

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКОГО  
НАНОКОМПОЗИТА С РАЗЛИЧНЫМИ СТРУКТУРНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ ПРИ  
МЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ**

И.С. Коноваленко<sup>1,2</sup>, Е.М. Водопьянов<sup>1</sup>, Е.В. Шилько<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

<sup>2</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Россия, г.Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

<sup>3</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: [iskonovalenko@tpu.ru](mailto:iskonovalenko@tpu.ru)

**NUMERICAL INVESTIGATION OF DEFORMATION AND FRACTURE OF CERAMIC  
NANOCOMPOSITES WITH DIFFERENT STRUCTURAL PARAMETERS UNDER  
MECHANICAL LOADING**

I.S. Konovalenko, <sup>1</sup>E.M. Vodopjyanov, <sup>3</sup>E.V. Shilko

<sup>1</sup>Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 30, 634050

<sup>2</sup>Institute of Strength Physics and Materials Science, Tomsk, pr. Akademicheskii 2/4, 634055

<sup>3</sup>Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 36, 634050

E-mail: [iskonovalenko@tpu.ru](mailto:iskonovalenko@tpu.ru)

*Deformation, fracture and effective mechanical properties of ceramics composite under uniaxial compression were studied. To perform this investigation the plain model of ceramics composites based on oxides of zirconium and aluminum with different structural parameters was developed within the frame of movable cellular automaton method. The structure of model composite was generated on the basis of scanning electron microscope images of micro-sections of real composite. The influence of such structural parameters as geometrical dimensions of layers, inclusions, and their spatial distribution in the sample, volume content of the composite components and their mechanical properties, as well as the amount of zirconium dioxide undergone the phase transformation on the mechanical response were investigated.*

В рамках метода подвижных клеточных автоматов (МКА) [1] реализована 2D модель механического поведения керамического композита на основе нанокристаллического  $ZrO_2(Y_2O_3)$ , упрочненного волокнами  $Al_2O_3$  при одноосном сжатии. В модели реализована возможность качественного и количественного учета тетрагонально-моноклинного ( $T-M$ ) перехода в матрице композита, и связанного с ним замедления роста повреждений и трещин в материале в процессе механического нагружения.

Генерировались композиты с различными параметрами внутренней структуры (и значениями этих параметров), такими как объемное содержание компонентов, размер включений и прослоек (структурных элементов), а также удельным количеством (долей) материала матрицы, претерпевающей фазовые превращения в процессе механического нагружения ( $\Omega$ ). Модельные образцы с двумя характерными размерами включений  $L$  (наполнителя) и прослоек  $H$  (матрицы) были сгенерированы на

## «ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК»

основе анализа структуры реального композита (по SEM изображениям, см. [2]). Структура композита на мезоуровне учитывалась в модели явным образом (Рис. 1). В случае мелких включений и толстых прослоек их размеры составляли  $L=2$  мкм и  $H=6$  мкм, объемное содержание наполнителя  $\Psi=0.3$  (Рис. 1,а). В случае крупных включений и тонких прослоек –  $L=6$  мкм и  $H=2$  мкм,  $\Psi=0.7$  (Рис. 1,з). Размер стороны квадратного образца составлял 32 мкм, размер подвижного клеточного автомата – 0.2 мкм. На границах раздела между компонентами задавались условия идеального контакта.

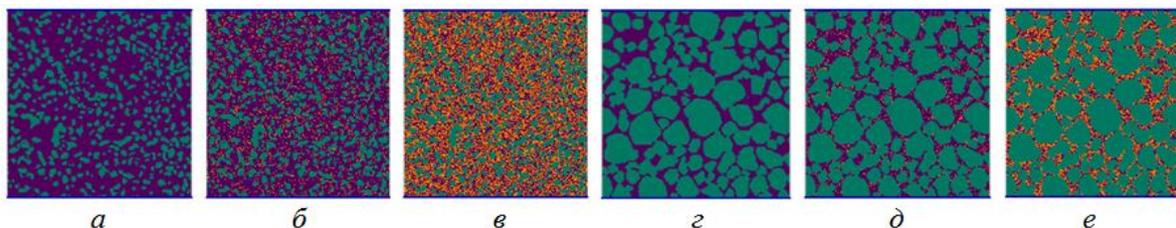


Рис. 1. Начальная структура модельного композита  $ZrO_2(Y_2O_3)-Al_2O_3$  с параметрами структуры: а,б,в)  $\Psi=0.3$ ,  $L=2$  мкм,  $H=6$  мкм; з,д,е)  $\Psi=0.7$ ,  $L=6$  мкм,  $H=2$  мкм, а,з)  $\Omega=0$ ; б,д)  $\Omega=0.1$ ; в,е)  $\Omega=0.5$ .

Расчеты проводились для композита как с обычной матрицей, для которой характерно хрупкое разрушение, так и с демпфирующей, способной к  $T$ - $M$  перестройкам. Объемная доля матрицы претерпевающей перестройки  $\Omega$  в процессе нагружения задавалась явно и составляла 0.1 (Рис. 1,б,д) и 0.5 (Рис. 1,в,е) [2]. Реализация ( $T$ - $M$ ) методе МСА осуществлялась на основе феноменологического подхода, суть которого состояла в формулировке закона необратимого поведения материала. Функции отклика автоматов, соответствовали диаграммам деформирования рассматриваемых материалов [2]. Для автоматов керамики  $Al_2O_3$  и  $ZrO_2(Y_2O_3)$  в ( $T$ )-состоянии они соответствовали упругому поведению материала. Функция отклика автоматов  $ZrO_2(Y_2O_3)$  в ( $M$ )-состоянии содержала участок необратимого поведения, с более низким значением упругого модуля и прочности (чем в ( $T$ )-состоянии) [2]. Таким образом, до некоторого значения интенсивности напряжений (125 МПа) в паре автоматов  $ZrO_2(Y_2O_3)$  в ( $T$ ) и ( $M$ )-состоянии, их поведение, определяемое функцией отклика, одинаково. При превышении этого значения – различно. Это соответствует инициации ( $T$ - $M$ ) при этой величине сдвиговых напряжений.

Увеличение вязкости разрушения керамики при реализации в ней ( $T$ - $M$ ) перехода учтено в модели посредством введения кинетики перехода пары автоматов из «связанного» в состояния «несвязанное». Для этого в МСА был явно введен параметр скорости распространения трещины, позволяющий замедлить переход пары в «несвязанное» состояние на несколько временных шагов. Обычно в методе МСА такой переход происходит за один временной шаг, что соответствует распространению трещины со скоростью звука. В модели (у пар автоматов моделирующих  $T$ - $M$  переход) величина скорости распространения трещины была меньше скорости звука в материале и составляла 0.735 м/с. Таким образом, для описания разрушения материала претерпевающего ( $T$ - $M$ ) переход в модели реализован режим контролируемого роста трещин, для остальных материалов – режим неконтролируемого роста.

Анализ диаграмм нагружения композитов показал, что увеличение  $\Omega$  (от 0 до 0.5) приводит к росту энергии разрушения ( $E_{fr}$ ), предела прочности ( $\sigma_b$ ) и предельной деформации ( $\epsilon_c$ ) материала. Так, у композитов с объемным содержанием наполнителя  $\Psi=0.3$  (Рис. 1,а,б,в) это увеличение составило: 287% для  $E_{fr}$ , 38% для  $\sigma_b$  и 117% для  $\epsilon_c$ . У композитов с  $\Psi=0.7$  (Рис. 1,з,д,е) соответствующее увеличение наблюдается только для  $E_{fr}$  на 234% и для  $\epsilon_c$  – на 218%. Сравнение диаграмм нагружения образцов с различными значениями  $\Psi$ , но одинаковыми значениями  $\Omega$  показало, что диссипативные, прочностные и

## «ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК»

деформационные свойства образцов с  $\Psi=0.3$  больше, чем у образцов с  $\Psi=0.7$ . С увеличением  $\Omega$  данная разница становится более выраженной. Таким образом, увеличение объемного содержания матрицы ( $1-\Psi$ ) и ее доли, испытывающей  $T$ - $M$  переход ( $\Omega$ ), в рассматриваемом диапазоне этих параметров приводит к росту прочностных, деформационных диссипативных свойств композита.

Исследование влияния структурных параметров  $\Psi$ ,  $\Omega$ ,  $L$  и  $H$  на разрушение композитов проводилось на основе анализа сеток межэлементных связей модельных образцов, некоторые из которых представлены на (Рис. 2). Изучение таких сеток при различных величинах относительной деформации образцов выявило, что  $T$ - $M$  переход в структуре керамики  $ZrO_2(Y_2O_3)$  приводит к замедлению роста повреждений и трещин в композите. С увеличением  $\Omega$  данная тенденция усиливается. На сетках межэлементных связей это выражается в более позднем по деформации моменте развития в них трещин.

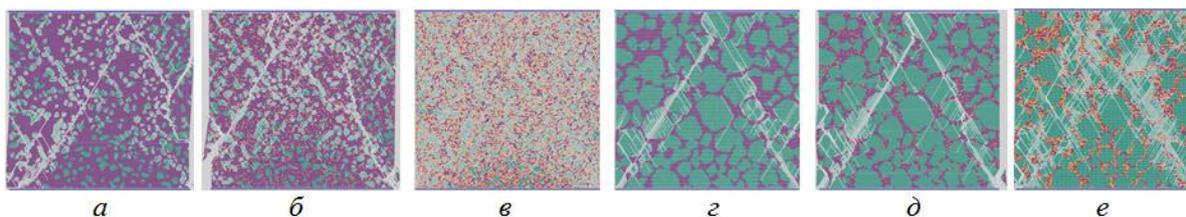


Рис. 2. Разрушение модельного композита  $ZrO_2(Y_2O_3)-Al_2O_3$  с различными параметрами структуры в момент развития макротрещин при одноосном сжатии: а,б,в)  $\Psi=0.3$ ,  $L=2$  мкм,  $H=6$  мкм; б,д,е)  $\Psi=0.3$ ,  $L=6$  мкм,  $H=2$  мкм. а,з)  $\Omega=0$ ; б,д)  $\Omega=0.1$ ; в,е)  $\Omega=0.5$ .

Анализ картин разрушения образцов (Рис. 2) выявил два характерных механизма замедления локального растрескивания матрицы ( $T\_ZrO_2(Y_2O_3)$ ) и наполнителя ( $Al_2O_3$ ) композита, связанных со структурными параметрами  $L$  и  $H$ . Так, в случае композита с мелкими включениями и толстыми прослойками ( $L=2$  мкм и  $H=6$  мкм) распространение макротрещины замедляется на хрупких включениях ( $Al_2O_3$ ) и продолжается после их частичного или полного разрушения (Рис. 2,а,б,в). В случае композита с большими включениями и тонкими прослойками ( $L=6$  мкм и  $H=2$  мкм) повреждения до некоторого момента локализуются в частицах наполнителя, чем замедляют развитие разрушающей макротрещины в образцах (Рис. 2,з,д,е). Во всех случаях, разрушение наполнителя и матрицы является дополнительным путем диссипации энергии механического нагружения.

На основе результатов моделирования можно заключить, что механическое поведение керамических композитов определяется комбинацией взаимосвязанных факторов. В частности показано, что разрушение, прочностные, деформационные и диссипативные характеристики керамических композитов определяются степенью неоднородности их структуры (геометрическими размерами прослоек, включений, и их пространственным распределением в материале), объемным содержанием компонентов композита и их механическими свойствами. Фазовые превращения в структуре диоксида циркония играют особую роль в механическом поведении изучаемого композита.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Global Roadmap for Ceramics / Ed. by A. Belosi, G.N. Babini. - Institute of Science and Technology for Ceramics, National Research Council, Verona, 2008.
2. 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 // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 3. – С. 27-54.