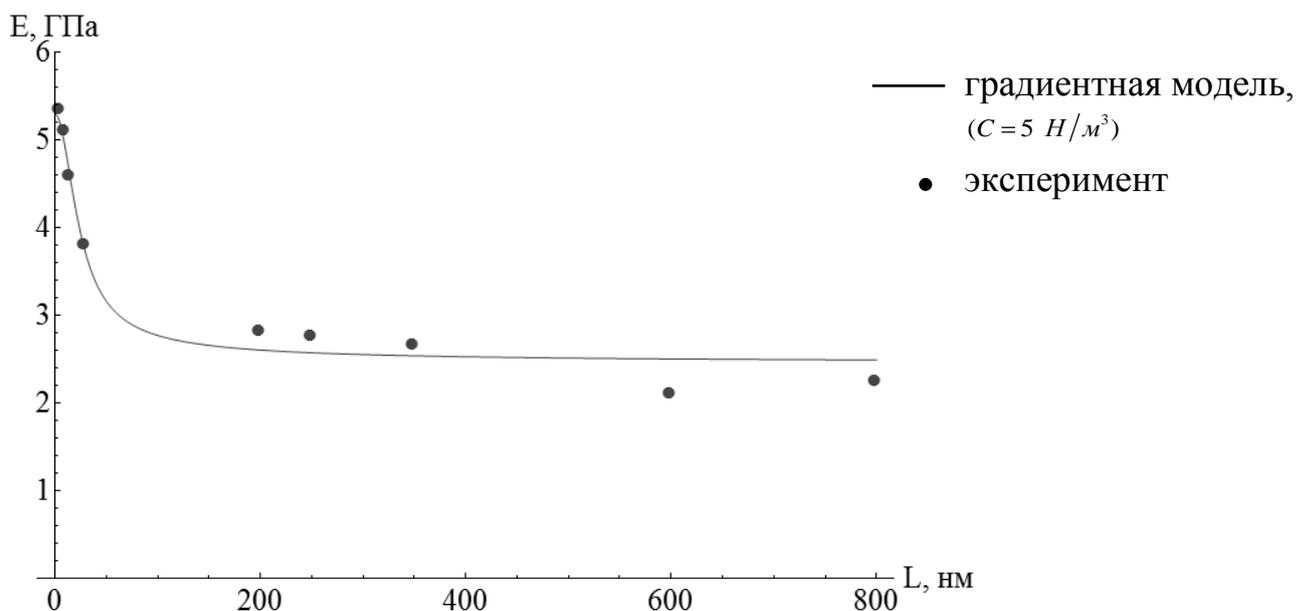


Рис. 4. Изменение модуля Юнга керамики на основе Al_2O_3 с содержанием оксида алюминия более 99.8% [12].

Выводы.

Предложенная модель позволяет моделировать известные эффекты увеличения модуля при уменьшении размера зерна, на примере керамики на основе Al_2O_3 . Модель основана на представлении керамики, как двухкомпонентной среды, в которой межзёренный слой рассматривается, как дополнительная фаза с малой концентрацией. Каждая из фаз при этом рассматривается в рамках градиентной модели, учитывающей масштабные эффекты. В результате удаётся подобрать характеристики фаз межзёренного слоя, чтобы объяснить эффект влияния размера зерна на модуль упругости.

Для керамик со сверхмалым размером зерна (наноразмерные уровни керамик) моделируется эффект возможного уменьшения модуля упругости керамики при уменьшении размера зерна, что соответствует аномальному проявлению закона Холла-Петча для наноструктурированных сред.

В результате продемонстрирована эффективность использования градиентных моделей для описания механических свойств на примере таких микро- и наноструктурированных сред, как керамики.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 09-01-13533-офиц, 09-01-00060.

Библиографический список:

1. Лурье С.А., Белов П.А. Вариационная формулировка математических моделей сред с микроструктурами. Сборник «Математическое моделирование систем и процессов», 2006, 14, 114-132.
2. Lurie S., Belov P., Volkov-Bogorodsky D., Tuchkova N. Interphase layer theory and application in the mechanics of composite materials. International Journal of Materials Science, 2006, 41(20), 6693-6707.
3. Белов П.А., Лурье С.А. Теория идеальных адгезионных взаимодействий. Механика композиционных материалов и конструкций, 2007, 13(3), 23-32.
4. Лурье С.А., Белов П.А., Соляев Ю.О. Сборник научных трудов «Математическое моделирование систем и процессов», 2008 г., 16, 75-85.
5. Lurie S, Belov P, Volkov-Bogorodsky D, Multiscale Modeling in the Mechanics of Materials: Cohesion, Interfacial Interactions, Inclusions and Defects. Analysis and Simulation of Multifield Problems, 2003, 12, 101-110.
6. Лурье С.А., Дудченко А.А, Введение в механику нанокомпозитов, Москва: МАИ, 2009, 160 с.
7. Балкевич В.Л., Техническая керамика: учебное пособие для втузов. Москва: Стройиздат, 1984, 256 с.
8. Панин С.В., Любутин П.С., Любакова С.П., Кульков С.Н., Исследование поведения пористой керамики при одноосном сжатии путём расчёта мезоскопических деформационных характеристик, Физическая мезомеханика, 11(6), 2008, 77-86.
9. Sung-Soo Ryu, Hyung-Tae Kim, Hyeong Jun Kim, Seongwon Kim, Characterization of mechanical properties of BaTiO₃ ceramic with different types of sintering aid by nanoindentation, Journal of the Ceramic Society of Japan, 2009, 117 (7), 811-814.

10. Килина О.В., Килин П.С., Кульков С.Н., Моделирование деформационного поведения пористой керамики, Физическая мезомеханика, 2002, 5(4), 47-53.
11. Kyung Soon Jang et al, Mechanical behavior of SiC_f reinforced SiC composites with fiber coating – Stress alleviation in SiC fiber by soft coating layer, Journal of the Ceramic Society of Japan, 2009, 117 (5), 582-587.
12. П. И. Краснощеков, А. Ф. Федотов, Упругие модули изотропных порошковых и пористых материалов, Вестник Самарского государственного университета (серия физико-математические науки), 2006, 43, 81–87.
13. И.Г. Орлова, Р.Е. Миркина, Влияние микроструктуры на жёсткость корундовой керамики, Огнеупоры, 1964, 8, 378-380.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

Соляев Юрий Олегович аспирант Московского авиационного института (государственного технического университета), г. Москва ул. Вавилова, д. 40, (499)1356190, juri86@bk.ru