

УДК 539.3:539.4

*Иг. С. Коноваленко, Ч. О. Токтохоев, Ив. С. Коноваленко, А. Ю. Смолин*  
**Изучение механических свойств керамических композитов с разным объемом пластичного наполнителя\***

*Ig. S. Konovalenko, Ch. O. Toktohoev, Iv. S. Konovalenko, A. Yu. Smolin*  
**Study of Mechanical Properties of Ceramic Composites with Different Volume of Plastic Filler**

В рамках концепции многоуровневого подхода численно исследован механический отклик хрупкого материала с иерархической структурой порового пространства, содержащего пластичный наполнитель, при сдвиговом нагружении. На основе дискретного способа описания среды, используя метод подвижных клеточных автоматов, построена двухмерная модель механического поведения керамического композита с различной величиной пористости и долей пор, содержащих наполнитель. В качестве наполнителя композита рассматривался материал, соответствующий кортикальной кости по упругим и прочностным свойствам, диаграмма нагружения которого характеризуется билинейным упрочнением. Модельный материал матрицы композита соответствовал нанокристаллической керамике  $ZrO_2 (Y_2O_3)$  со средним размером пор, превосходящим средний размер зерна и бимодальной функцией распределения пор по размерам. Пористость керамики варьировалась в интервале от 0.225 до 0.345, доля пор, содержащих наполнитель, — от 0 до 1. Величина пористости, соответствующей порам с размером первого пика функции распределения, составляла 0.085. На основе проведенных расчетов построено выражение для аналитической оценки зависимости прочностных и упругих свойств композита при сдвиге от его общей пористости и доли пор, содержащих наполнитель.

**Ключевые слова:** керамические композиты, механические свойства, численное моделирование, метод подвижных клеточных автоматов.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-45

На основе построенных ранее в рамках метода подвижных клеточных автоматов многоуровневых моделей [1–4] в данной работе проведено исследование прочностных и упругих свойств керамических композитов с разной степенью заполнения их порового пространства пластичным наполнителем при сдвиговом нагружении. Для численных исследований сгенерирован модельный материал, механические свойства

A mechanical response of a brittle material under shear loading was numerically investigated within the concept of a multilevel approach. The material was considered to have hierarchical porous structure with a plastic filler. A two-dimensional model of mechanical behavior of ceramic composites with different porosity and filler-containing pore fraction was developed on the basis of a discrete medium approach and a movable cellular automaton method. Model calculations were carried out for a composite filled with plastic material with elastic and strength properties of cortical bone. A loading diagram of the filler was described by bilinear hardening. Ceramic composite matrix had mechanical properties of nanocrystalline  $ZrO_2 (Y_2O_3)$  (yttria-stabilized zirconia) with bimodal distribution function of pore sizes and an average pore size greater than average grain size. Variations of ceramic porosity were between 0.225 and 0.345, and filler-containing pore fraction — between 0 and 1.

The value of porosity corresponding to pores with a size of the first peak of the distribution function was 0.085. Numerical calculations provided the basis for an analytical evaluation of dependencies of shear strength and elastic modulus on total porosity and fraction of pores with a filler.

**Key words:** ceramic composites, mechanical properties, numerical simulation, movable cellular automaton method.

которого соответствуют нанокристаллической керамике  $ZrO_2 (Y_2O_3)$  со средним размером пор, превосходящим средний размер зерна. Функция распределения пор по размерам этой керамики содержала два четко выраженных пика. Общая пористость керамики  $C_t$  изменялась от 0.225 до 0.345. Пористость, связанная с первым пиком  $C_1$ , составляла 0.085%, со вторым пиком  $C_2$  изменялась от 0.14 до 0.26. Средний размер

\* Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ (проект №12-08-33099-мол-а-вед).

пор второго пика составлял 210 мкм [5]. Для краткости изложения описание модельной системы и результаты расчетов приведены только для мезоскопического масштабного уровня, поскольку именно на нем поры (соответствующие второму пику функции распределения пор по размерам) материала содержат наполнитель и его влияние на отклик наиболее выражено.

В качестве наполнителя композита использовался модельный пластичный материал с функцией отклика, соответствующей диаграмме нагружения с билинейным упрочнением. Функция отклика автоматов матрицы композита соответствовала диаграмме нагружения керамики  $ZrO_2$  ( $Y_2O_3$ ) с величиной пористости 0.085. Модуль упругости для клеточного автомата наполнителя  $E_{нап}$  составлял 20 ГПа, коэффициент Пуассона  $\nu_{нап} = 0.31$ , предел упругости  $\sigma_{т.нап} = 123$  МПа, предел прочности  $\sigma_{с.нап}$  и соответствующая ему деформация  $\epsilon_{с.нап}$  составляли 135 МПа и 0.03. Для модельной керамики —  $E_{кер} = 105$  ГПа,  $\nu_{кер} = 0.3$ ,  $\sigma_{с.кер} = 780$  МПа и  $\epsilon_{с.кер} = 0.74\%$ . На границе раздела матрицы и включений модельного композита приняты условия идеального контакта.

Были сгенерированы три группы плоских пористых модельных образцов с величиной  $C_2 = 0.14, 0.2$  и  $0.26$  соответственно. Каждая группа содержала 64 образца с одинаковыми размерами. Форма образцов соответствовала прямоугольному параллелепипеду. Длина образцов в два раза превосходила

их высоту и равнялась 8.4 мм. Каждая группа была разделена на восемь подгрупп. Каждая подгруппа включала в себя восемь образов, с одинаковым содержанием пластичного наполнителя, но индивидуальным расположением пустот (или пустот заполненных наполнителем) в образце. Заполнение пустот наполнителем проводилось по всей длине образца на одинаковую глубину от его верхней поверхности. Степень заполнения пор наполнителем характеризовалась относительной частью высоты образца  $\chi$ , где поры были заполнены. Рассматривались образцы, у которых  $\chi$  составляло 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8, 1.

В рамках модели полагалось, что все пустоты реального материала характеризуются одинаковой морфологией (равноосные), с одним и тем же размером — 210 мкм. Поровая структура модельных образцов, соответствующая второму максимуму гистограммы распределения пор по размерам, задавалась явно — путем удаления автоматов из их начальной плотной упаковки, заполнение пор наполнителем — помещением автоматов с соответствующими свойствами в поры. Размер автомата на данном масштабном уровне модели составлял 70 мкм. Его выбор определялся геометрическими параметрами представительного объема керамики на предшествующем масштабе модели. Начальная структура модельных композитов представлена на рисунке 1.

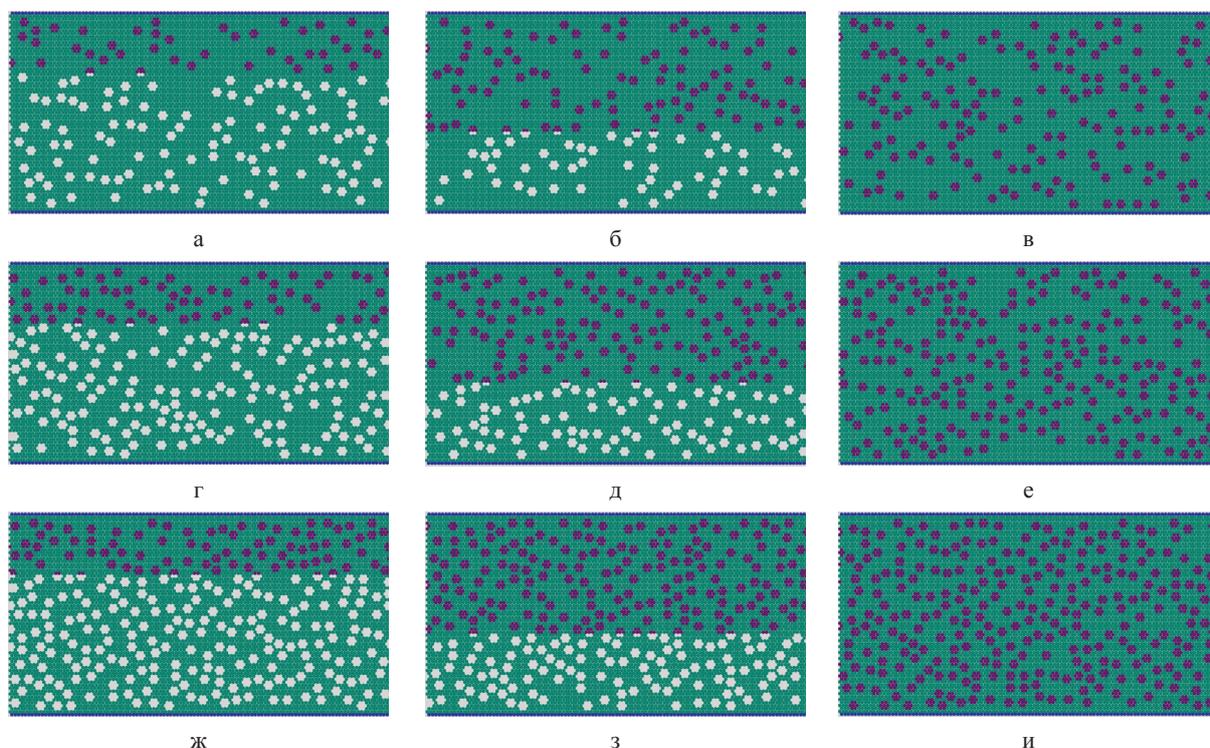


Рис. 1. Начальная структура модельных образцов с различной величиной пористости  $C_2$  (а, б, в. — 0.14; г, д, е — 0.2; ж, з, и — 0.26) и степенью заполнения их пластичным наполнителем  $\chi$  (а, г, ж — 0.3; б, д, з — 0.6; в, е, и — 1)

Сдвиговая прочность образца  $\tau$  соответствовала максимальному значению его удельной силы сопротивления нагружению. Упругие свойства определялись эффективным модулем сдвига образцов  $G$ . Для каждой комбинации значений ( $C_2$  и  $\chi$ )  $\tau$  и  $G$  определялись на основе диаграмм нагружения серии из восьми образцов (внутри каждой подгруппы). Методика их поиска заключалась в следующем. Для каждого из восьми образцов каждой подгруппы находились его  $G_i$  и  $\tau_i$ . Величины  $G$  и  $\tau$  для каждой комбинации ( $C_2$  и  $\chi$ ) определялись

как среднее арифметическое  $G_i$  и  $\tau_i$  внутри каждой подгруппы.

Влияние наполнения пористого композита включениями на его эффективную сдвиговую жесткость ( $G$ ) и предельную величину сдвигового напряжения ( $\tau$ ) исследовалось по зависимостям  $G = G(\chi)$  и  $\tau = \tau(\chi)$ , представленным на рисунке 2. Из приведенных зависимостей следует, что прочностные и упругие свойства модельных образцов определяются как величиной  $C_2$ , так и содержанием пластичного наполнителя, характеризуемого параметром  $\chi$ .

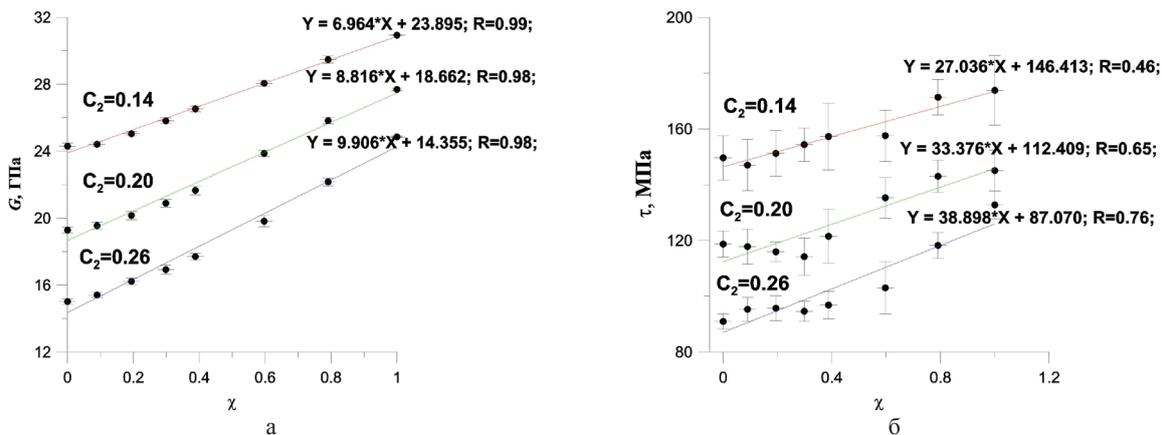


Рис. 2. Зависимость эффективного модуля сдвига  $G$  (а) и пороговой величины сдвигового напряжения  $\tau$  (б) от степени заполнения модельного пористого композита включениями с.

Из рисунка 2 можно видеть, что результаты моделирования хорошо аппроксимируются линейными функциями вида

$$Y = KX + B. \quad (1)$$

Здесь  $K$  и  $B$  есть параметры, приобретающие каждый свое значение в зависимости от величины  $C_2$ , т. е.  $K = K(C_2)$  и  $B = B(C_2)$ , а  $X = \chi$ ,  $0 \leq X \leq 1$ . Таким образом, при выбранных параметрах поровой структуры образцов и условиях их нагружения  $\tau = \tau(C_2, \chi)$  и  $G = G(C_2, \chi)$ .

Одним из путей поиска зависимостей  $K = K(C_2)$  и  $B = B(C_2)$  является проведение серии расчетов по определению  $\tau$  и  $G$  для образцов с различными значениями  $C_2$  и  $\chi$  из рассматриваемого диапазона. Однако этот путь требует значительных вычислительных ресурсов. В связи с этим был предложен другой способ поиска  $K = K(C_2)$  и  $B = B(C_2)$ .

Суть предлагаемого подхода для нахождения оценки зависимостей  $K = K(C_2)$  и  $B = B(C_2)$  состоит в их аппроксимации по минимальному количеству точек и последующей проверке этих аппроксимаций для произвольно выбранных значений. Простейший вид нелинейной зависимости можно оценить по трем характерным точкам из рассматриваемого диапазона. Рассмотрим его на примере прочностных свойств.

Поэтому по трем точкам  $(K; C_{2i}) = (27.04 \text{ МПа}, 0.14)$ ,  $(33.38 \text{ МПа}, 0.2)$ ,  $(38.9 \text{ МПа}, 0.26)$  и  $(B; C_{2i}) = (146.41 \text{ МПа}, 0.14)$ ,  $(112.41 \text{ МПа}, 0.2)$ ,  $(87.07 \text{ МПа}, 0.26)$ , удовлетворяющим искомым зависимостям, были подобраны аппроксимирующие их функции, тем самым определяя вид зависимостей  $K = K(C_2)$ ,  $B = B(C_2)$  и, соответственно,  $Y = Y(C_2, \chi)$ .

Продолав эти выкладки, находим искомые аналитические зависимости для оценки прочностных (2) и упругих (3) свойств модельного композита с различными параметрами  $C_2$  и  $\chi$ :

$$\tau = 85.9 \cdot \chi \cdot C_2^{0.588} + 268.082 \cdot e^{-4.331C_2}; \quad (2)$$

$$G = (4.778 \cdot \ln(C_2) + 16.402) \cdot \chi - 15.398 \cdot \ln(C_2) - 6.303, \quad (3)$$

где  $0.14 \leq C_2 \leq 0.26$ ,  $0 \leq \chi \leq 1$ .

Проведение тестовых расчетов для композитов со значениями параметров  $C_2$  и  $\chi$  из указанного диапазона показало хорошее количественное соответствие результатов моделирования полученным аналитическим оценкам (2) и (3).

Таким образом, в данной работе предложен вычислительно-аналитический подход к оценке прочностных и упругих свойств хрупких пористых композитов

с различным содержанием пластичного наполнителя. Такой подход может быть использован как для оценки механических свойств уже существующих хруп-

ких материалов с известными параметрами поровой структуры, так и для поиска оптимального их сочетания при проектировании новых материалов.

### Библиографический список

1. Псахье С. Г., Шилько Е. В., Смолин А. Ю. и др. Развитие подхода к моделированию деформирования и разрушения иерархически организованных гетерогенных, в том числе контрастных сред // Физическая мезомеханика. — 2011. — Т. 14, № 3.

2. Смолин А. Ю., Коноваленко Иг. С., Псахье С. Г. Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов // Известия Алтайского государственного университета. — 2012. — № 1/1 (73).

3. Psakhie S. G., Smolin A. Yu., Stefanov Y. P. et al. Modeling the behavior of complex media by jointly using discrete and continuum approaches // Tech. Phys. Letters. — Vol. 30. — Iss. 9.

4. Psakhie S. G., Zolnikov K. P., Kryzevich D. S. Elementary atomistic mechanism of crystal plasticity // Physics Letters A. — Vol. 367. — Iss. 3.

5. Буякова С. П. Свойства, структура, фазовый состав и закономерности формирования пористых наносистем на основе  $ZrO_2$ : дис. ... д-ра. техн. наук. — Томск, 2008.