

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»

На правах рукописи

Ваганова Ирина Константиновна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО РАЗРУШЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКИХ
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МНОГОУРОВНЕВОГО
ПОДХОДА

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук, профессор
Владимир Альбертович Скрипняк

Томск – 2014

Содержание

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1 Механическое поведение объемных керамических нанокомпозитов в квазистатических и динамических условиях нагружения.....	11
1.1 Механические свойства керамических композитов и нанокомпозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--t ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{--t ZrO}_2$	11
1.2 Структура керамических композитов и нанокомпозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--t ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{--t ZrO}_2$ на мезоскопическом уровне	21
1.3 Подходы и методы многоуровневого динамического моделирования механического поведения керамических композитов и нанокомпозитов при квазистатических и динамических нагрузках	35
2 Численное моделирование механического поведения объемных керамических композитов при интенсивных динамических нагрузках .	44
2.1 Двухуровневая модель механического поведения объемных керамических композитов с учетом структурных факторов в условиях интенсивного динамического нагружения.....	44
2.2 Численное моделирование механического поведения керамических композитов при интенсивных импульсных воздействиях с применением двухуровневой модели.....	65
2.3 Результаты решения тестовых задач. Сходимость численных решений динамических задач.....	74
3 Моделирование динамического разрушения керамических композиционных материалов на основе многоуровневого подхода	80
3.1 Моделирование динамического разрушения наноструктурных композитов с учетом влияния параметров структуры мезоскопического уровня.....	80
3.2 Исследование влияния структуры керамических композитов и нанокомпозитов на сдвиговую прочность при интенсивных импульсных воздействиях	90

3.3 Трещиностойкость композитов и нанокompозитов при интенсивных динамических воздействиях.....	101
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	114
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	116

ВВЕДЕНИЕ

Разработка авиакосмической техники, ядерных реакторов 4 поколения, энергоэффективных машин и приборов связана с использованием новых керамических композиционных материалов на основе оксидов, карбидов и боридов металлов, обладающих сочетанием высокой твердости, прочности, трещиностойкости, химической стойкости [1-4].

Особый интерес представляют тугоплавкие электропроводные композиционные материалы, включая ZrB_2 - B_4C , ZrB_2 - t ZrO_2 , ZrB_2 – Al_2O_3 и др., которые допускают механическую обработку с применением электроэрозионной и электроалмазной технологий.

Применение нанопорошков керамических соединений и новых технологий изготовления изделий и керамических композиционных материалов существенно расширило возможности варьирования фазового состава, структуры и свойств керамических композитов и нанокompозитов.

Это явилась стимулом для развития методов прогнозирования механического поведения композитов в широких условиях воздействий с учетом их фазового состава, параметров распределения частиц упрочняющих фаз, параметров поровой и зеренной структур.

Решение этой задачи представляет одну из актуальных задач механики деформируемого твердого тела.

Одним из перспективных подходов для прогнозирования механического поведения керамических композитов с учетом их структуры на мезоскопическом уровне в широких диапазонах внешних воздействий является многоуровневое компьютерное моделирование.

Развитие моделей и методов многоуровневого компьютерного моделирования керамических композитов и нанокompозитов важно для более полного понимания закономерностей процессов деформации, повреждения и разрушения структурированных материалов, и получения оценок прочностных характеристик композитов в условиях интенсивных динамических воздействий изделий.

На динамику разрушения керамических материалов оказывают влияние ряд структурных факторов. Поэтому определение влияния параметров структуры и фазового состава перспективных керамических композитов и нанокompозитов на закономерности их динамического разрушения является актуальным.

Модели и подходы многоуровневого моделирования успешно использованы для исследования процессов деформации разрушения структурно неоднородных материалах в условиях динамических воздействий в работах Псахье С.Г., Панина В.Е., Макарова П.В., Скрипняка В.А., Смолина А.Ю., Смолина И.Ю., Стефанова Ю.П., Канеля Г.И., Герасимова А.В., Наймарка О.Б., Качанова М.Л., Киселева С.П., Ревуженко А.Ф., Лаврикова С.В., Балохонова Р.Р., Романовой В.А., Шилько Е.В. и др.

Развитие подходов многоуровневого моделирования процессов деформации и разрушения хрупких гетерогенных сред и физической мезомеханики представляет актуальную задачу механики [5-28].

Цель диссертации состоит в разработке вычислительной двухуровневой модели для описания процессов деформации и разрушения керамических композитов при динамических нагрузках, проведение с ее использованием исследований закономерностей разрушения композитов и нанокompозитов на основе диборида циркония и оксида алюминия при интенсивных импульсных воздействиях.

В качестве **объекта исследования выступают** механические свойства и закономерности повреждения и разрушения перспективных классов керамических композитов и нанокompозитов на основе диборида циркония, оксида алюминия, включая ZrB_2-B_4C , $ZrB_2-t ZrO_2$, $ZrB_2 - Al_2O_3$, $Al_2O_3-ZrO_2$, $Al_2O_3-B_4C$.

Для достижения поставленных целей были сформулированы и решены следующие задачи:

1. Разработана физико-математическая модель для описания деформации и разрушения керамических нанокompозитов с учетом параметров структуры (концентрации упрочняющих частиц, распределения размеров зерен матрицы и упрочняющих частиц, распределения размеров пор и наличия поровых

кластеров)

2. Разработана методика моделирования механического поведения наполненных керамических композитов с концентрацией упрочняющих частиц до 30 %, с учетом распределения упрочняющих частиц в объеме материала.

3. Методом численного моделирования в 3D постановке исследованы закономерности процессов разрушения керамических нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-t ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ с пористостью до 7 % при ударно волновых воздействиях.

4. Исследованы закономерности развития повреждений и разрушения в модельных образцах керамических композитов на основе оксида алюминия и диборида циркония при воздействии ударных импульсов микросекундной длительности.

5. В результате проведенных комплексных экспериментальных и теоретических исследований установлены закономерности влияния концентрации упрочняющих наночастиц, параметров распределения частиц в нанокompозите на предел упругости Гюгонио, динамическую трещиностойкость и в условиях интенсивного импульсного нагружения.

Методы исследования:

В работе использовались теоретические и экспериментальные методы исследования. Для получения экспериментальных данных распределении упрочняющих фаз, размерах частиц упрочняющих фаз, параметрах поровой структуры использованы методы оптической и электронной сканирующей микроскопии. Для исследования закономерностей деформации, развития повреждений и разрушения керамических композитов использован метод численного моделирования. Компьютерное моделирование проведено с использованием суперкомпьютера «СКИФ Cyberia» ТГУ с производительностью 22,72 Tflop/s.

Положения, выносимые на защиту:

1. Модель механического поведения керамических композиционных материалов при динамическом нагружении для описания процессов деформации,

эволюции поврежденности и разрушения керамических композиционных материалов, учитывающая влияние на механическое поведение концентрации упрочняющих частиц микронного и субмикронного размера, параметры поровой структуры.

2. Методика моделирования на мезоскопическом уровне процессов деформации и разрушения гетерогенных конденсированных сред, для прогнозирования влияния структуры керамических нанокомпозитов на модули упругости, пределы упругости Гюгонио, параметры кинетики повреждения, при интенсивных динамических воздействиях с амплитудами до 20 ГПа.

3. Результаты исследования влияния фазового состава и структуры керамических композиционных материалов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-t ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ при концентрации упрочняющих фаз от 5 до 50 %, свидетельствующие о наличии в объеме материалов бимодальных распределений упрочняющих частиц и пор по размерам, наличия агломератов наноразмерных упрочняющих частиц и кластеров нанопор.

4. Результаты численных исследований в 3D постановках распространения ударных импульсов на мезоскопическом уровне в модельных образцах керамических композиционных материалов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-t ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ с пористостью от 1 до 7 % со стохастическим распределением упрочняющих частиц субмикронного размера в объеме и при образовании кластеров частиц. Результаты, свидетельствующие о том, что в диапазоне от 1000 до 10^5 с^{-1} разрушение нанокомпозитов носит квазихрупкий характер, однако макроскопическая вязкость разрушения исследуемых нанокомпозитов уменьшается. На кинетику развития повреждений и механизмы сопротивления разрушению при динамическом нагружении влияют размеры упрочняющих частиц и их концентрация, а также параметры поровой структуры композита.

Научная новизна диссертации заключается в развитии подхода многоуровневого моделирования в 3D постановке для исследования закономерностей разрушения керамических композитов и нанокомпозитов на

мезоскопическом уровне при динамическом нагружении.

Предложена методика построения представительных объемов керамических композитов, физико-математическая модель для описания процессов деформации, развития повреждений и разрушения керамических композитов и нанокompозитов на мезоскопическом уровне при интенсивном динамическом нагружении.

Развитая методика многоуровневого компьютерного моделирования позволила исследовать закономерности квазихрупкого разрушения перспективных керамических нанокompозитов на основе диборида циркония, оксида алюминия и диоксида циркония при импульсных воздействиях с амплитудами до 20 ГПа и длительностью от нескольких наносекунд до нескольких микросекунд.

Разработанные модели и вычислительные алгоритмы расширяют возможности прогнозирования прочностных характеристик новых керамических композитов и нанокompозитов при интенсивных импульсных воздействиях с амплитудами давлений, не превышающих пороговые уровни начала мартенситных фазовых превращений. Они могут использоваться при решении как прикладных, так и научных поисковых задач и обеспечивают более полное понимание закономерностей процессов деформации и разрушения субмикрoкристаллических керамических композиционных материалов.

В результате проведенных исследований впервые были получены:

- закономерности развития повреждений и квазихрупкого разрушения нанокompозитов ZrB_2-B_4C , $ZrB_2-t ZrO_2$, $ZrB_2-Al_2O_3$ при концентрации упрочняющих фаз до 30 об. % при нагружении ударными импульсами;
- установлено влияние структуры материалов на модули упругости, пределы упругости Гюгонио, вязкость разрушения нанокompозитов ZrB_2-B_4C , $ZrB_2-t ZrO_2$, $ZrB_2-Al_2O_3$ в диапазоне изменения концентрации упрочняющих фаз до 30 об. %.

Научная и практическая ценность диссертации.

Разработанные модели и вычислительные алгоритмы многоуровневого моделирования расширяют возможности исследования процессов деформации и разрушения керамических композиционных материалов, включая нанокompозиты, в условиях интенсивных динамических воздействий. Они могут использоваться при решении как прикладных, так и научных поисковых задач и обеспечивают более полное понимание закономерностей процессов деформации и разрушения субмикроструктурных керамических композиционных материалов.

Полученные численные решения ряда задач вносят вклад в развитие представлений о возможных механизмах развития повреждений и разрушения субмикроструктурных керамических композиционных материалов при ударно-волновых воздействиях.

Полученные данные о прочностных свойствах опытных образцов перспективных тугоплавких нанокompозитов на основе ZrB_2 , наполненных субмикронными включениями, представляют интерес для применения композитов в инженерной практике.

Разработанные модели, методика расчета могут быть использованы для решения широкого круга научных и практических задач механики структурно-неоднородных сред.

Разработанные модели и алгоритмы использовались при выполнении фундаментальных исследований в рамках проектов РФФИ 12-01-00805 «Развитие реологических моделей для математического моделирования процессов деформирования и разрушения хрупких гетерогенных материалов, находящихся в стесненных условиях, с учетом зависимости механического отклика от скорости нагружения», ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. (Соглашение № 14.B37.21.0441) Минобрнауки РФ, научно-исследовательских работ в рамках государственного задания ТГУ №2014.223 (код проекта 1943).

Обоснованность и достоверность результатов обеспечивается математической корректностью постановок задач, применением апробированных

методов решения, решением тестовых и модельных задач, хорошим согласием полученных результатов с опубликованными данными других исследователей.

Апробация результатов работы.

Основные результаты и положения диссертационной работы доложены и обсуждены на следующих конференциях: 19 th European Conference on Fracture (ECF19), Kazan, Russia, August 26 – 31, 2012 г.; XVIII Зимняя школа по механике сплошных сред, Пермь, 18-22 февраля 2013 г.; XV Харитоновские тематические научные чтения. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны, г. Саров, Россия, 18 марта – 22 марта 2013г.; Международная конференция «Математические и информационные технологии, MIT-2013» (X конференция «Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании»), Врнячка Баня, Сербия; 5 – 8 сентября 2013 г. Будва, Черногория, 9 – 14 сентября 2013 г.; VIII Всероссийская научная конференция, г. Томск , 22 – 25 апреля 2013 г.; 143-rd TMS-2014 Annual Meeting & Exhibition, San Diego, USA, February 16-20 2014; 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), 5th European Conference on Computational Mechanics (ECCM V), 6th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD VI) , Barcelona, Spain, July 20 – 25 2014 , The 10th International Conference on New Models and Hydrocodes for Shock Processes in Condensed Matter, Pardubice Czech Republic, EU, July 27th – August 1st, 2014, International Conference on Mechanical Engineering, Automation and Control Systems 2014, Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, October 16-18, 2014.

Публикации. Основные результаты, представленные в данной диссертационной работе, были опубликованы в 12 печатных работах, включая 4 статьи в журналах ВАК.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех разделов и заключения, изложенных на 129 страницах машинописного текста, включая 57 рисунков, 9 таблиц, список литературы из 122 наименований.

1 Механическое поведение объемных керамических нанокompозитов в квазистатических и динамических условиях нагружения

1.1 Механические свойства объемных керамических композитов и нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-}t\text{ZrO}_2$

Развитие нанотехнологий и технологий создания керамических композиционных материалов на основе субмикронных порошков с нанокристаллической структурой, открыли широкие возможности для получения новых керамических композитов с требуемым сочетанием твердости, прочности и трещиностойкости. Обзоры результатов исследований опубликованы в [1-4].

В настоящее время интенсивно ведутся работы по созданию легких керамических материалов на основе карбидов и боридов металлов, сочетающих высокую твердость, прочность и трещиностойкостью. Результаты экспериментальных исследований опытных образцов нанокompозитов, приведенные в [33-54], свидетельствуют о нелинейных зависимостях прочности и трещиностойкости керамических композитов на основе оксида алюминия, диоксида циркония, диборида циркония от концентрации и морфологических параметров упрочняющих частиц оксидов, карбидов и боридов металлов.

На рисунке 1 показаны экспериментальные данные о трещиностойкости опытных образцов нанокompозитов $\text{ZrO}_2\text{-}30\text{ vol. \% ZrB}_2$, $\text{ZrO}_2\text{-}30\text{ vol. \% Al}_2\text{O}_3$, $\text{ZrO}_2\text{-TiB}_2$ [36,37,46].

Значения трещиностойкости нанокompозита $\text{ZrO}_2\text{-}30\text{ vol. \% ZrB}_2$, полученного методом синтеза в условиях горячего прессования в 1.8 раза превышает значение трещиностойкости для аналога нанокompозита, полученного методом горячего прессования порошковой смеси [46]. По мнению авторов, такое различие значений K_{1C} у нанокompозитов $\text{ZrO}_2\text{-}30\text{ vol. \% ZrB}_2$ обусловлено меньшей концентрацией тетрагональной фазы $t\text{-ZrO}_2$ в образце после горячего прессования. Значительный объем ZrO_2 матрицы составляет моноклинная фаза $m\text{-ZrO}_2$, не испытывающая мартенситного фазового превращения $t\text{ZrO}_2 \rightarrow m\text{ZrO}_2$

с положительным дилатансионным эффектом. В результате механизм трансформационного упрочнения не полностью реализуется в нанокompозите с ростом объемной концентрации m- ZrO_2 .

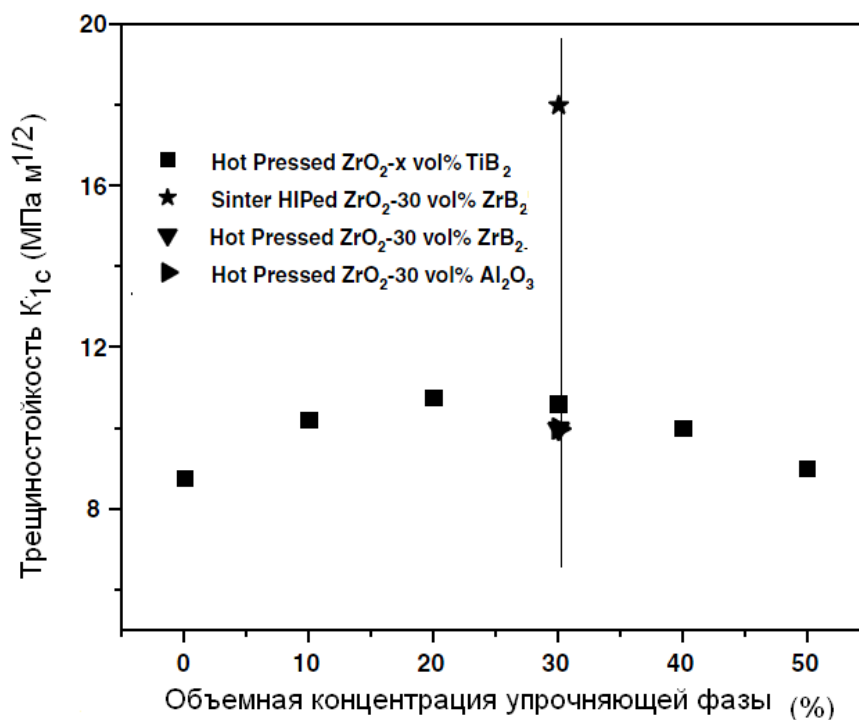


Рисунок 1- Зависимость трещиностойкости нанокompозитов ZrO_2 - 30 vol. % ZrB_2 , ZrO_2 - 30 vol. % Al_2O_3 , ZrO_2 - TiB_2 от концентрации упрочняющих наночастиц

Применение новых поколений керамических композиционных материалов в технике потребовало создания адекватных моделей их механического поведения и развития методов вычислительной механики, обеспечивающих высокую достоверность результатов инженерного анализа при проектировании элементов конструкций.

На рисунке 2 представлены данные о трещиностойкости опытных образцов керамических нанокompозитов ZrB_2 - t- ZrO_2 с объемной концентрацией наночастиц диоксида циркония 0, 10, 20, 30 % [55].

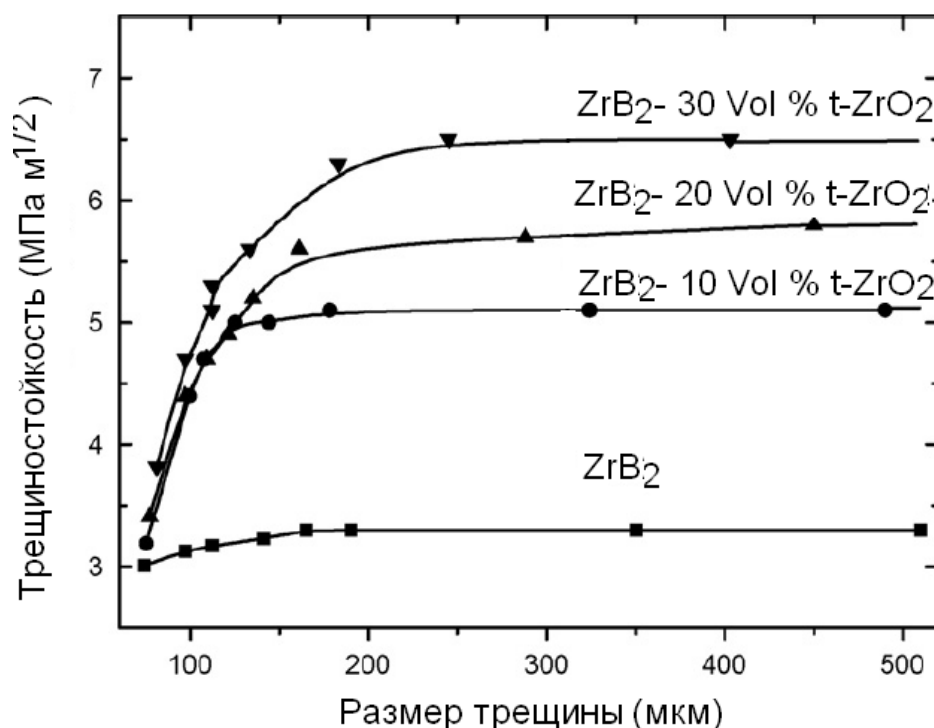


Рисунок 2 - Зависимость трещиностойкости нанокompозитов ZrB_2-ZrO_2 от размеров трещины

Экспериментальные данные свидетельствуют о слабом влиянии величины объемной концентрации субмикронных частиц $t-ZrO_2$ от 10 до 30 % на трещиностойкость нанокompозитов ZrB_2-ZrO_2 при размерах трещин от 20 до 150 мкм. Концентрация упрочняющих наночастиц $t-ZrO_2$ существенно влияет на сопротивление распространению мезоскопических трещин с размерами, превышающими 150 мкм.

На рисунке 3 показаны экспериментальные данные, свидетельствующие о существенно нелинейной и не монотонной зависимости изгибной прочности нанокompозитов ZrB_2-ZrO_2 от объемной концентрации наночастиц $t-ZrO_2$ [38]. Возрастание концентрации упрочняющих частиц $t-ZrO_2$ до порога перколяции ($\sim 24\%$) в нанокompозитах ZrB_2-ZrO_2 сопровождается двукратным повышением изгибной прочности. После формирования перколяционных субструктур из упрочняющих частиц прочность монотонно снижается до 450 МПа при 60 % объемном содержании $t-ZrO_2$.

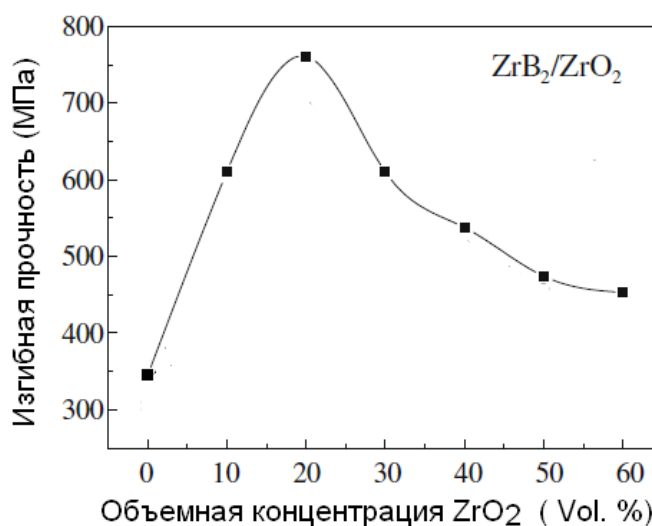


Рисунок 3- Зависимость изгибной прочности нанокompозитов $ZrB_2 - ZrO_2$ от объемной концентрации наночастиц $t - ZrO_2$

На рисунке 4 приведены экспериментальные данные о трещиностойкости опытных образцов нанокompозитов $ZrB_2 - ZrO_2$ при объемной концентрации упрочняющих частиц $t - ZrO_2$ от 0 до 60 % [38].

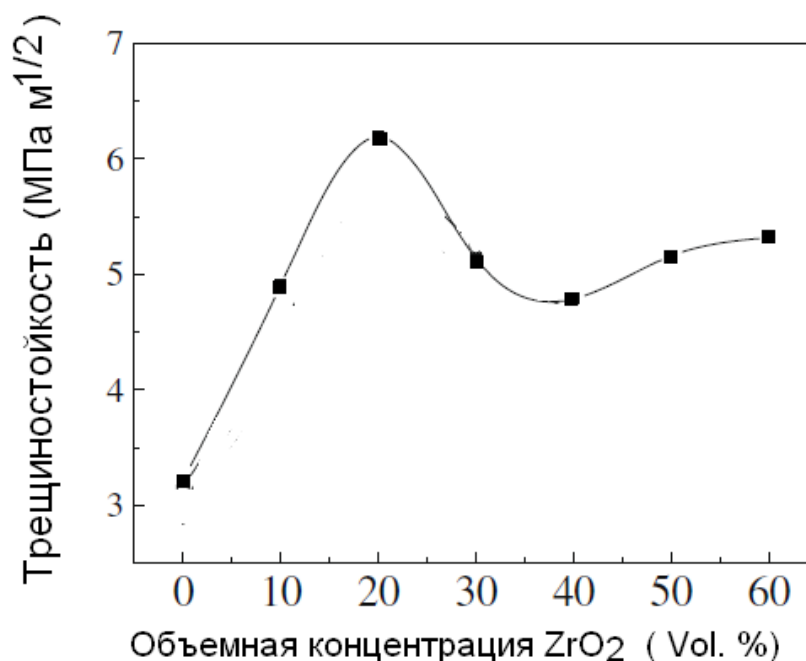


Рисунок 4- Зависимость трещиностойкости нанокompозитов $ZrB_2 - ZrO_2$ от концентрации упрочняющих наночастиц

Приведенные на рисунках 3 и 4 данные свидетельствуют о корреляции закономерностей изменения изгибной прочности и трещиностойкости

наноккомпозитов $\text{ZrB}_2 - \text{ZrO}_2$ с ростом объемной концентрации наночастиц $t - \text{ZrO}_2$. Это подтверждает необходимость исследования влияния концентрации упрочняющих частиц на прочностные характеристики наноккомпозитов $\text{ZrB}_2 - \text{ZrO}_2$.

На рисунке 5 представлены данные об изгибной прочности и трещиностойкости наноккомпозитов $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ [42]. Данные указывают сильную зависимость изгибной прочности и трещиностойкости от фазового состояния упрочняющих частиц ZrO_2 .

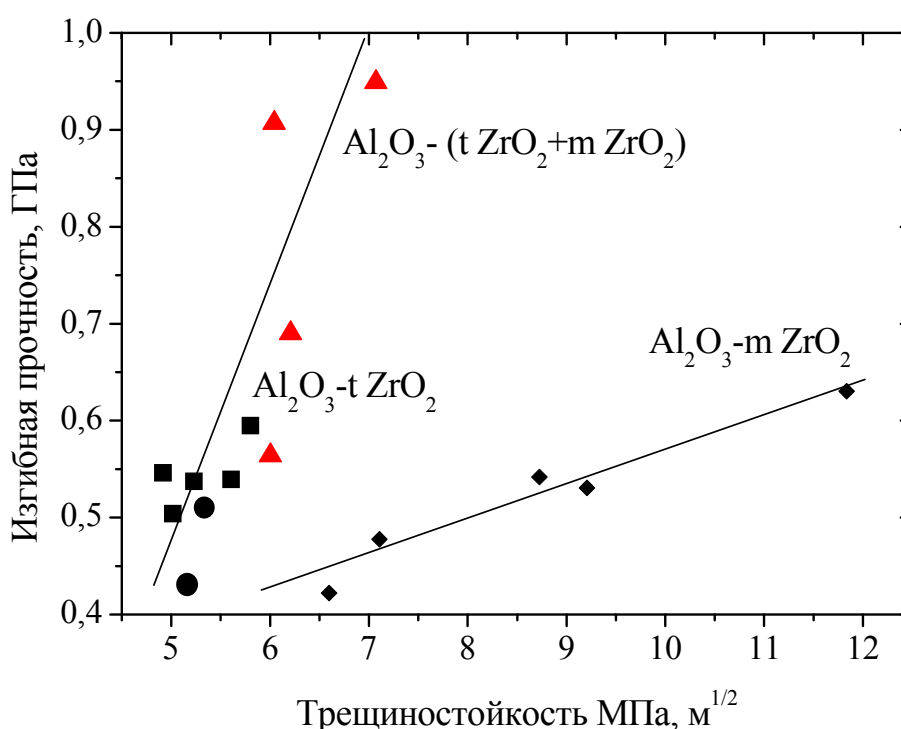


Рисунок 5 – Изгибная прочность и трещиностойкость $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$

На рисунке 6 показаны экспериментальные зависимости изгибной прочности наноккомпозитов от концентрации упрочняющих частиц Al_2O_3 , имеющих форму округлых частиц и пластинок [35]. Прямоугольными символами показаны данные [27, 28], треугольными и круглыми символами — данные, приведенные в [35].

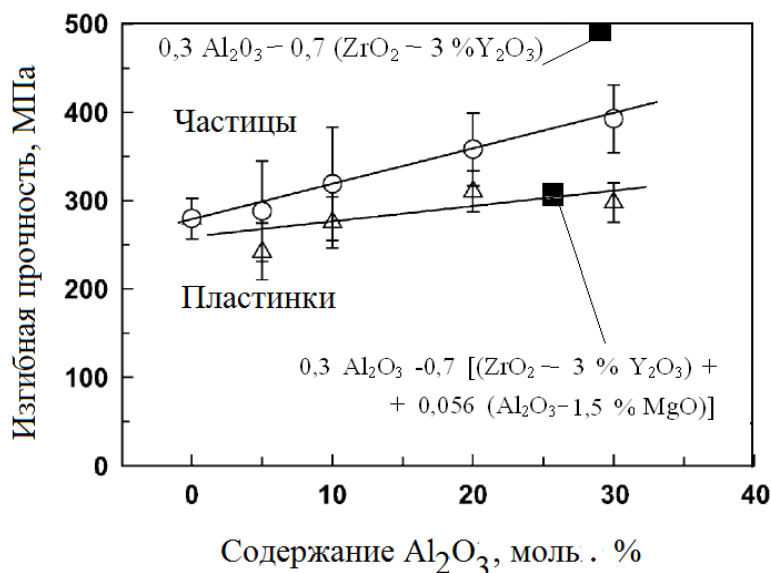


Рисунок 6 – Изгибная прочность композитов $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ от содержания оксида алюминия

Показанные экспериментальные данные свидетельствуют об относительно слабом влиянии формы упрочняющих частиц на величину изгибной прочности при объемной концентрации до 24 %. После достижения предела перколяции (объемная концентрация упрочняющих элементов выше 24 %) нанокompозиты, упрочненные пластинами обладают меньшей на 25 % изгибной прочностью по сравнению с нанокompозитами $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ с аналогичной фазовой концентрацией и упрочненных частицами.

В таблице 1 приведены данные о механических свойствах композиционных материалов на основе $\text{ZrO}_2\text{-ZrB}_2$ [44,48,55].

В таблицах 2 и 3 представлены экспериментальные данные о трещиностойкости и твердости наноструктурных композитов Al_2O_3 - ZrO_2 , свидетельствующие о возможности создания керамических нанокompозитов с малой плотностью, высокой твердостью и трещиностойкостью.

Следует отметить, что зависимость модуля Юнга от концентрации упрочняющей фазы в меньшей степени чувствительны к распределению фаз в объеме материала.

Таблица 1 - Свойства композиционных материалов системы ZrO_2-ZrB_2 [44,48,55]

Композит	Модуль Юнга, ГПа	Твердость по Виккерсу, МПа	Изгибная прочность, МПа	Объем тетрагональной фазы, претерпевший фазовый переход $t \rightarrow m$, объем. %
ZrB_2	487±9	16,4±0,2	573±41	0
ZrB_2 -10 % ZrO_2	465±6	16,5±0,3	640±18	0,49
ZrB_2 -20 % ZrO_2	440±4	18,3±0,2	737±13	3,68
ZrB_2 -30 % ZrO_2	414±3	20,2±0,4	803±	10,56

Таблица 2 – Твердость по Виккерсу наноструктурных композитов $Al_2O_3-ZrO_2$ [44]

Композит $Al_2O_3-ZrO_2$	Твердость по Виккерсу, ГПа
Al_2O_3	19,39±0,8
Al_2O_3 +1 объем. % ZrO_2	19,77±0,62
Al_2O_3 +3 объем. % ZrO_2	20,82±0,96
Al_2O_3 +5 объем. % ZrO_2	21,01±0,4

Таблица 3 - Механические свойства горячепрессованных композиционных материалов ZrO_2 -3 mol. % $Y_2O_3 - Al_2O_3$ [35, 37, 42-45]

Объемное содержание ZrO_2 в композитах	Трещиностойкость, МПа·м ^{1/2}	Содержание m - ZrO_2 и t- ZrO_2			
		До нагружения		После нагружения	
		m- ZrO_2	t- ZrO_2	m- ZrO_2	t- ZrO_2
10	7,1	8,9	81,0	50,1	49,9
15	7,8	10,6	89,4	54,4	45,6
20	6,1	13,2	86,8	48,0	52,0
25	5,5	17,7	82,3	27,8	72,2
30	4,9	23,2	76,8	31,5	68,5

Экспериментальные данные о динамической изгибной прочности от скорости нагружения для керамических композитов Al_2O_3 8YSZ с концентрацией упрочняющих частиц 0, 1, 3 mol. %, 20, 30 вес. % показаны на рисунке 7 [56].

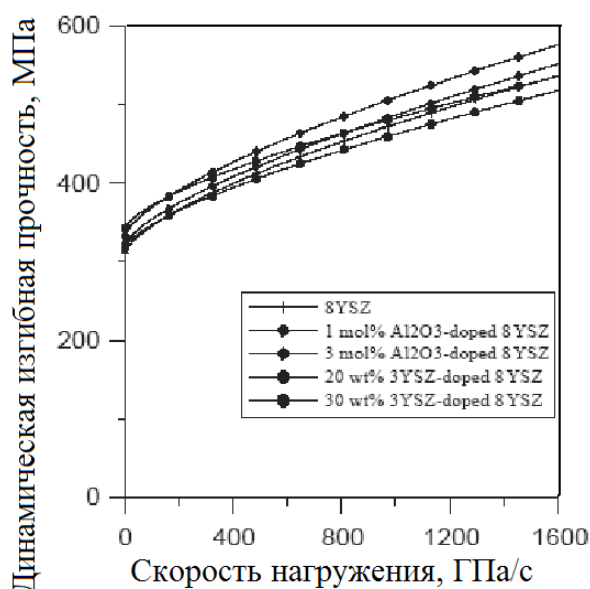


Рисунок 7 – Зависимости изгибной прочности от скорости нагружения для Al_2O_3 8YSZ

На рисунке 8 показана зависимость динамической изгибной прочности нанокompозита Al_2O_3 -20 вес. % 3YSZ- 8YSZ [56].

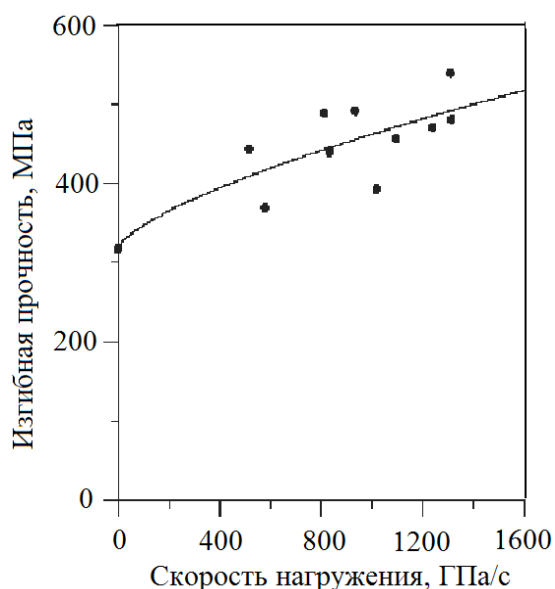


Рисунок 8 – Изгибная прочность от скорости нагружения для нанокompозита Al_2O_3 -20 вес. % 3YSZ- 8YSZ

Экспериментальные данные [56] свидетельствуют о влиянии объемной концентрации упрочняющих наночастиц 8YSZ на величины динамической изгибной прочности в диапазоне скоростей нагружения от 59 до 1600 МПа/с.

На рисунке 9 показаны зависимости предела упругости Гюгонио от относительного объема пор для крупнокристаллической (линия 1) и субмикрокристаллической (линия 2) оксид алюминиевой керамики. Символами отмечены экспериментальные данные [57 - 59]

На рисунке 10 показаны зависимости предела упругости Гюгонио от относительного объема пор для крупнокристаллической (линия 1) и субмикрокристаллической (линия 2) ZrO_2 керамики. Символами отмечены экспериментальные данные [57 - 59]

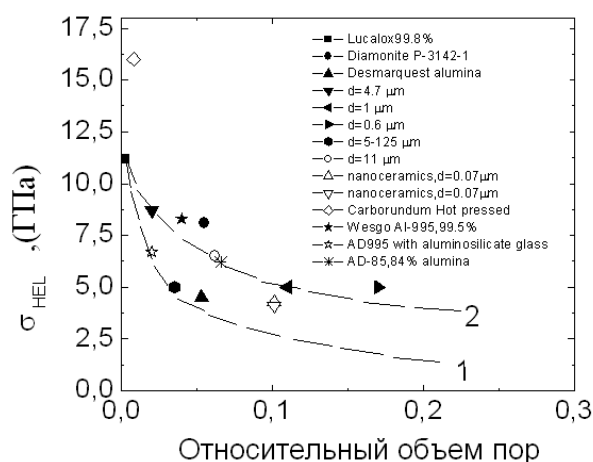


Рисунок 9 – Зависимость динамического предела упругости от относительного объема пор для керамических материалов на основе Al_2O_3

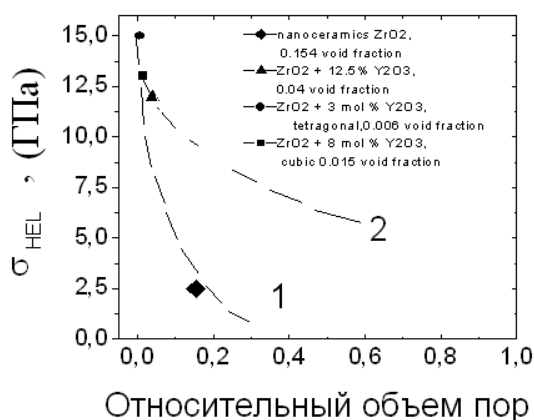


Рисунок 10 – Зависимость динамического предела упругости от относительного объема пор для керамических материалов на основе ZrO_2

Анализ экспериментальных данных указывает на то, что пределы упругости Гюгонио зависят не только от величины относительного объема пор, но и размеров зерен керамических материалов.

Таким образом, анализ результатов исследований механических свойств перспективных керамических композитов и нанокompозитов показывает:

- наноструктурные керамические материалы и нанокompозиты обладают повышенными значениями прочностных характеристик (изгибной прочности и трещиностойкости) по сравнению с крупнокристаллическими аналогами;
- фазовый состав упрочняющих частиц и их объемная концентрация могут оказывать существенное влияние на прочностные характеристики керамических композитов и нанокompозитов в условиях квазистатических и динамических воздействий;
- форма упрочняющих наночастиц при их концентрации от 1 до 25 % слабо влияет на прочностные характеристики керамических нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2 - t \text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$;
- зависимости прочностных характеристик керамических композитов и нанокompозитов от концентрации упрочняющих частиц, размеров частиц и зерна матрицы композитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2 - t \text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ являются не линейными и, в ряде случаев, не монотонными.

Влияние концентрации фаз, морфологических параметров структуры нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2 - t \text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ на их прочностные свойства изучены недостаточно полно.

Таким образом, при разработке структурно-динамических многоуровневых моделей механического поведения перспективных керамических композитов и нанокompозитов на основе Al_2O_3 , $t \text{ ZrO}_2$ и ZrB_2 требуется учет не только объемной концентрации фаз, но и морфологических характеристик структурных элементов. Анализ опубликованных данных о свойствах опытных образцов новых керамических композитов и нанокompозитов свидетельствуют, что значимость влияния структурных факторов на механические свойства зависит от условий нагружения.

Механические свойства композитов $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-}t\text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ при динамических воздействиях практически не исследованы. Информация о динамических прочностных характеристиках тугоплавких керамических композитов на основе боридов и карбидов Zr и Hf носит фрагментарный характер.

Исследования механических свойств перспективных керамических композиционных материалов на основе Al_2O_3 , $t\text{ ZrO}_2$ и ZrB_2 , в широком диапазоне условий нагружения необходимо выполнять с использованием экспериментальных и теоретических методов. Использование метода многоуровневого компьютерного моделирования позволяет получить определить не только значения динамической трещиностойкости и вязкости разрушения для конкретных условий динамического нагружения, но и информацию о закономерностях деформации и накопления повреждений в процессе деформации.

1.2 Структура керамических композитов и нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-}t\text{ ZrO}_2$ на мезоскопическом уровне

К настоящему времени проведены многочисленные исследования влияния размеров зерна матрицы и включений, формы включений, параметров поровых структур, концентрации и свойств интерфейсных границ на механические свойства различных керамических композитов и нанокompозитов. В связи с решаемой задачей, интерес представляют результаты, позволяющие выявить физические механизмы, обеспечивающих повышение прочности и трещиностойкости керамических материалов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-}t\text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$. Эти физические механизмы необходимо учитывать при создании многоуровневых моделей композитов для прогнозирования их механического поведения в условиях интенсивных импульсных воздействий.

Рассмотренные классы керамических композитов получают с использованием технологий высокотемпературного спекания порошковых смесей [2-4], горячего прессования [38], самораспространяющегося

высокотемпературного синтеза (СВС) с последующим прессованием [34,36], импульсного электроразрядного синтеза [47].

Предварительная механическая активация порошковых смесей, применение спекания в различных газовых атмосферах, варьирование концентрации и фазового состава порошковых смесей позволяет формировать иерархическую структуру керамических композитов и нанокомпозитов [33-60]. Свойства керамических композитов определяются структурой на различных уровнях, включая кристаллохимический (кристаллический).

К структурным параметрам керамики принято относить параметры распределения размеров и формы фаз в объеме, количественное соотношение фаз (весовое или объемное), взаимное расположение фаз в объеме материала, интегральную пористость, размеры и форму пор и трещин. Керамические композиты и нанокомпозиты всегда состоят из нескольких фаз.

В зависимости от размера структурных элементов (зерен матрицы, включений, пор) в объеме композитов принято различать макроструктуру ($l > 1$ мм), микроструктуру ($1000 \text{ мкм} < l < 1 \text{ мм}$), субструктуру ($l < 1000 \text{ мкм}$) включая мезоскопическую субструктуру или структуру мезоскопического уровня ($1 \text{ мкм} < l < 1000 \text{ мкм}$), наноструктуру ($20 \text{ нм} < l < 1 \text{ мкм}$) [60].

Макроструктура керамических композитов может быть образована крупными кристаллами соединений, агломератами мелких зерен, областями пространственного упорядочения фаз (текстурой), включениями фаз, порами и трещинами с размерами, превышающими 1 мм.

Микроструктура керамических композитов образована кристаллами зерен матрицы, мелкими включениями фаз, блоками зерен, агломератами включений, микропорами и микротрещинами с размером менее 1000 мкм, а также их кластерами, межфазными границами и граничными фазами [60].

Поры и трещины, присутствующие на разных масштабных уровнях в керамических композитах и нанокомпозитах могут рассматриваться как структурные элементы и как дефекты структуры.

Для получения заданных свойств керамических композитов при серийном изготовлении изделий в настоящее время стремятся воспроизвести технологические режимы получения изделия и керамического композита. Отметим, что изделия из керамических композитов и нанокompозитов создаются одновременно с самим материалом.

Острой проблемой остается серийное воспроизведение структуры и свойств керамических материалов при использовании традиционных технологий [33-60]. На стадиях подготовки и спекания порошковых систем в них протекают процессы самоорганизации элементов структуры, что приводит к различию локально-упорядоченных субструктур.

Различные соотношения стохастической и упорядоченной внутренней структуры присутствуют на разных масштабных уровнях в керамических композитах и вызывают разброс значений прочностных характеристик материалов при одинаковых условиях нагружения.

Существенно, что влияние субструктуры на модули упругости, прочность при сжатии, прочность при растяжении или изгибе, твердость и трещиностойкость различно. Поэтому, при построении многоуровневых моделей для прогноза механического поведения керамических композитов и нанокompозитов важно учесть спектр возможных вариантов формирования субструктур на мезоскопическом уровне.

С целью установления особенностей субструктуры композитов и нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{-}t\text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ на мезоскопическом и наноструктурном уровнях методами оптической микроскопии и электронной сканирующей микроскопии были выполнены исследования ряда образцов нанокompозитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-}t\text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{-B}_4\text{C}$.

Для проведения исследований структуры методом оптической микроскопии при увеличении 200х, 2000х и 5000х применялся микроскоп Digital Microscope (VHX-600 (Gen II)). Для исследования структуры на субмикронном уровне применялся электронный сканирующий микроскоп JSM 7500F (JEOL).

На рисунке 11 показана структура опытного образца нанокompозита Al_2O_3 - ZrO_2 полученного методом горячего прессования из нанопорошков производства ОАО «Сибирский химический комбинат» (г. Северск, Россия).

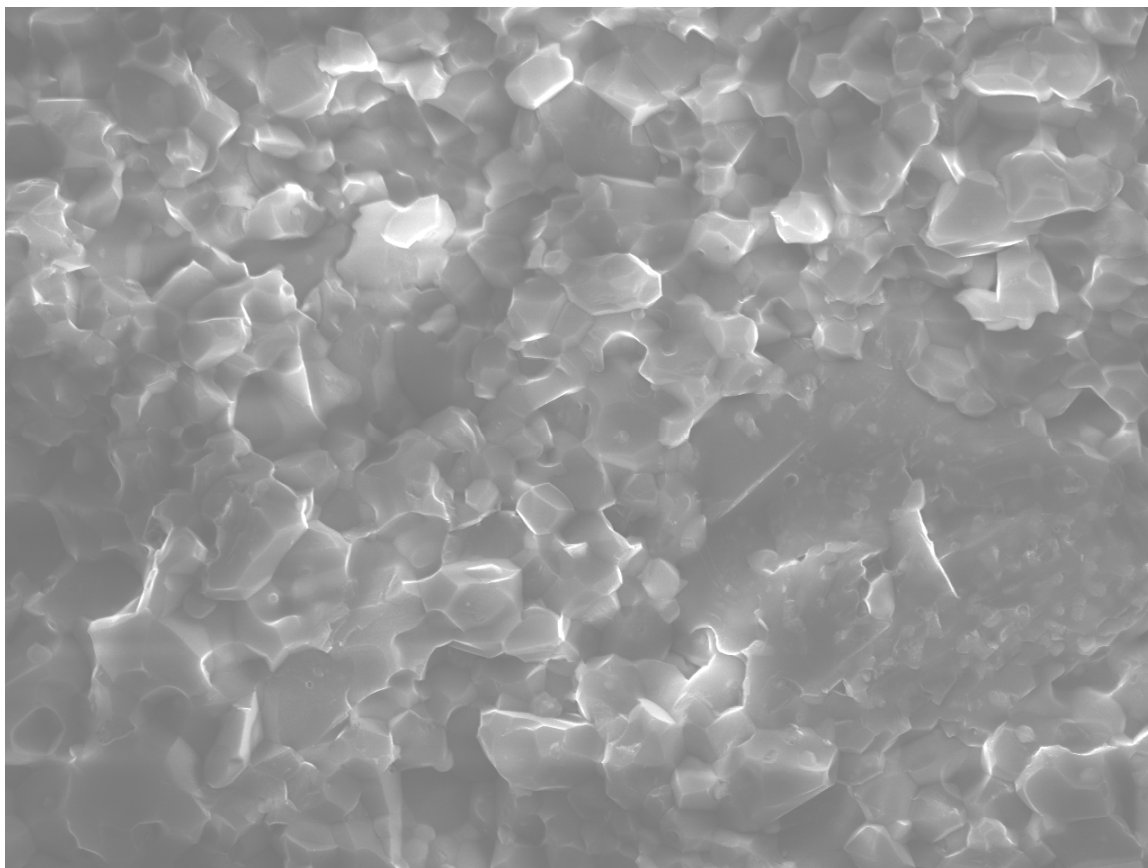


Рисунок 11 – Структура керамического композита Al_2O_3 - ZrO_2

При производстве керамических композитов методом горячего прессования смесей механоактивированных наноструктурных порошков Al_2O_3 и ZrO_2 , полученных методом плазмохимического синтеза, в структуре композита образуются агломераты частиц ZrO_2 (кластеры наночастиц). В процессе спекания кластеры наночастиц трансформируются в крупные частицы микронного размера. На рисунке 12 показано распределение компонентов Al (а), Zr (б), O (в) в фазовой структуре композита Al_2O_3 - ZrO_2 .

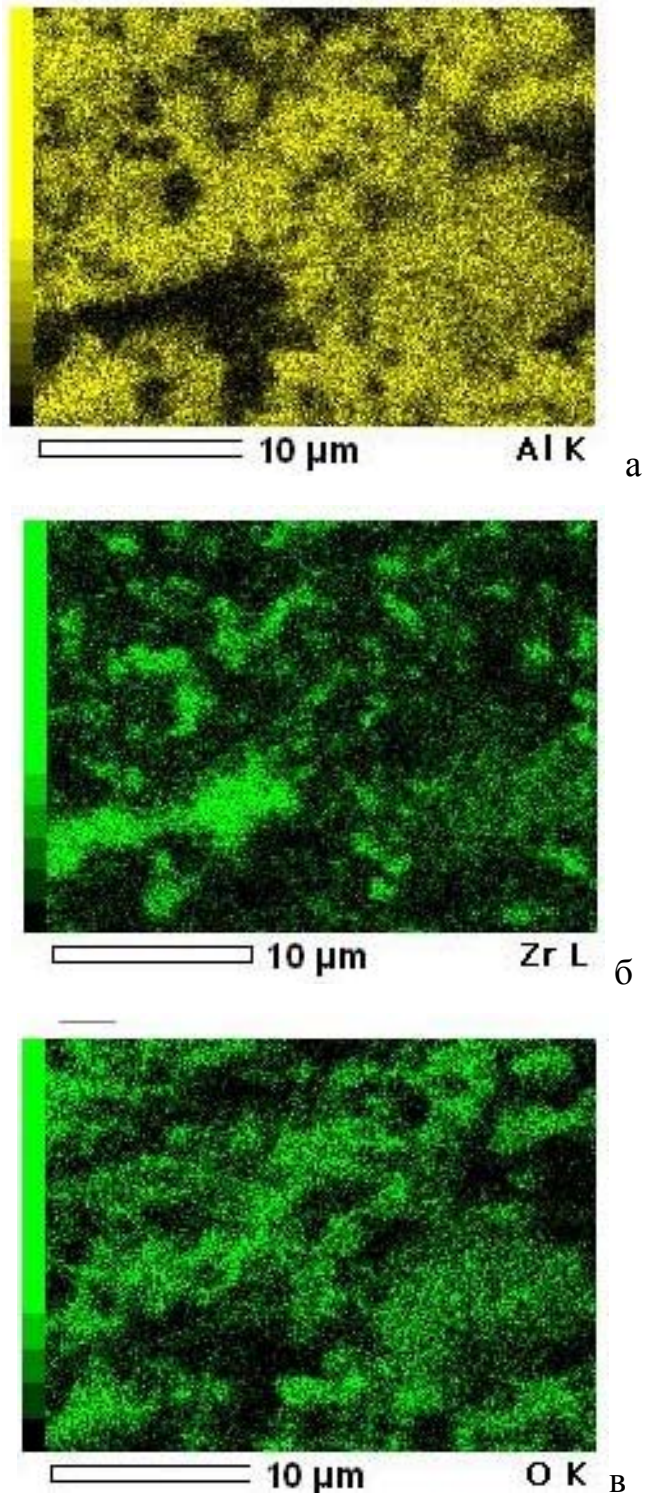


Рисунок 12 – Распределение Al (а), Zr (б), O (в) в структуре композита $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$

На рисунке 13 показана структура композита $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. Светлыми показаны частицы ZrO_2 и их агломераты. Темными показаны частицы Al_2O_3 .

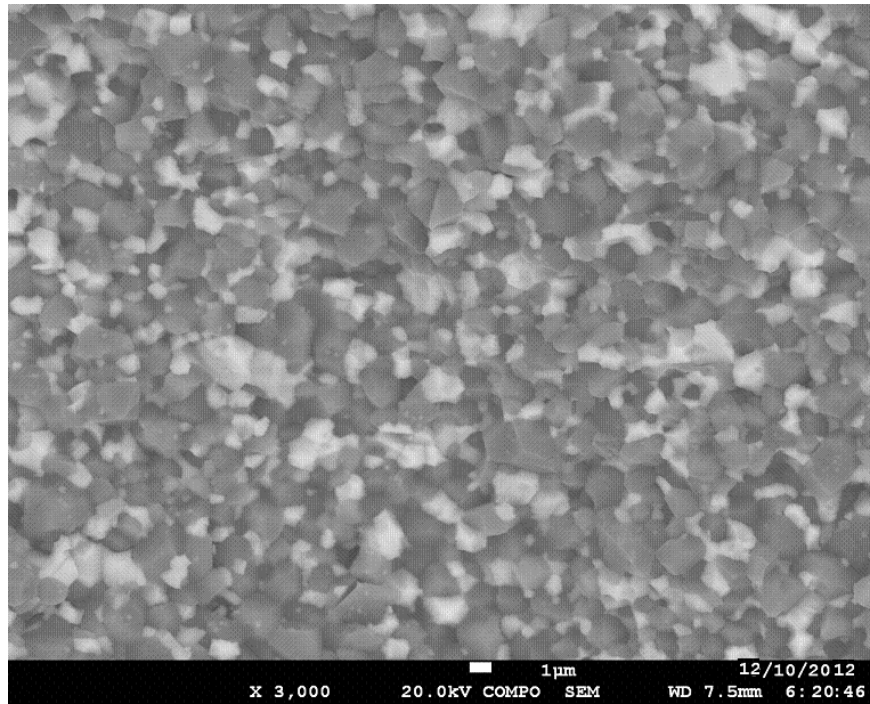


Рисунок 13 – Распределение наночастиц в композите $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$

На рисунке 14 показана гистограмма распределения зерен по размерам в образце опытного композита $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. На рисунке 15 и 16 показаны гистограммы распределения размеров Al_2O_3 и ZrO_2 в композите.

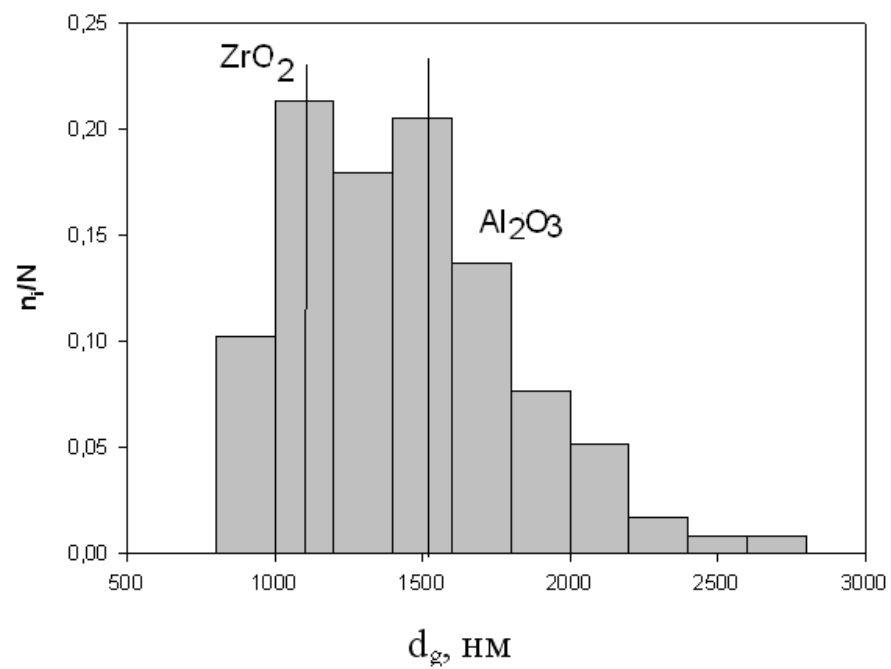


Рисунок 14 – Гистограмма распределения размеров фаз в композите $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$

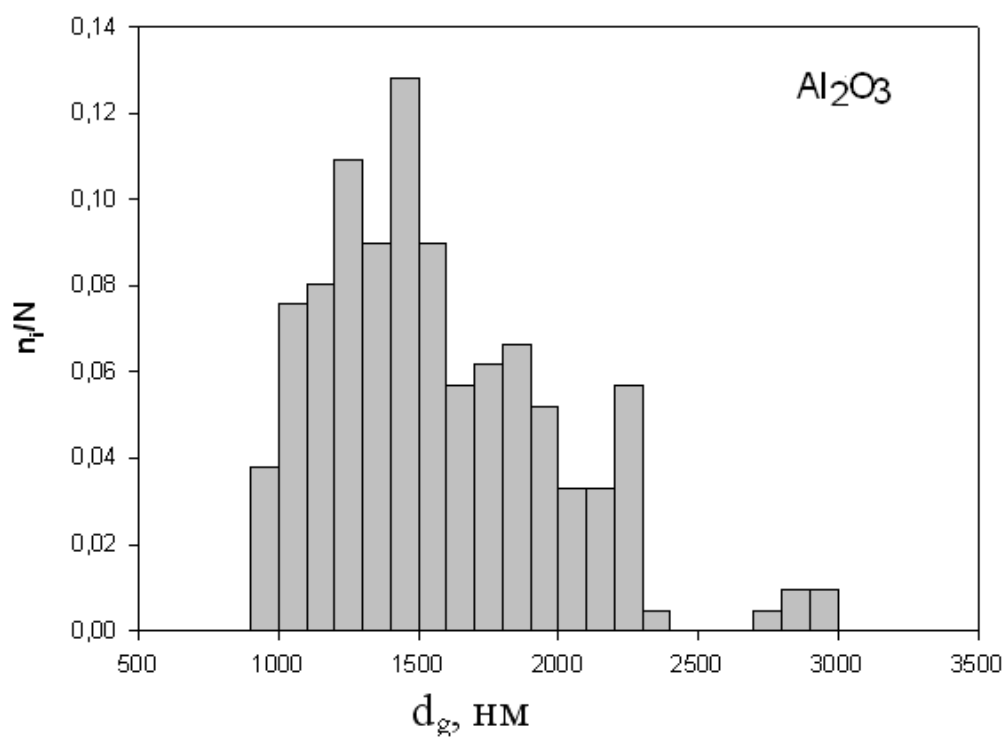


Рисунок 15 – Гистограмма распределения размеров зерен Al₂O₃ в композите Al₂O₃- ZrO₂

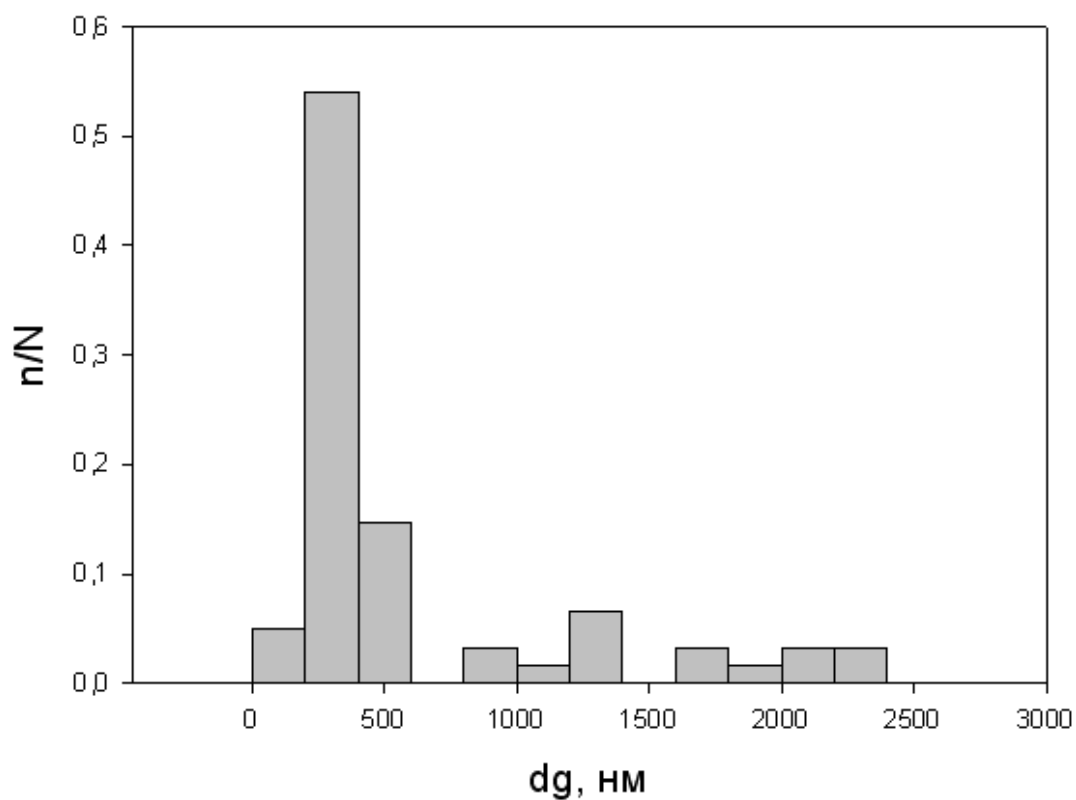


Рисунок 16 – Гистограмма распределения размеров зерен Al₂O₃ в композите Al₂O₃- ZrO₂

Полученные данные свидетельствуют о том, что в процессе высокотемпературного спекания керамических композитов системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ происходит изменение распределения упрочняющих частиц по размерам. Полученные данные согласуются с данными [42-46] о влиянии температуры и длительности спекания на средние размеры упрочняющих частиц и пористость.

При использовании порошков ZrO_2 с одномодальным распределением размеров для получения керамических композитов системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ формируется бимодальное распределение размеров упрочняющих частиц. Наноструктурные композиционные материалы системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ обладают рекордными показателями прочностных характеристик оксидных керамических композитов в условиях статического нагружения. Материалы с относительно невысокой концентрацией ZrO_2 обладают массовой плотностью, близкой к плотности Al_2O_3 керамики. Размеры зерна матрицы варьируются в диапазоне от 100 до 400 нм с характерным бимодальным распределением при 200 и 300 нм. Средние размеры упрочняющих частиц составляют 650 нм. Структура композитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ характеризуется неоднородностью пространственного распределения включений. Такое распределение включений приводит к отклонению локальных прочностных характеристик от средних значений. В результате, композиты $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, упрочненные частицами и пластинками, обладают нестабильными прочностными характеристиками – изгибной прочностью, трещиностойкостью [37-46]. Вместе с тем, значения модулей упругости, в том числе величина модуля Юнга, слабо зависят от распределения фаз в объеме материала при концентрациях упрочняющей фазы от 5 до 30 % [46].

На рисунке 17 показана структура опытного композита $\text{ZrB}_2\text{-ZrO}_2$, полученного методом неизостатического горячего прессования из нанопорошков производства ОАО «Сибирский химический комбинат» (г. Северск, Россия). Светлая фаза – ZrB_2 , темная фаза – ZrO_2 . Как видно из рисунка, в структуре керамического композита присутствуют поры микронного размера.

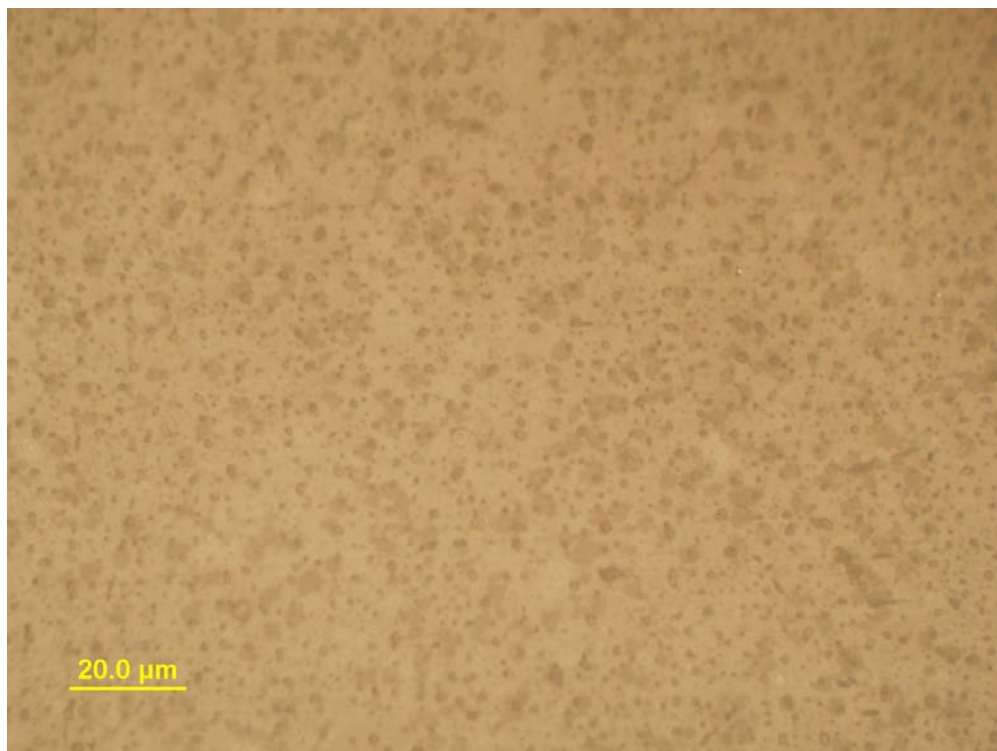


Рисунок 17 - Структура опытного композита $\text{ZrB}_2\text{-ZrO}_2$

На рисунке 18 показана структура образца композита при увеличении 5000х .

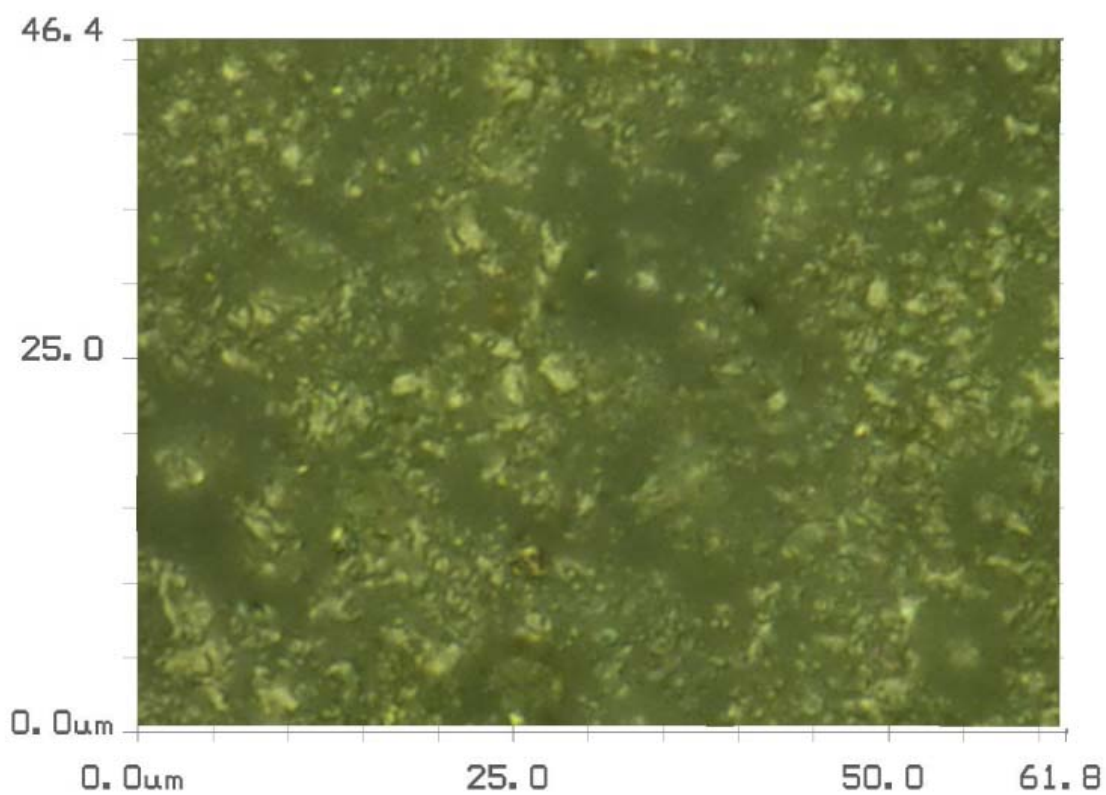


Рисунок 18 - Структура опытного композита $\text{ZrB}_2\text{-ZrO}_2$

На рисунке 19 показана структура опытного композита $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$. На поверхности полированного образца композита ясно идентифицируются поры (светлые точки).

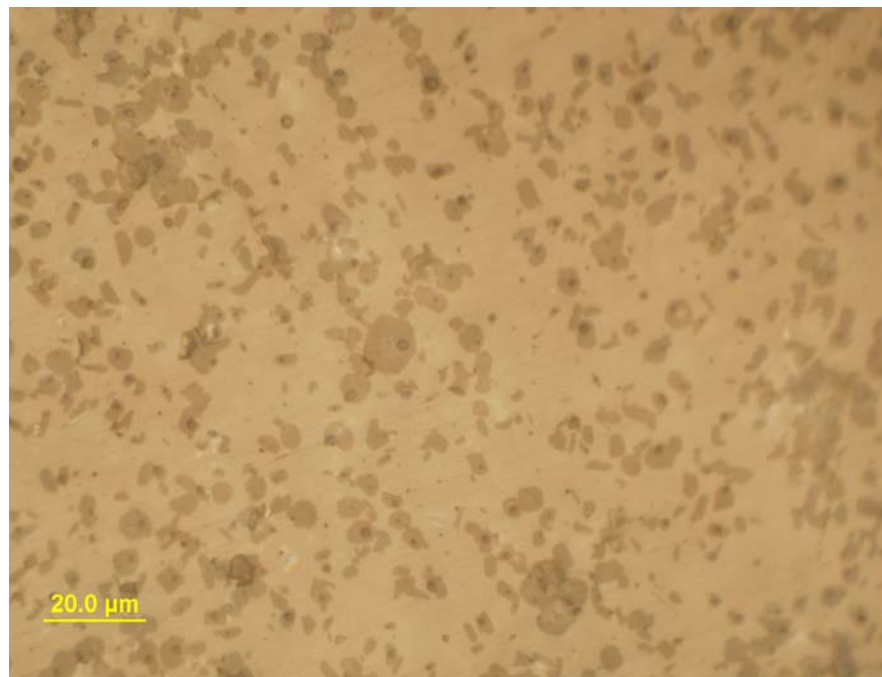


Рисунок 19 - Структура опытного композита $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$

Для исследования поровых структур в композиционных материалах применялся метод стереометрической реконструкции [61, 62].



Рисунок 20 - Поры в композите $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$

На рисунке 21 показана структура нанокompозита Al_2O_3 - ZrO_2 , свидетельствующая о наличии пор и трещин микронного размера. Отметим, что если размеры упрочняющих частиц $t\text{-ZrO}_2$ меньше размеров зерен Al_2O_3 матрицы, то частицы преимущественно размещаются в области стыков зерен матрицы. В этом случае формируется квазиравномерное распределение упрочняющих частиц в композите.

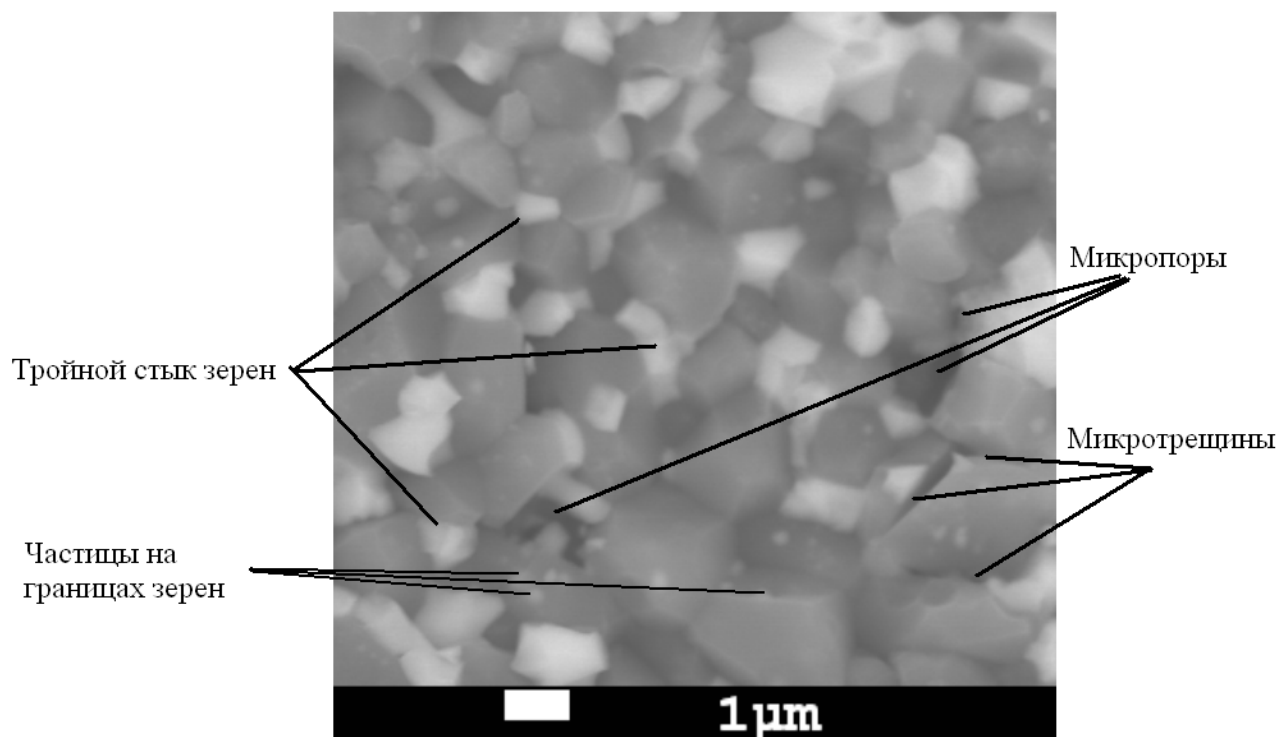


Рисунок 21– Упрочняющие частицы $t\text{-ZrO}_2$ в Al_2O_3 матрице

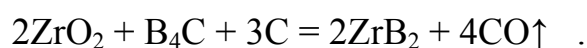
С помощью стереометрической реконструкции [61] были получены следующие характеристики поровой структуры: Количество пор в объеме 1 мм^3 : 6715456; среднеарифметическое значение диаметра (мкм): 0.76; пористость материала: 2.45%.

Поровые структуры присутствуют в керамических композитах на субструктурном уровне. Наличие макроскопических пор и трещин в образцах композитов не отмечено.

Поры субмикронного размера распределены в объеме матрицы неравномерно и образуют поровые кластеры. Форму, близкую к сферической,

имеют субмикронные поры. Поры с размерами, превышающими 1 мкм, имеют эллипсоидную форму. Для образцов керамических композитов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$, полученных методом горячего прессования, характерна ориентация главных осей эллипсоидных пор близка к 60° относительно направления прессования.

На рисунке 22 показана структура нанокompозита $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$. Светлыми выглядят зерна ZrB_2 , а дисперсные включения внутри зерен представляют частицы B_4C с размерами от 100 нм до 300 нм и агломератами до 1 мкм в сечении. Такая структура сформирована при горячем прессовании композиционных наноструктурных порошков производства ОАО «Сибирский химический комбинат» (г. Северск, Россия). Для получения порошков ZrB_2 применялся карбидборный способ на основе реакции [63]



В качестве исходных использовались химически чистые порошки ZrO_2 , полученные по плазмохимической технологии.

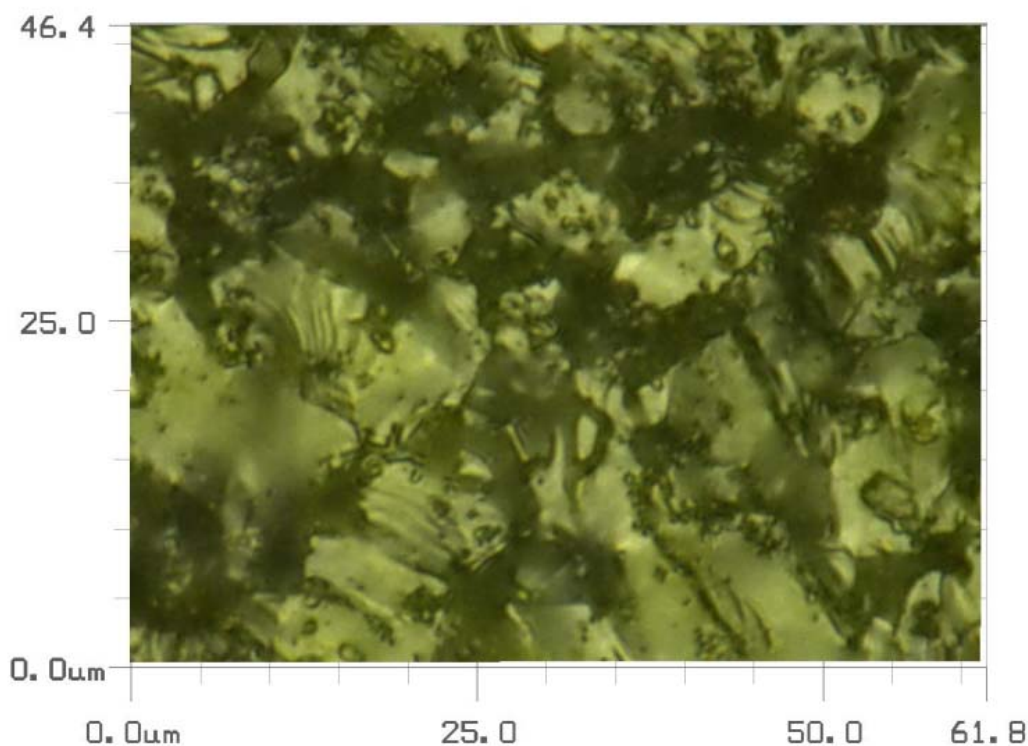


Рисунок 22 - структура нанокompозита $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$

Для данных порошков характерна высокая реакционная способность в смеси с порошком карбидом бора. В результате реакции было получено содержание ZrB_2 в синтезированных порошках более 98 масс %.

Измерения содержания фаз выполнены на рентгеновском дифрактометре ДРОН-УМ1с фильтрованным CuK_{α} -излучением. Анализ результатов выполнен с помощью программного комплекса RENEX. Точность определения фазового анализа не хуже 1%. Рентгенограмма полученного наноструктурного порошка композита ZrB_2 – B_4C приведена на рисунке 23 [63].

Для получения образцов нанокompозитов из порошков ZrB_2 - B_4C был использован метод неизостатического горячего прессования, позволяющий совместить процессы уплотнения и спекания тонкодисперсных порошковых систем.

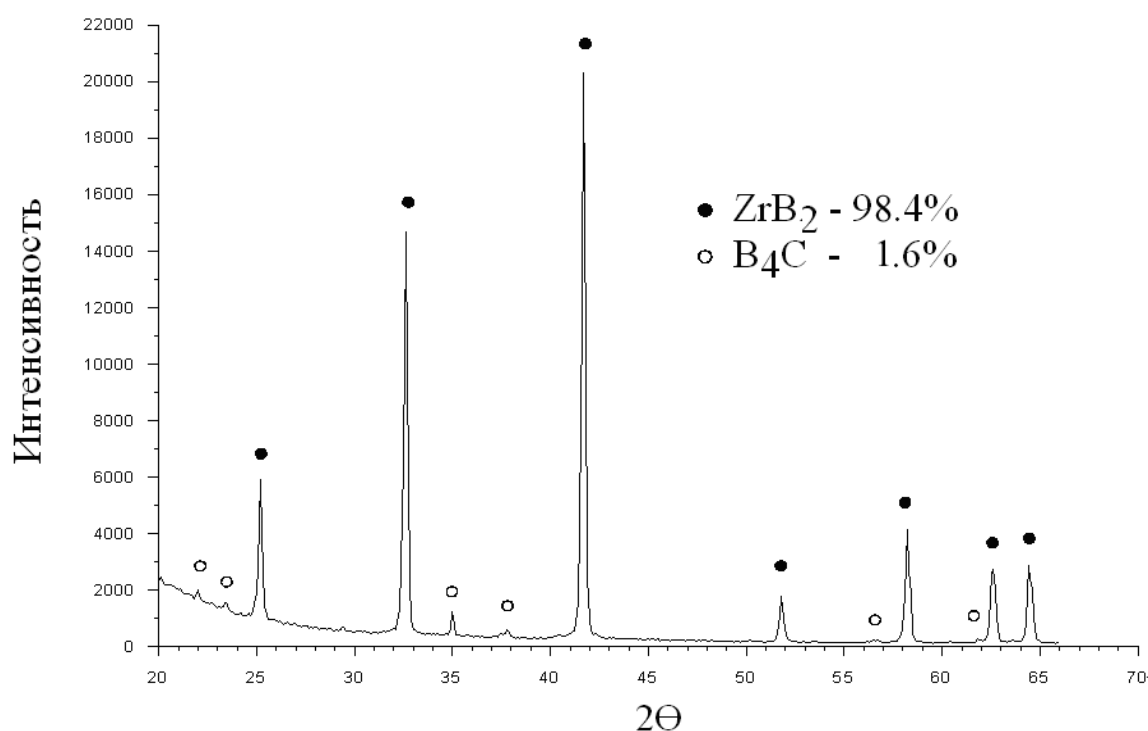


Рисунок 23 - Рентгенограмма порошка синтезированного диборида циркония.

Таким образом, при прогнозировании механического поведения керамических композитов и нанокompозитов Al_2O_3 - ZrO_2 , Al_2O_3 - B_4C , ZrB_2 - B_4C , ZrB_2 – t ZrO_2 , ZrB_2 – Al_2O_3 кроме интегрального относительного объема пор и

концентрации фаз должны быть учтены особенности субструктуры композитов на мезоскопическом уровне:

- распределение упрочняющих частиц по размерам;
- параметры пространственного взаимного расположения упрочняющих частиц (параметры кластеров частиц, образование каркасных структур при достижении предела перколяции в объеме);
- распределение пор по размерам и наличие поровых кластеров.

Возможность противоположного влияния фазового состава и указанных структурных факторов на величину эффектов упрочнения керамических композитов и нанокомпозитов является аргументом для их учета в многоуровневых моделях.

Рассмотренные классы керамических композитов и нанокомпозитов обладают характерными и для других керамических материалов типами организации структуры на мезоскопическом уровне.

Это позволяет использовать несколько типов моделей гетерогенных систем, отражающих организацию структуры объемных керамических композитов и нанокомпозитов.

Выбор типа многоуровневой модели керамических композитов или нанокомпозитов зависит от нескольких структурных факторов:

- концентрация упрочняющих фаз,
- относительный объем пор,
- соотношение размеров зерна матрицы и упрочняющих включений,
- наличие кластеров частиц упрочняющих фаз (агломератов наночастиц) и кластеров фаз.

Для керамических композитов с объемным содержанием упрочняющих фаз или пор, превышающим пределы перколяции, должны применяться многоуровневые модели каркасного типа.

Для композитов с объемным содержанием упрочняющих фаз или пор, не превышающим пределов перколяции, должны использоваться многоуровневые

модели с со стохастическим и квазирегулярным распределением изолированных частиц упрочняющих фаз и пор в матрице.

Выбор модели с явным или неявным заданием распределения частиц и пор на мезоскопическом уровне зависит от соотношения средних размеров зерен матрицы и включений упрочняющих фаз и наличия кластеров частиц упрочняющих фаз и пор в матрице.

Кластеры частиц и пор с механической точки зрения эквиваленты крупным частицам и порам.

В настоящее время ведутся исследования по разработке континуальных и дискретных моделей и вычислительных методов для исследования и прогнозирования развития деформаций и разрушения структурно-неоднородных сред и композиционных материалов. Перспективным направлением вычислительной механики материалов является создание многоуровневых динамических моделей, учитывающих протекание взаимосвязанных физических процессов структурно-фазовых превращений и повреждения на разных масштабных уровнях.

Развитие данного направления применительно к перспективному классу наноструктурных композитов является актуальной в научном и практическом отношении задачей.

1.3 Подходы и методы многоуровневого динамического моделирования механического поведения керамических композитов и нанокompозитов при квазистатических и динамических нагрузках

Для моделирования механического отклика структурированных сред на внешние квазистатические и динамические воздействия применяются три разновидности многоуровневого подхода [74,75]:

- иерархический;
- моделирование системы структурных элементов среды с согласующимися граничными условиями;

- моделирование структурированного объема с заданием граничных условий на различных масштабных уровнях.

Во всех подходах к прогнозированию механического поведения наноструктурных материалов допускается рассмотрение структурированных представительных объемов материала, элементов структуры (блоков, зерен, кристаллитов и др.), элементарных объемов кристаллической решетки присутствующих в материале фаз.

С указанными структурными уровнями механической системы связаны термодинамические параметры состояния и характерные времена протекания процессов неупругих деформаций и разрушения на разных структурных уровнях.

Выделение характерных структурных уровней сопряжено с необходимостью моделирования отклика системы в рассматриваемом диапазоне времени с использованием либо кинетических уравнений развития неупругих деформаций и повреждений, либо соответствующих эволюционных уравнений.

В первом случае, при моделировании деформации и разрушения системы требуется интегрирование во времени кинетических уравнений, во втором требуется построение функций отклика дискретных элементов, с учетом влияния эволюции физико-механических свойств дискретных элементов.

Процессы деформации и разрушения на макроскопическом, мезоскопическом и микроскопическом уровнях могут быть описаны в рамках двух- или трехуровневой моделей. Описание процессов на каждом масштабном уровне допускает использование различных дискретных и дискретно-континуальных подходов, использующих соответствующие пространственно-временные шаги дискретизации. При этом требуется обеспечение скейлинга описания системы на разных структурных уровнях.

В рамках развиваемого многоуровневого подхода динамический отклик материальной частицы определяется в форме совокупности параметров состояния, соответствующих дискретным моментам времени для набора заданных режимов нагружения. Эти совокупности параметров состояния

определяются в результате моделирования отклика модельных объемов структурированной среды.

Поскольку конструкционные и композиционные керамические материалы всегда на микроскопическом уровне являются структурированными, для определения макромеханических свойств материалов необходимо определить минимальный модельный объем для которого воспроизводятся статистические характеристики физико-механических свойств. Этот объем принято называть представительным элементарным объемом (Representative Volume Element - RVE) [76].

Вычислительная механика материалов широко использует принцип гомогенизации свойств в RVE структурированного материала при построении определяющих уравнений. Это позволяет использовать для описания процесса деформации твердых тел, структурированных на микро-мезо-макро уровнях, математический аппарат механики сплошных сред. При этом объем информации и количество описывающих структуру материала параметров на каждом уровне существенно уменьшается, что упрощает построение определяющих уравнений для макроскопического уровня.

Представительный объем материала эквивалентен объему материальной частицы сплошной среды и имеет конечные геометрические размеры. Выбор минимальных размеров представительного объема должен обеспечивать, с одной стороны, получение одинаковых статистически усредненных значений физико-механических параметров для возможных внутренних структур, а с другой - независимость усредненных значений от граничных условий, задаваемых для RVE. Вопрос о существовании RVE для рассматриваемых структурированных твердых тел не является тривиальным.

В соответствии с известным принципом «макро- мезо- микро» размеры RVE должны быть такими, чтобы быть меньше размеров тела, но настолько большим, что включать такое количество взаимодействующих структурных элементов более низкого уровня, которое обеспечивает возможность получения одинаковых статистически усредненных параметров. Вместе с тем, известно, что

в процессе неупругих деформаций, зарождения и развития повреждений в твердых телах происходит изменение структуры на разных масштабных уровнях. Структурные изменения сопровождаются возникновением локальных ориентированных напряжений и пространственной неоднородности мгновенных распределений удельной внутренней энергии в RVE. Существенно, что в открытых термодинамических системах, к которым относятся твердые структурированные тела в условиях активного нагружения, могут протекать процессы самоорганизации структурных превращений и возникать коллективные эффекты. При этом в структуре может возникать новая подструктура, например, блочная [5-10, 14-18]. Таким образом, в условиях динамических воздействий, размеры представительного объема для деформируемых структурированных систем могут существенно увеличиваться.

В случае применения многоуровневых вычислительных моделей, опирающихся на подходы континуальной механики, появляется необходимость определения размеров представительных объемов на каждом уровне.

Еще одной проблемой, связанной с моделированием процессов разрушения хрупких и квазихрупких тел, является определение представительного объема материала при наличии неоднородных полей напряжений и деформаций, формирующихся вблизи пор и трещин.

Основные предположения при определении размера RVE керамических композитов и нанокompозитов состоят в следующем:

- в представительном объеме отсутствуют трещины, разделяющие его на части и являющиеся свободными поверхностями;
- на границах представительного объема отсутствуют концентраторы напряжений в виде бороздок, лунок и зубцов;
- допускается возможность зарождения трещин в конденсированной фазе RVE на микроскопическом уровне.

Геометрические размеры RVE зависят не только от структуры композита, но и условий нагружения при которых определяется механический отклик материала. Это связано с возможностью появления коллективных явлений при

формировании блочной фрагментированной структуры, ветвлении мезоскопических трещин.

В настоящее время развитие многоуровневых моделей применительно к наноструктурным керамическим материалам происходит по пути управления дилатансионными эффектами (подход Николаевского) и с учетом особенностей изменения предельной поверхности по мере накопления необратимых деформаций (подход Рудницкого и др.) либо с учетом эволюции трещинно-поровой структуры хрупкого материала (кинетические модели прочности) [21-24].

Учет влияния структуры материала в феноменологических определяющих уравнениях и уравнениях кинетики повреждения для керамических материалов представляет серьезную сложность. В рамках развиваемого многоуровневого подхода динамический отклик материальной точки макроскопического уровня определяется в форме совокупности параметров состояния, соответствующих дискретным моментам времени для набора заданных режимов нагружения. Эти совокупности параметров состояния определяются в результате моделирования отклика модельных объемов структурированной среды.

Поскольку керамические композиты на мезоскопическом уровне являются структурированными, для определения макромеханических свойств материалов необходимо определить представительный объем композита, для которого воспроизводятся статистические характеристики механических свойств при различных выборках его размещения в структурированной среде.

Отметим, что геометрические размеры модельного RVE зависят от структуры материала и условий нагружения. Это обусловлено возможностью реализации коллективных явлений в структурированной хрупкой среде (формирования блочной структуры, ветвления микротрещин и др.).

Для создания модели представительного элементарного объема (RVE) в керамических наноструктурированных материалах были использованы результаты исследования микроструктуры на разных масштабных уровнях.

Разрушение керамических композитов и нанокомпозитов всегда связано с локальным зарождением отдельных повреждений вблизи пор или границ раздела фаз [21-22].

Развитие повреждений – микротрещин или микропор, как правило, происходит в динамическом режиме и сопровождается быстрым изменением локального напряженного состояния.

Современные перспективные керамические материалы с повышенными прочностными свойствами и трещиностойкостью используют, как правило, нескольких физических механизмов упрочнения [66].

Для керамических материалов повышение параметров трещиностойкости при $\theta < 0,2$ может быть связана со следующими механизмами упрочнения:

- ветвлением трещины при взаимодействии кончика со стыками зерен, границами упрочняющих фаз;
- образованием перемычек на краях трещин (bridging) из удлиненных частиц, волокон, нанотрубок, содержащихся в керамической матрице;
- смыканием краев трещин в результате дилатансионного увеличения объема в частицах оксидных фаз (ZrO_2 - Y_2O_3 , ZrO_2 - CeO_2 , ZrO_2 - MgO , Ln_2O_3 , Ca_2SiO_3) при мартенситных фазовых переходах,
- увеличением поверхности разрушения при огибании трещиной упрочняющей частицы.

Однако, роль указанных механизмов и их эффективность, с точки зрения повышения динамической прочности и трещиностойкости, изучены не достаточно полно.

В настоящее время для оценки и прогнозирования параметров трещиностойкости композиционных и структурно-неоднородных материалов интенсивно развиваются методы вычислительной механики материалов [1-14]. Одним из перспективных подходов является многоуровневое компьютерное моделирование процессов деформации и разрушения структурно-неоднородных сред.

При создании физико-математической модели для исследования кинетических процессов повреждения и разрушения композиционных материалов с оксидной керамической матрицей, наполненных субмикронными включениями, были учтены данные исследования микроструктуры опытных материалов на разных масштабных уровнях.

Для изучения закономерностей деформации, развития повреждений и разрушения хрупких и гетерогенных конденсированных сред в условиях интенсивных динамических воздействий успешно используется многоуровневое компьютерное моделирование [5-29].

Закономерности повреждения хрупких сред с поровыми структурами на мезоскопическом уровне при квазистатических воздействиях могут быть описаны на основе дискретного подхода [5,6]. Применение многоуровневого моделирования позволило выявить факт образования блочных структур при разрушении хрупкой среды с поровыми структурами в результате самоорганизации процессов повреждения [5,6]. Показана важность учета пространственной организации поровых структур на скорость зарождения микротрещин и формирование распределения фрагментов по размерам.

Применение многоуровневого моделирования для двухфазных керамических композитов с трансформационно-упрочненной матрицей позволило установить, что повышение вязкости разрушения композитов Al_2O_3 -t ZrO_2 при динамических воздействиях связано с интенсификацией интеркристаллитного разрушения зерен матрицы вблизи упрочняющих частиц [7,8]. Показано, что применение двухуровневых моделей, учитывающих размеры упрочняющих частиц t ZrO_2 при концентрации до 30 об. %, позволяет получать прогнозы прочности при сжатии плотных керамических композитов Al_2O_3 -t ZrO_2 при квазистатических и импульсных воздействиях.

Многоуровневое моделирование процессов деформации и разрушения пористой ZrO_2 керамики с гетерогенной матрицей на основе метода подвижных клеточных автоматов позволило выявить закономерности зарождения

микротрещин и развития разрушения хрупких материалов в зоне подвижного трибоконтакта [9,10].

Керамические материалы при гомологических температурах ($\theta = T/T_m$) меньших 0,2 разрушаются как типично хрупкие материалы. Хрупкое разрушение при интенсивных динамических воздействиях определяется кинетикой зарождения и роста трещин и зависит от скорости нагружения.

На рисунке 24 показана схема развития разрушения хрупких сред при высокоскоростной деформации, предложенные Д. Грэди и Киппом [65]. При высоких скоростях деформации разрушение хрупких конструкционных материалов является результатом кинетических процессов развития микроповреждений в структуре материалов.



Рисунок 24 – Схематические диаграммы

Для исследования кинетики повреждения и фрагментации хрупких поликристаллических материалов предложены модели, позволяющие прогнозировать нелинейное возрастание сдвиговой прочности керамических материалов при увеличении гидростатического давления [11-13].

Развитие подхода многоуровневого моделирования в гетерогенных средах с различной реологией, позволяет прогнозировать протекание нестационарных и динамических процессов повреждения и фрагментации сред [14-23]. Полученные

результаты свидетельствуют о необходимости учета структуры композиционных материалов и геологических сред на мезоскопическом уровне для получения адекватных прогнозов их макроскопической деформации и разрушения с помощью многоуровневого моделирования.

Показано, что для моделирования могут быть использованы сеточные и бессеточные численные методы [5-23]. Бессеточные методы (метод дискретных элементов (Discrete Element Method - DEM), метод сглаженных частиц (Smooth Particle Hydrodynamics - SPH), метод подвижных клеточных автоматов (Moveable Cellular Automata - MCA)) позволяют описывать большие деформации, локализованные по границам блоков сдвиги, фрагментацию объемов сред.

При использовании сеточных методов для описания процессов разрушения и смещения фрагментов мезоскопического уровня требуется применение алгоритмов разделения сеток и перестроения сеток с явным выделением поверхности разрушения [67-71]. Использование подобных алгоритмов сопряжено с потерей точности решения.

Таким образом, представляет интерес развитие подхода многоуровневого моделирования для исследования и прогнозирования процессов деформации, повреждения и разрушения керамических композитов и нанокompозитов при динамических нагрузках.

2 Численное моделирование механического поведения объемных керамических композитов при интенсивных динамических нагрузках

2.1 Двухуровневая модель механического поведения объемных керамических композитов с учетом структурных факторов в условиях интенсивного динамического нагружения

Для исследования процессов деформации, повреждения и разрушения керамических композитов и нанокомпозитов при интенсивных динамических воздействиях была разработана двухуровневая физико-математическую модель гетерогенной конденсированной среды, явно учитывающая распределение фаз и пор на мезоскопическом уровне.

Модель предназначена для использования при численном моделировании механического поведения представительных модельных объемов хрупких двухфазных композитов и нанокомпозитов при интенсивных импульсных воздействиях с амплитудами при которых не происходят фазовые мартенситные превращения в матрице и включениях. Для рассмотренных керамических материалов на основе Al_2O_3 , B_4C , ZrB_2 и ZrO_2 амплитуда импульсов не должна превышать ~ 12.5 ГПа (12.5 ГПа - давление перехода тетрагональной фазы ZrO_2 в орторомбическую II фазу [77]).

При построении модельного RVE необходимо обеспечить соответствие статистических параметров распределения структурных параметров модели и исследуемого структурированного материала. Для этого целесообразно определить параметры распределения характеристик структурных элементов – средние статистические значения и параметры статистического распределения зерен, упрочняющих частиц, пор, дискообразных трещин и др.

Отметим, что в случае многомодальных распределений характерных геометрических размеров выделяемых структурных элементов, статистическая выборка может быть разбита на части, для которых могут быть введены одномодальные функции распределения. Этот метод был ранее предложен при

построении модельных RVE пористых керамических материалов с бимодальным распределением размеров пор [7].

При определении размеров представительного объема композита и реализуемых в нем параметров структуры целесообразно использовать безразмерные параметры – объемные концентрации элементов структуры, нормированные геометрические параметры элементов структуры.

Для удобства построения многоуровневых моделей структурированных сред удобно строить модели представительного объема композита в форме прямоугольного блока или куба. Объемная концентрация C_n структурных элементов, например, включений фазы n с идеализированной сферической формой определяется соотношением

$$C_n = \frac{n V_{inc}}{V} = \frac{n_n (4/3)\pi(d_n^3/8)}{a^3} = n_n (\pi/6)(\xi_n)^3, \quad (1)$$

где n_n – число структурных элементов n – го типа в RVE, $\xi_n = d_n / a$, d_i – размер структурного элемента, a – характерный размер представительного объема композита кубической формы.

Характерный размер представительного объема композита кубической формы $a = \max\{d_n / \xi_n\}$ должен быть достаточным для получения статистически усредненных параметров структуры и физико-механических параметров материала (модулей упругости, массовой плотности, прочностных параметров и др.).

Наибольшую сложность представляет построение представительного объема композита для исследования прочностных свойств в условиях динамического нагружения. Это связано с возможностью образования новой структуры в результате развития неупругих деформаций или повреждений.

Алгоритм определения модельного представительного объема композита в этом случае предусматривает генерацию модельного объема с регулярным, либо стохастическим распределением структурных элементов при минимальном

параметре $\xi \leq 0.01$. В указанном объеме выделяется несколько, как правило, не менее пяти частичных объемов с уменьшающимися характерными размерами и $0.01 \leq \xi < 0.04$.

Выполняется численное моделирование процессов динамического нагружения этого структурированного объема в рамках принятых моделей механического поведения и повреждения материальных частиц микроскопического уровня для комбинации условий нагружения. Условия нагружения выбираются в границах исследуемых диапазонов нагрузок – амплитуды, длительности, температуры и др.

Моделирование процессов динамического нагружения модельного объема структурированной среды может быть выполнено с использованием различных численных методов (метода конечных разностей, дискретных элементов, сглаженных частиц, подвижных клеточных автоматов и др.).

В результате моделирования для дискретных моментов времени в частицах, узлах сетки и элементах определяются локальные значения компонент вектора массовой скорости, тензоров деформаций, напряжений, удельной внутренней энергии и т.д. Эти параметры могут быть использованы для статистического анализа изменения параметров механического состояния в выделенных частичных объемах.

Критерий χ^2 позволяет определить минимальный характерный размер частичного объема, достаточного для получения среднего значения параметра $\langle \phi \rangle$ с заданной точностью.

Наноккомпозиты могут рассматриваться как разновидность композитов, структурные элементы которых имеют субмикронные размеры.

Структурные элементы, в основном, связаны между собой по внутренним границам и образуют внутреннюю структуру наноккомпозитов.

Для определения физико-механических свойств наноккомпозитов могут быть введены представительные объемы материалов. В этом случае механическое состояние структурных элементов наноккомпозитов может быть описано в рамках подхода механики сплошной среды в элементарных объемах

фаз, а механическое поведения нанокомпозитов будет характеризоваться усредненными в представительном объеме нанокомпозитов параметрами состояния.

Структурными элементами нанокомпозитов являются зерна (кристаллиты), агломераты кристаллитов, образующие частицы, зернограничные области, области тройных стыков зерен, поры и микротрещины.

Поры, размеры которых сопоставимы с размерами зерна нанокомпозитов, могут быть введены в структурированный представительный объем в виде полостей со свободными от напряжений поверхностями.

Нанопоры и кластеры вакансий кристаллических фаз из-за существенного различия в размерах не могут явным образом быть введены в структуру представительного объема.

Наличие нанопор может быть учтено неявно, через изменение механических свойств конденсированных фаз. В этом случае удобно воспользоваться подходами механики сред с повреждениями.

Модель представительного объема многофазных конденсированных систем должна отражать объемные концентрации зерен n фазы C_{gn} , объемные концентрации зернограничных фаз C_{gbn} , относительного объема областей тройных стыков зерен C_{tjn} , относительного объема пор ξ , количества микротрещин в единичном объеме представительного объема n .

$$C_{gn} = \frac{(d_n - 2\delta)^2}{d_n^2}, \quad C_{gb} = \frac{4(d_n - 2\delta)\delta}{d_n^2}, \quad C_{tjn} = \frac{4\delta^2}{d_n^2}, \quad \xi = \frac{V_p}{V_{RVE}}, \quad (2)$$

где d_n – средний размер зерна n фазы, δ – толщина межзеренной области,

V_p – интегральный объем пор в представительном объеме композита или нанокомпозита,

V_{RVE} – представительный объем.

Форма элементов структуры определяет форму внутренних контактных поверхностей, по которым происходит механическое взаимодействие между ними.

Форма поверхностей контакта, наличие полостей пор определяют значения коэффициентов концентрации напряжений в представительном объеме нанокompозита.

Могут быть введены коэффициенты концентрация напряжений на мезоскопическом уровне

$$K_s = \sigma_{\max}/\sigma_H, K_t = \tau_{\max}/\tau_H, \quad (3)$$

где σ_H и τ_H – эффективные (усредненные по представительному объему) напряжения (σ – нормальное, τ – касательное напряжение).

Величины K_s и K_t не связаны со свойствами материала, а зависят от вида деформации и типа напряжённого состояния, вида концентратора напряжений, формы элементов структуры, размера элементов структуры.

Относительный максимальный градиент напряжений определяется по формуле

$$K_g = (d \sigma_{ij} / d x_j)_{\max} / \langle d \sigma_{ij} / d x_j \rangle. \quad (4)$$

где $\langle d \sigma_{ij} / d x_j \rangle$ – среднее значение градиента напряжения в представительном объеме композита.

В условиях интенсивных динамических воздействий на материал, деформация структурных элементов и пор развивается во фронте волн напряжений.

На масштабном уровне элементов структуры реализуется динамическое нагружение, которые определяется взаимодействием волн напряжений. При этом поля массовой скорости, напряжений и деформаций становятся не только нестационарными, но и неоднородными.

Таким образом, для прогнозирования динамического разрушения керамических композитов и нанокompозитов с концентраций упрочняющих фаз менее предела перколяции и относительными размерами упрочняющих частиц (или их кластеров) d_{inc}/d_n превышающими 0.1 может применяться многоуровневая модель с явным заданием включений и их пространственного расположения в представительном объеме композита.

Геометрические размеры представительного объема композита содержат упрочняющие частицы, керамическую матрицу и поры.

Пусть 3D пространственная область RVE керамического композита имеет объем V_{RVE} и поверхность Γ_{RVE} , для которых определены материальные частицы фаз (См. рис 25). Координаты частиц удобно определять в декартовом базисе.

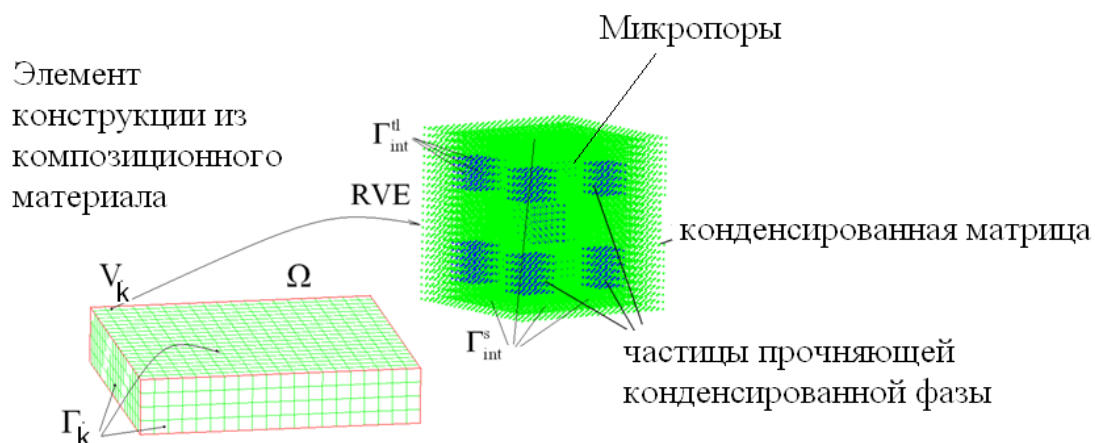


Рисунок 25–Макроскопический и мезоскопический уровни в керамических композиционных материалах

Граница Γ_{RVE} пространственной области V_{RVE} образована фрагментами поверхности Γ_i на которых заданы граничные условия, определяющие внешние воздействия на элемент конструкции.

Внутренние поверхности $\Gamma_{int}^s, \Gamma_{int}^{dl}$ - определяют разделение представительного объема композита на локальные объемы, заполненные конденсированными фазами с различными физико-механическими свойствами или псевдо частицами, составляющими объем пор или мезоскопических трещин.

Поверхности раздела $\Gamma_{\text{int}}^s, \Gamma_{\text{int}}^{\text{tl}}$ в общем случае не являются плоскими. На контактных поверхностях, разделяющих фазы, взаимодействие частиц имеющих разные механические свойства допускает сдвиг и сжатие-растяжение.

На частях Γ_k границы области V_k заданы условия воздействий в виде кинематических, динамических или смешанных граничных условий (см. рисунок 26)

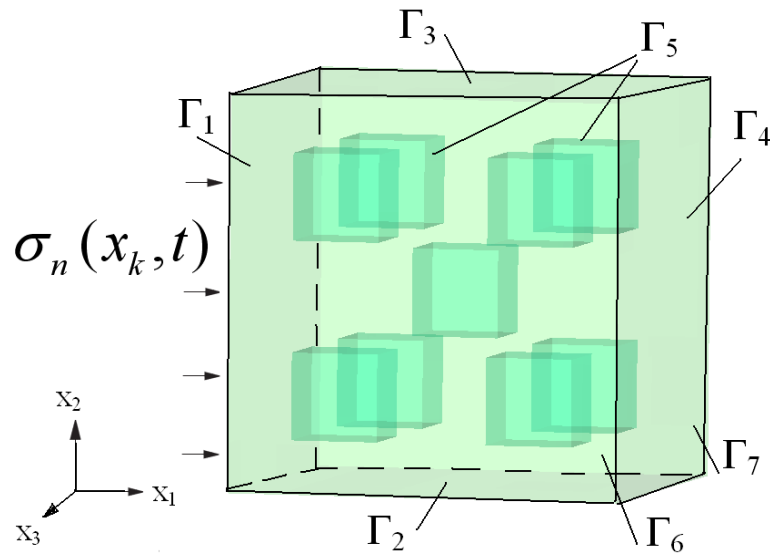


Рисунок 26 – Граничные условия для представительного объема

В динамических задачах нагружение материала происходит во фронте волн напряжений. В этом случае граничные условия для представительного объема могут быть заданы в следующем виде:

$$\begin{aligned} u_1(x_k, t) &= \phi(x_k, t) \text{ либо } \sigma_n(x_k, t) = F(x_k, t), \quad x_k \in \Gamma_1, k=1, 2, 3, \\ u_2(x_k, t) &= 0, \quad x_k \in \Gamma_2, x_k \in \Gamma_3. \quad u_3(x_k, t) = 0, \quad x_k \in \Gamma_6, x_k \in \Gamma_7. \\ p &= u_n[\rho C]_{\Gamma_4}, \quad x_k \in \Gamma_4, \end{aligned} \quad (5)$$

где $u_i(x_k)$ - компоненты скорости материальных частиц,

p – давление,

ρ – массовая плотность,

C – среднее значение продольной скорости распространения волны напряжения в гетерогенной среде.

Начальные условия определяют значения параметров механического состояния $(u_i(x_k), \sigma_{ij}(x_k), \varepsilon_{ij}(x_k), E(x_k))$ и массовой плотности в материальных точках представительного объема композита в начальный момент времени:

$$u_i(x_k) = u_i^{(0)}, \sigma_{ij}(x_k) = \sigma_{ij}^0(x_k), \rho(x_k) = \rho^{(0)}(x_k), \varepsilon_{ij}(x_k) = \varepsilon_{ij}^0(x_k), E(x_k) = E^0(x_k), \quad (6)$$

где $\sigma_{ij}(x_k)$ - компоненты тензора напряжений,

$\rho(x_k)$ - массовая плотность,

$\varepsilon_{ij}(x_k)$ - компоненты тензора деформаций,

$E(x_k)$ - удельная внутренняя энергия

$\sigma_{ij}^0(x_k), \varepsilon_{ij}^0(x_k), E^0(x_k)$ - параметры механического состояния, соответствующие начальному напряженно-деформированному состоянию на мезоскопическом уровне.

Значения $\sigma_{ij}^0(x_k), \varepsilon_{ij}^0(x_k), E^0(x_k)$ могут приниматься нулевыми или иметь заданные значения в зависимости от уровня остаточных напряжений, возникших в процессе производства композитов.

Термодинамическое состояние системы описывается полем температуры и значениями внутренней энергии.

Для материальных частиц мезоскопического уровня могут быть введен тензор скорости деформаций, компоненты которого определяются соотношением Стокса:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i), \quad (7)$$

где u_i — компоненты скорости материальных частиц.

Представим тензор скорости деформации в виде суммы объемной и девиаторной составляющих:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{3} \dot{\theta} \delta_{ij} + \dot{e}_{ij}, \quad (8)$$

где $\dot{\theta} = \dot{\varepsilon}_{kk}$ - скорость объемной деформации,

$\dot{\varepsilon}_{ij}$ - компоненты девиатора тензора скорости деформации.

Компоненты тензора скорости деформации и, соответственно, его объемной и девиаторной составляющих могут быть представлены в виде суммы упругих и неупругих составляющих

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \quad (9)$$

$$\dot{\theta} = \dot{\theta}^e + \dot{\theta}^p, \quad (10)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \quad (11)$$

где $\dot{\varepsilon}_{ij}^e = \dot{\varepsilon}_{ij}^e - \frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_{kk}^e \delta_{ij}$ - компоненты девиатора тензора скорости упругой деформации.

Поры, имеющие размеры, сопоставимые с размерами включений или зерна должны задаваться в многоуровневой модели представительного объема композита явно.

Наличие в конденсированных фазах матрицы, упрочняющих включений и границ раздела нанопор, вакансий в модели учитывается через поправку в начальные значения соответствующих массовых плотностей:

$$\rho_n = \rho_{cn} (1 - \alpha_{dn}), \quad (12)$$

где ρ_{cn} - теоретическая плотность кристаллической фазы n,

α_{dn} - параметр поврежденности кристаллической фазы n, связанный с наличием дефектов конденсированных фаз на наноуровне.

Определяющие соотношения вводятся для каждой конденсированной фазы.

Для материальных частиц мезоскопического уровня выполняются уравнения сохранения массы, импульса и энергии. В лагранжевой системе они имеют вид:

$$\dot{\rho}/\rho = (\rho/\rho_0) \nabla_i u_i, \quad (13)$$

$$\rho \frac{du_j}{dt} = \nabla_i \sigma_{ij}, \quad (14)$$

$$\rho \dot{E} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}, \quad (15)$$

где ρ_0 - начальная массовая плотность;

E - удельная внутренняя энергии; точками обозначены производные по времени;

∇_i - оператор Гамильтона.

Компоненты тензора напряжения вычисляются с использованием разложения на шаровую и девиаторную составляющие

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}, \quad (16)$$

где σ_{ij} - компоненты тензора напряжения,

δ_{ij} - символ Кронекера,

p - давление в конденсированной фазе поврежденной среды,

S_{ij} - компоненты девиатора тензора напряжения.

Для учета зарождения и эволюции микроповреждений конденсированной фазы в процессе деформации сред использован подход механики сред с повреждениями [7, 78,79].

В рамках этого подхода влияние на напряженно-деформированное состояние в материальной точке среды вследствие возникновения трещин на более низком структурном уровне учитывается с помощью параметра поврежденности D . С точки зрения механики иерархических структурированных систем параметр поврежденности отражает присутствие на более низком масштабном уровне дефектов среды.

Значение скалярного параметра поврежденности D , в соответствии с классической теорией Качанова–Работнова, отражает текущее состояние поврежденности материальной точки среды и представляет монотонно возрастающую функцию времени $0 \leq D \leq 1$, причем $D=0$ для начального неповрежденного состояния и $D=1$ для состояния полного разрушения [50].

При зарождении повреждений материальных частиц мезоскопического уровня определяющее уравнение принимает вид :

$$\sigma_{ij} = (-p^c \delta_{ij} + S_{ij}^c)(1 - D), \quad (17)$$

где D – параметр поврежденности,

p^c - давление в конденсированной фазе,

S_{ij}^c - компоненты девиатора напряжения в конденсированной фазе.

Для расчета давления в керамических соединениях в условиях сжатия применяется уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена с использованием потенциала Берча-Мурнагана

$$p = p_c + \gamma \rho_0 E, \quad \text{при сжатии} \quad \theta > 0, \quad (18)$$

$$P(t) = \frac{3}{2} \cdot B_0 \cdot (\xi(t)^{-7/3} - \xi(t)^{-5/3}) \cdot (1 - \frac{3}{4}(4 - B_1) \cdot (\xi(t)^{-2/3} - 1)), \quad (19)$$

$$p = K_1 \theta, \quad \text{при растяжении} \quad \theta \leq 0, \quad (20)$$

где γ - коэффициент Грюнайзена,

$B_0 = \rho_0 \cdot C_b^2$ - модуль объемного сжатия,

$B_1 = 4 \cdot \lambda - 1$,

$\xi(t) = \rho_0 / \rho(t)$.

При давлениях до 10 ГПа может применяться уравнение состояния в полиномиальной форме:

$$\begin{aligned} p &= K_1\theta + K_2\theta^2 + K_3\theta^3 + \gamma\rho_0 E, & \text{при сжатии } \theta > 0, \\ p &= K_1\theta, & \text{при растяжении } \theta < 0, \end{aligned} \quad (21)$$

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

Компоненты девиатора тензора напряжения находятся из решения уравнения

$$\frac{dS_{ij}^c}{dt} = 2\mu(\dot{\epsilon}_{ij}^c - \frac{1}{3}\dot{\epsilon}_{kk}^c \delta_{ij}), \quad (22)$$

$$\frac{dS_{ij}^c}{dt} = \dot{S}_{ij}^c - S_{ik}^c \dot{\omega}_{jk} - S_{jk}^c \dot{\omega}_{ik}, \quad (23)$$

$$\mu = \mu_0^c (1 - \alpha_d) [1 + A_s p - B_s (T/T_m - 297\text{K}/T_m)], \quad (24)$$

где $\dot{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$

A_s, B_s - коэффициенты для кристаллических фаз,

T_m - температура плавления фазы,

μ_0^c - теоретическое значение модулей сдвига фаз (включений или матрицы)

при нормальных условиях.

Трещина в многоуровневой модели композита рассматривается как перколяционный кластер разрушенных материальных точек.

Параметр поврежденности D определяется как сумма дискретных приращений параметра поврежденности в процессе нагружения в интервале время от t_0 до $t_0 + m \Delta t$:

$$D = \sum_{i=1}^m \frac{[\Delta \epsilon_{eq}^p]_i}{\epsilon_f}, \quad (25)$$

где $\Delta D_i = \frac{[\Delta \varepsilon_{eq}^p]_i}{\varepsilon_f}$ - приращение параметра поврежденности за шаг времени Δt ,

$\Delta \varepsilon_{eq}^p$ - приращение интенсивности неупругой деформации за шаг времени Δt ,

ε_f - предельной деформации в момент разрушения.

Предельная деформация в момент разрушения ε_f для материальных частиц конденсированных фаз керамических композитов мезоскопического уровня, повреждаемых на более низком структурном уровне, зависит от давления и относительной величины интенсивности сдвиговых напряжений. Для описания предельной деформации в момент разрушения материальной точки конденсированной среды, имитирующей оксидные керамические материалы, было использовано соотношение, предложенное в [81]:

$$\varepsilon_f = D_1 (P^* + T^*)^{D_2}, \quad (26)$$

где D_1, D_2 - постоянные материала,

$$P^* = p / P_{HEL},$$

$$T^* = \sigma_{eq} / \sigma_{HEL}$$

P_{HEL} и σ_{HEL} - давление и значение главного напряжения на пределе упругости Гюгонио.

Рост параметра поврежденности D обуславливает и связан с развитием эффективных неупругих деформаций.

Для вычисления приращения неупругой деформации используется уравнение:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \lambda \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}}, \quad (27)$$

где $g = \left[\frac{3}{2} S_{ij} S_{ij} \right]^{1/2}$ – скалярная функция инвариантов тензора напряжений,

λ – малый множитель.

σ_s^c – сдвиговая прочность хрупкой среды в точке среды.

Текущее значение сдвиговой прочности поврежденного материала находится с учетом изменения сопротивления сдвигу конденсированной фазы σ_s^c [41]. Схема изменения эффективной сдвиговой прочности конденсированных фаз показана на рисунке 27.

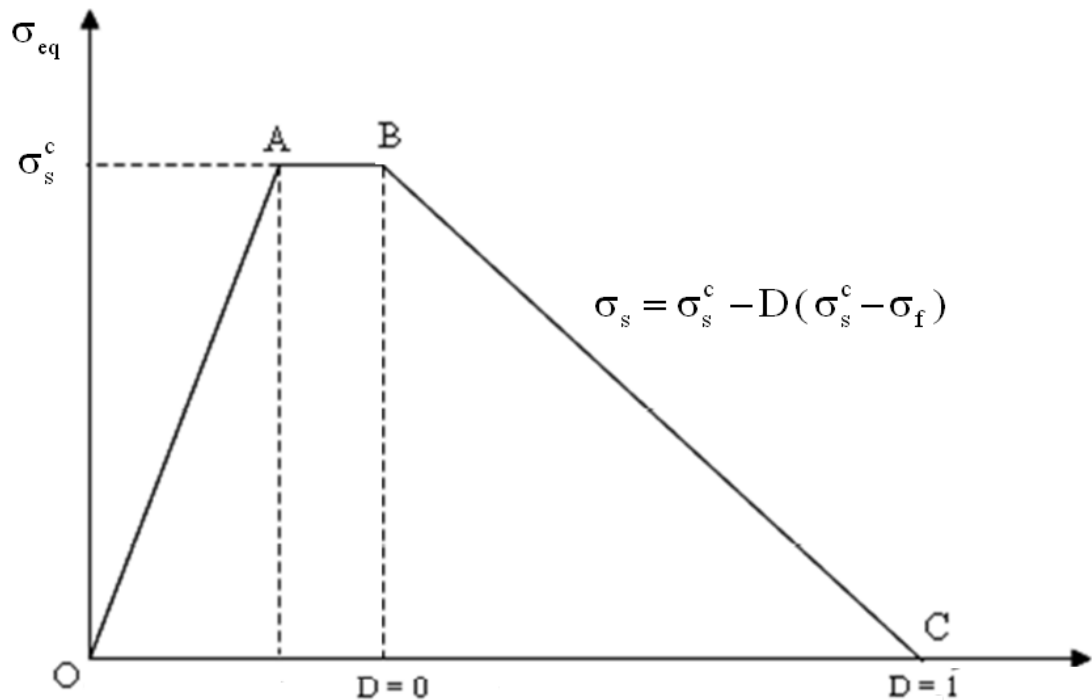


Рисунок 27 – Схема изменения сдвиговой прочности конденсированных фаз хрупких и квазихрупких керамических композитов

Сопротивление сдвигу в материальной точке поврежденной среды определяются полуфеноменологическими соотношениями (24)-(26):

$$\sigma_s = \sigma_s^c - D(\sigma_s^c - \sigma_f), \quad (28)$$

где σ_f – переменная величина сдвиговой прочности конденсированных фаз с повреждениями на более низком уровне.

Величина σ_f зависит от величины и знака давления, гомологической температуры (T/T_m) и скорости деформации.

Сдвиговая прочность квазихрупкой неповрежденной среды σ_s^c является функцией температуры, давления и скорости деформации.

Для σ_s^c и σ_f керамических материалов были использованы феноменологические соотношения, построенные для поликристаллических беспористых материалов в исходном состоянии [81-83]:

$$\sigma_s^c = A_1 (P^* + T^*)^{m_1} (1 + C_1 \ln \dot{\epsilon}), \quad (29)$$

$$\sigma_f = B_2 (P^*)^{m_2} (1 + C_2 \ln \dot{\epsilon}), \quad (30)$$

где $P^* = p/P_{HEL}$,

$$T^* = \sigma_{eq} / \sigma_{HEL}$$

P_{HEL} и σ_{HEL} - давление и значение главного напряжения на пределе упругости Гюгонио.

$A_1, B_2, C_1, C_2, m_1, m_2$ – постоянные материала,

$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_{eq} / \dot{\epsilon}_0$, $\dot{\epsilon}_0 = 1 [c^{-1}]$ - нормированная интенсивность тензора скорости деформации.

При решении динамических задач в которых керамические композиты и нанокompозиты деформируются в широком диапазоне температур необходим учет влияния температуры на свойства материала. Коррекция значений модуля сдвига при температурах, отличных от комнатной, выполняется с помощью соотношения (20), а коррекция σ_s^c и σ_f с помощью соотношений (27)

$$\sigma_s(T) = \left[\frac{T_m - T}{T_m - T_r} \right]^{m_3} \sigma_s|_{T=293K}, \quad \sigma_f(T) = \left[\frac{T_m - T}{T_m - T_r} \right]^{m_4} \sigma_f|_{T=293K}, \quad (31)$$

где $T_r = 293 \text{ K}$,

T_m – температура плавления,

m_3, m_4 – константы для материалов.

Для определения макроскопических свойств керамических композитов и нанокомпозитов на основе результатов моделирования на мезоскопическом уровне применяется метод гомогенизации кинематических параметров.

Усредненные значения скорости представительного объема определяется для момента времени, соответствующего выходу волны напряжения (возмущения) за границы RVE. Значения скорости представительного объема вычисляются усреднением локальных скоростей материальных частиц представительного объема с помощью соотношения:

$$\langle u_i \rangle = \frac{1}{V_{RVE}} \int_0^{V_{RVE}} u_i(x_k) dV. \quad (32)$$

Компоненты эффективного тензора скорости деформации и тензора изгиба–кручения вычисляются по формулам:

$$\langle \dot{\varepsilon}_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right], \quad \langle \dot{\omega}_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right], \quad (33)$$

где x_i – пространственные координаты центров соседних представительных объемов в объеме тела V_k (См. рисунок 25).

Компоненты тензора деформации в представительном объеме композита вычисляются с использованием соотношения

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_0^{V_{RVE}} \varepsilon_{ij} dV, \quad (34)$$

где ε_{ij} – компоненты тензора деформаций для материальных частиц мезоскопического уровня.

Эффективная массовая плотность представительного объема вычисляется с помощью соотношения

$$\langle \rho \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_0^{V_{RVE}} \rho(x_i) dV, \quad (35)$$

где $\rho(x_i)$ – локальные значения массовой плотности материальных частиц в текущий момент времени.

Эффективное значение удельной внутренней энергии представительного объема вычисляется с помощью соотношения

$$\langle E \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_0^{V_{RVE}} E(x_i) dV. \quad (36)$$

Значение приращения удельной внутренней энергии в текущий момент времени t определяется соотношением

$$\langle \Delta E \rangle = (1 / V_{RVE}) \sum_{n=1}^N \Delta E_n, \quad (37)$$

где $\langle \Delta E \rangle$ – приращение усредненной удельной внутренней энергии представительного объема композита за шаг по времени,

V_{RVE} – объем RVE,

N – количество дискретных частиц в RVE.

Компоненты тензора эффективных напряжений могут быть вычислены с использованием формулы

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \langle \Delta E \rangle / \langle \rho \rangle \langle \dot{\varepsilon}_{ij} \rangle \Delta t. \quad (38)$$

где $\langle \sigma_{ij} \rangle$ компоненты эффективного тензора напряжения в представительном объеме,

$\langle \rho \rangle$ усредненная массовая плотность в представительном объеме в текущий момент времени.

При усреднении параметров состояния на мезоскопическом уровне не допустимо усреднение компонент тензора напряжений и значений параметра поврежденности.

Предлагаемый способ определения эффективных значений параметров механического состояния макроскопического уровня при интенсивных динамических воздействиях удовлетворяет основным кинематическим уравнениям и уравнения сохранения массы, импульса и энергии.

Для определения эффективных значений модулей упругости гетерогенных сред с повреждениями и поровыми структурами предложен следующий алгоритм.

На основе результатов моделирования на мезоскопическом уровне распространения волны напряжения в структурированной среде определяется средняя скорость продольной упругой волны C_L . Значение C_L определяется по разности пройденного упругим предвестником осредненного расстояния за время Δt .

По полученным в расчетах профилям изменения средних значений массовой скорости в волне объемного сжатия определяется C_b

$$C_L = \frac{\langle \Delta x_1^L \rangle}{\Delta t}, \quad C_b = \frac{\langle \Delta x_1^b \rangle}{\Delta t}, \quad (39)$$

где $\langle \Delta x_1^L \rangle, \langle \Delta x_1^b \rangle$ – расстояния, пройденные упругим предвестником и фронтом волны объемного сжатия за время Δt .

Эффективное значение коэффициента Пуассона определяется соотношением

$$\langle \nu \rangle = [3 - \xi] / [3 + \xi], \quad \xi = (C_L / C_b)^2. \quad (40)$$

Эффективное значение модуля объемного сжатия определяется по формуле

$$\langle K_1 \rangle = C_b^2 / \langle \rho \rangle, \quad (41)$$

Эффективное значение модуля сдвига определяется соотношением

$$\langle \mu \rangle = \langle K_1 \rangle \frac{3(1 - 2\langle \nu \rangle)}{2(1 + \langle \nu \rangle)}. \quad (42)$$

В результате моделирования деформации и повреждения модельного представительного объема материала определяются изменения во времени полей компонент тензоров напряжений, деформаций, вектора скорости материальных частиц, а также температуры, удельной внутренней энергии, диссипированной энергии в результате развития неупругих деформаций и повреждений.

Приращение параметра поврежденности при положительном и отрицательном давлении обуславливает изменение объемных неупругих деформаций. Это позволяет учесть дилатансионный эффект при развитии неупругих сдвиговых деформаций, определяющих приращение параметра повреждения в материальной частице. Поврежденные материальные частицы при моделировании образуют кластеры в форме трещин и объемных областей.

Приращение удельной энтропии системы материальных частиц в представительном объеме материала могут быть вычислены с помощью уравнения

$$\Delta S = (1 / \bar{T}(t)) [\Delta E - \langle \sigma_{ij} \rangle \langle \dot{\epsilon}_{ij} \rangle \Delta t], \quad (43)$$

где S – удельная энтропия в представительном объеме,

$\bar{T}$ – усредненная температура,

ΔE – приращение удельной внутренней энергии,

$\langle \sigma_{ij} \rangle$ – компоненты тензора эффективных напряжений в представительном объеме,

$\langle \dot{\epsilon}_{ij} \rangle$ – компоненты эффективных тензора скорости деформаций.

Величина диссипированной внутренней энергии представительного объема за шаг по времени вычисляется с помощью формулы

$$\Delta E^p = (\beta / V_{RVE}) \sum_{n=1}^N (\dot{\epsilon}_{ij}^p \sigma_{ij})_n (V_n) \Delta t, \quad (44)$$

где n – индекс дискретных материальных частиц,

V_n – объем дискретных материальных частиц n ,

V_{RVE} – объем расчетной области, вмещающей N дискретных материальных частиц,

$\dot{\epsilon}_{ij}^p$ – компоненты скорости неупругих деформаций в материальной частице с индексом n ,

σ_{ij} – компоненты тензора деформаций в частице,

$\beta \approx 0,95$ – феноменологический коэффициент.

Величина удельной диссипированной энергии характеризует деформативные свойства керамических материалов. Усредненная в представительном объеме температура оценивалась с помощью соотношения

$$\bar{T} = \Delta E^p / \bar{C}_v \quad (45)$$

где $\bar{C}_v$ – эффективная величина удельной теплоемкости при постоянном объеме, вычисляемая для RVE по смесевой модели.

Соотношения (7) –(45) составляют систему уравнений двухуровневой модели механического состояния хрупких гетерогенных сред при интенсивных динамических воздействиях.

Граничные условия (5) и начальные условия (6) позволяют решать динамические задачи о деформации и разрушении представительных объемов керамических композитов и нанокompозитов.

Соотношения (1)-(4) применяются для построения расчетной области гетерогенной среды.

Соотношения (32)-(45) служат для определения эффективных модулей, и эффективных значений параметров состояния на макроскопическом уровне (компонент тензора деформаций, компонент тензора скоростей деформаций, компонент тензора напряжений, удельной внутренней энергии, приращения энтропии, температуры) керамических композитов и нанокompозитов.

Соотношения (12), (24), (29), (30) неявно учитывают наличие в конденсированных фазах композита дефектов низшего уровня по отношению к мезоскопическому (дислокаций, вакансий, наноразмерных пор и трещин).

Уравнения (13)-(15), (17)-(21), дополненные соотношениями (22)-(24), (27), обеспечивают возможность применения модели для решения задач об импульсных воздействиях на композиты и нанокompозиты.

Уравнения состояния в форме (17)-(24) позволяют моделировать интенсивные импульсные воздействия с амплитудами до десятков ГПа. Применение уравнений состояния ограничивается давлениями фазового перехода в конденсированных фазах керамических материалов. Вариант двухуровневой модели с уравнениями (29)-(30) ориентирован на использование для моделирования хрупких и квазихрупких керамических композитов при гомологических температурах, не превышающих 0.2 .

2.2 Численное моделирование механического поведения керамических композитов при интенсивных импульсных воздействиях с применением двухуровневой модели

Модель, описывающая механическую реакцию конденсированных сред с гетерогенной структурой на интенсивные динамические воздействия, определяет краевую задачу для гиперболической системы уравнений.

Для ее решения 3D задач в рамках выполненных исследований, были использованы конечно-разностный метод на основе схемы второго порядка точности [83,84] и модифицированный метод сглаженных частиц SPH [85-91].

Использовались как оригинальные программные комплексы, разработанные в Томском государственном университете, в которых были реализованы эти методы, так и лицензионный программный комплекс Workbench ANSYS Autodyn – 13 [92], дополненный определяющими уравнениями, моделью развития повреждений, критериями разрушения в виде модулей user subroutine (mdeos_user.f90, mdstr_user.f90, mdfai_user.f90).

Методика применения конечно разностного метода для исследования процессов деформации и повреждения в структурированных керамических материалах была разработана в диссертациях Е.Г. Пасько [93] и М.В. Коробенкова [94].

Для моделирования механической реакции керамических композитов на интенсивные импульсные воздействия был использован усовершенствованный вариант метода SPH, позволяющий более точно описывать распады разрыва в конденсированных средах [85, 86, 89].

В методе SPH объем сплошной среды представляется в виде совокупности дискретных контактирующих «сглаженных» частиц, которым приписываются масса m_i , массовая плотность ρ_i , компоненты вектора скорости u_i^r ($r = 1, 2, 3$), удельная внутренняя энергия E_i , компоненты тензора напряжения Коши σ_{ij} , давление p_i , компоненты тензора девиатора напряжения S_{ij} . Каждая частица получает свой порядковый номер i .

Вместо непрерывных функции описывающих изменение параметров состояния, (давление, плотность, энергию, скорость), вводится в рассмотрение её дискретный аналог f_i в соответствующих частицах.

Значение f_i для каждой частицы i вычисляется через сумму N величин f_j из частиц окружения j , окружающих частицы i на расстоянии сглаживания h , по уравнению:

$$f_i = \sum_{j=1}^N m_j \frac{f_j}{\rho_j} w_{ij}, \quad (46)$$

где $w_{ij} = w(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|, h)$ - сглаживающая функция.

Сглаживающая функция имеет размерность обратную размерности объема.

В данной работе для решения задач в 3D постановке была использована сглаживающая функция, заданная в форме кубического сплайна

$$w_{ij} = \begin{cases} (1 - 1.5q^2 + 0.75q), & 0 \leq q \leq 1 \\ (0.25(2 - q)^3) / \pi h^3, & 1 \leq q < 2 \\ 0, & q \geq 2 \end{cases} \quad (47)$$

где $q = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| / h$.

Учитывается взаимное влияние взаимодействующих частиц, передающих импульс и энергию в пределах дистанции $q < 2$ на оси взаимодействия частиц. Значение h должно быть выбрано с учетом изменения эффективных диаметров частиц d_i и d_j

$$h = 0.5k(d_i + d_j), \quad (48)$$

где $1 \leq k \leq 1.4$.

Для моделирования гетерогенных сред на мезоскопическом уровне преимущество лагранжевых методов заключается в использовании единых

соотношений для расчета параметров в точках, лежащих как внутри деформируемой области, так и на контактных границах внутри деформируемой области и движение её внешних границ.

Производная сглаживающей функции определяется соотношениями:

$$w' = \begin{cases} (-12q + 9q^2) / 4\pi h^4, & 0 \leq q \leq 1 \\ (-3(2 - q)^2) / 4\pi h^4, & 1 \leq q < 2 \\ 0, & q \geq 2 \end{cases} \quad (49)$$

Уравнения сохранения в дискретной форме примут вид

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= -2 \sum_j \frac{m_j \rho_i}{\rho_j} [u_i^r - 0.5(u_i^r + u_j^r)] w_{ij}', \\ \frac{du_i}{dt} &= -2 \sum_j \frac{0.5m_j (\sigma_i^{\alpha\beta} + \sigma_j^{\alpha\beta})}{\rho_j} \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} w_{ij}', \\ \frac{d(E_i + 0.5\vec{u}_i^2)}{dt} &= -2 \sum_j \frac{m_j (\sigma_i^{\alpha\beta} + \sigma_j^{\alpha\beta})}{\rho_j \rho_j} [u_i^r - 0.5(u_i^r + u_j^r)] w_{ij}'. \end{aligned} \quad (50)$$

Уравнения (50) составляют монотонную схему расчета без искусственной вязкости.

Алгоритм решения задачи для моделирования деформации, повреждения и разрушения гетерогенных сред на мезоскопическом уровне при воздействии интенсивных импульсных нагрузок включает последовательность вычислений для дискретных моментов времени состояния в частицах внутри объема фаз и на границах фаз и пор.

Начальные значения массовой плотности фаз, компонент массовой скорости, давления, компонент девиатора напряжений, температуры задаются в частицах в начальный момент времени.

Шаг по времени Δt для моделирования динамического нагружения гетерогенных сред на мезоскопическом уровне принимался равным

минимальному значению из значений, полученных по условию Куранта-Фридрихса-Леви для размеров частиц d_i , с учетом разных значений продольной скорости звука в конденсированных фазах композита [83,84].

На последующем временном шаге Δt^{n+1} из решения уравнений (50) вычислялись значения компонент массовой скорости u_k , массовой плотности ρ_k .

Алгоритм решения системы уравнений (7)-(31) заключается в следующем. Из соотношений Стокса (7) вычисляются компоненты тензора скорости деформации, скорости изгиба кручения $\dot{\epsilon}_{ij}^{n+1}, \dot{\omega}_{ij}$. По вычисленным значениям определяется скорость объемной деформации $\dot{\theta}^{n+1}$ и компоненты тензора девиатора скорости деформации $\dot{\epsilon}_{ij}^{n+1}$.

1. Вычисление компонент тензора напряжения и приращения параметра поврежденности выполняется с использованием схемы предиктор-корректор. На этапе предиктора выполняется определение напряжений в предположении об упругом деформировании фаз (без развития неупругих деформаций и разрушения).

2. Из решения уравнения (22) отыскиваются предварительные значения компонент девиатора тензора напряжения без учета поворота элементов среды:

$$[S_{ij}^{n+1}]^e = S_{ij}^n + \Delta t^{n+1} 2\mu[\dot{\epsilon}_{ij}^{n+1}].$$

3. Вычисляются углы поворота за текущий шаг по времени для соответствующих осей

$$\Delta\varphi^{n+1} = \Delta t^{n+1} \dot{\omega}^{n+1}.$$

4. Осуществляется корректировка предварительных значений компонент тензора девиатора напряжения за счет поворотов элемента среды. Для декартового базиса формулы коррекции, например, имеют вид:

$$[S_{xx}^{n+1}]^{e*} = [S_{xx}^{n+1}]^e - ([S_{xx}^{n+1}]^e - [S_{yy}^{n+1}]^e) \sin^2 \Delta\varphi^{n+1} - 2[S_{xy}^{n+1}]^e \sin(\Delta\varphi^{n+1}) \cos(\Delta\varphi^{n+1}),$$

$$[S_{yy}^{n+1}]^{e*} = [S_{yy}^{n+1}]^e - ([S_{xx}^{n+1}]^e - [S_{yy}^{n+1}]^e) \sin^2 \Delta\varphi^{n+1} + 2[S_{xy}^{n+1}]^e \sin(\Delta\varphi^{n+1}) \cos(\Delta\varphi^{n+1}),$$

$$[S_{xy}^{n+1}]^{e*} = [S_{xy}^{n+1}]^e - ([S_{xx}^{n+1}]^e - [S_{yy}^{n+1}]^e) \sin(\Delta\varphi^{n+1}) \cos(\Delta\varphi^{n+1}) - 2[S_{xy}^{n+1}]^e \sin^2 \Delta\varphi^{n+1}.$$

5. Вычисляется предварительное значение эквивалентного сдвигового напряжения (интенсивности тензора девиатора)

$$[\sigma_{eq}^{n+1}]^e = [1.5[S_{ij}^{n+1}]^e [S_{ij}^{n+1}]^e]^{n+1}.$$

6. Вычисляется предварительное значение параметра T^*

$$T^* = [\sigma_{eq}^{n+1}]^e / \sigma_{HEL}.$$

7. Вычисляются предварительные значения интенсивности скорости деформаций и нормализованной величина интенсивности скорости деформаций

$$[\dot{\epsilon}_{eq}^{n+1}] = [(2/3)[\dot{\epsilon}_{ij}^{n+1}][\dot{\epsilon}_{ij}^{n+1}]]^{n+1}, \quad \dot{\epsilon}^* = [\epsilon_{eq}^{n+1}] / \dot{\epsilon}_0.$$

8. Вычисляются компоненты скорости неупругих деформаций, развивающиеся на шаге по времени Δt^{n+1} в результате развития разрушения на микроскопическом уровне (зарождения и роста нано- и микротрещин) без коррекции значения модуля сдвига μ :

$$[\dot{\epsilon}_{ij}^p]^{n+1} = (1/2\mu)([\dot{S}_{ij}^{n+1}]^e - [\dot{S}_{ij}^n]).$$

9. Вычисляется интенсивность скорости неупругой деформации:

$$[\dot{\epsilon}_{eq}^p]^{n+1} = (2/3)[\dot{\epsilon}_{ij}^p]^{n+1}[\dot{\epsilon}_{ij}^p]^{n+1}.$$

10. Вычисляются величины параметров уравнения повреждаемости

$$[P^*]^n = p^n / P_{HEL}, \quad [\epsilon_f]^{n+1} = D_1([P^*]^n + T^*)^{D_2}.$$

Уравнение для $[\epsilon_f]^{n+1}$ может иметь иные модификации в рамках модели.

11. Вычисляется величина параметра повреждения D :

$$D^{n+1} = D^n + \Delta t^{n+1} \frac{[\dot{\epsilon}_{eq}^p]^{n+1}}{[\epsilon_f]^{n+1}}.$$

12. Вычисляются значения $[\sigma_s^c]^{n+1}$ с помощью соотношений (29)

13. Вычисляется $[\sigma_f]^{n+1}$ с помощью соотношений (30).

14. Проверяется критерий разрушения $0 \leq D < 1$.

При $D=1$ частица считается полностью разрушенной.

При $D > 0$ частица соответствует поврежденной фазе и выполнение алгоритма продолжается с п.15

При $D=0$ частица соответствует конденсированной фазе и выполнение алгоритма продолжается с п.18.

15. Рассчитывается коррекция интенсивности напряжений с учетом изменения параметра поврежденности среды.

Если $D^{n+1} > D^n$ то проводится коррекция значения интенсивности девиатора тензора напряжения. В противном случае коррекция не производится и расчет продолжается с использованием вычисленных значений параметров. Для хрупких и полухрупких сред не допускается возможность залечивания повреждений, в результате чего параметр поврежденности, вычисленный в п.11 может уменьшаться.

$$[\sigma_{eq}^*]^{n+1} = [\sigma_{eq}^*]^{n+1} - D^{n+1}([\sigma_{eq}^*]^{n+1} - [\sigma_f^*]^{n+1}).$$

16. Корректируются значения компонент тензора девиатора напряжения:

$$[S_{ij}]^{n+1} = [S_{ij}^{n+1}]^e ([\sigma_{eq}^*]^{n+1} / [T^*]^{n+1}).$$

17. Корректируются значения приращений компонент тензора девиатора напряжения:

$$[\dot{S}_{ij}]^{n+1} = (S_{ij}^{n+1} - S_{ij}^n) / \Delta t^{n+1}.$$

18. Определяются значения интенсивности напряжений на текущем шаге:

если $D = 0$ то $\sigma_{eq}^{n+1} = [\sigma_{eq}^{n+1}]^e$,

если $0 < D < 1$ то $\sigma_{eq}^{n+1} = T * \sigma_{HEL}$.

19. Вычисляется изменение величины удельной внутренней энергии в результате развития повреждений и разрушения частицы среды

$$\Delta E^f = [E^f]^n - [E^f]^{n+1} = \{[\sigma_{eq}^{n+1} - D^n (\sigma_{eq}^{n+1} - \sigma_f^{n+1})]^2 / 6\mu\} - \\ - \{[\sigma_{eq}^{n+1} - D^{n+1} (\sigma_{eq}^{n+1} - \sigma_f^{n+1})]^2 / 6\mu\}$$

20. Вычисляется объемная упругая деформация в частице материала

$$\theta = \rho^{n+1} / \rho_0 - 1$$

21. Вычисляется величина давления в поврежденном материале с использованием уравнения Берча-Мурнагана либо полиномиального уравнения состояния.

Переход на следующий временной слой осуществляется путем вычисления нового шага по времени и продолжение расчета с п.1.

Использование разработанной многоуровневой модели для моделирования процессов деформации и разрушения керамических композитов при интенсивных импульсных воздействиях связано с необходимостью задания численных значений коэффициентов для каждой конденсированной фазы (кристаллической матрицы, включений).

Коэффициенты могут быть условно разделены на несколько групп. К первой группе относятся:

- теоретическая массовая плотность фаз ρ_0 ;
- температура плавления T_m ;
- модуль сдвига μ_0^c в нормальных условиях;
- модуль объемного сжатия в нормальных условиях $B_0 \approx K_1$;
- коэффициенты уравнений состояния B_1 , либо K_2 , K_3 ;
- γ - коэффициент Грюнайзена;
- коэффициенты A_s, B_s , входящие в соотношение, определяющее изменение модуля сдвига от давления и температуры.

Указанные коэффициенты для кристаллических фаз являются стандартными справочными характеристиками кристаллических веществ. В работе использовались численные значения модулей упругости, массовой плотности, коэффициентов Грюнайзена для кристаллических фаз Al_2O_3 , $t-ZrO_2$, B_4C , ZrB_2 , приведенные в [95-104]. Для оценки коэффициентов B_1 или K_2 , K_3 были использованы экспериментальные данные об ударных адиабатах для керамических материалов на основе Al_2O_3 , $t-ZrO_2$, B_4C , ZrB_2 , полученные в [97-105].

Вторая группа коэффициентов входит в уравнения кинетики повреждаемости кристаллических фаз. К ним относятся коэффициенты D_1 , D_2 , P_{HEL} , σ_{HEL} из соотношения (26), A_1 , B_2 , C_1, C_2 , m_1 , m_2 - константы для материалов в соотношениях (29), (30), m_3 , m_4 - константы для материалов в соотношении (31). Феноменологические коэффициенты m_3 , m_4 близки к 1 и могут изменяться в

узком диапазоне при повышении температуры из-за фазовых и структурных превращений на субмикронном уровне.

Значения σ_{HEL} для Al_2O_3 , t-ZrO_2 , B_4C , ZrB_2 являются справочными. В работе использованы значения пределов упругости Гюгонио для однофазных материалов на основе Al_2O_3 , t-ZrO_2 , B_4C , ZrB_2 , приведенные в [97-103].

Определение P_{HEL} проводилось в предположении [99]

$$\sigma_{\text{HEL}} = P_{\text{HEL}} + (2/3)\sigma_{\text{sd}}, \quad (51)$$

где σ_{sd} – динамическая сдвиговая прочность материала.

$$\sigma_{\text{sd}} = \sigma_{\text{HEL}} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \right) \text{ либо } \sigma_{\text{sd}} = \sigma_{\text{HEL}} / \left(\frac{B_0}{2\mu} + \frac{2}{3} \right), \quad (52)$$

где ν , B_0 и μ – коэффициент Пуассона, модуль объемного сжатия и модуль сдвига, соответственно.

Значение параметра P_{HEL} может быть определено по величине предела упругости Гюгонио σ_{HEL} с помощью соотношения

$$P_{\text{HEL}} = \sigma_{\text{HEL}} \left(\frac{3B_0}{3B_0 + 4\mu} \right). \quad (53)$$

Методика определения коэффициентов A_1 , B_2 , C_1, C_2 , m_1 , m_2 была предложена в [80-82].

Для ряда фаз значения коэффициентов были ранее определены на основе численного моделирования экспериментов по высокоскоростному удару, ударноволновому нагружению образцов керамических материалов.

Использованные при моделировании композитов и нанокомпозитов ZrB_2 – B_4C , ZrB_2 – t-ZrO_2 , ZrB_2 – Al_2O_3 значения параметров приведены в таблицах 4 и 5.

Численные значения модулей упругости, массовой скорости и коэффициентов уравнений для кристаллических фаз Al_2O_3 , t-ZrO_2 , B_4C , ZrB_2 зависят от концентрации химических примесей, наличия наноразмерных включений, дефектов на субмикронном уровне [97-105].

Таблица 4 – Модули упругости и коэффициенты уравнений состояния для низкотемпературных кристаллических фаз Al_2O_3 , t-ZrO_2 , B_4C , ZrB_2

Фаза	B_4C	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	t-ZrO_2	ZrB_2
Плотность ρ_0 , кг/м ³	2520	3890	6050	6290
T_m , К	2633	2327	2950	3519
Модуль объёмного сжатия $K_1 (B_0)$, ГПа	263.0	130.95	235	219.0
K_2 , ГПа	480.0	0	0	0
K_3 , ГПа	659.0	0	0	0
B_1	4.67	4.19	5.2	3.5
Модуль сдвига μ , ГПа	197.0	90.16	76	212.0
Коэффициент Грюнайзена γ	1	1	1	1.06

Таблица 5 – Коэффициенты модели повреждаемой среды для низкотемпературных кристаллических фаз Al_2O_3 , t-ZrO_2 , B_4C , ZrB_2

Фаза	B_4C	Al_2O_3	t-ZrO_2	ZrB_2
Напряжение σ_{HEL} , ГПа	19.0	9.95	8.9	7.11
Давление P_{HEL} , ГПа	8.71	14.6	5.66	3.07
σ_s , ГПа	5.1	1.37	4.86	6.07
A_1 , ГПа	0.927	0.93	0.9	0.78
B_2 , ГПа	0.7	0.31	0.8	0.3
C_1	0.005	0.001	0.	0.002
C_2	0.001	0.002	0.	0.001
m_1	0.85	0.6	0.5	0.5
m_2	0.67	0.6	0.6	0.6
D_1	0.001	0.005	0.01	0.1
D_2	0.5	1	0.7	1

При проведении вычислительных экспериментов численные значения коэффициентов могут варьироваться в определенных пределах.

Как правило, диапазон варьирования параметров, приведенных в таблицах 4 и 5 не превышает 20 % [97-105].

2.3 Результаты решения тестовых задач. Сходимость численных решений динамических задач

При проведении вычислительных экспериментов выбирались максимально возможные размеры частиц, обеспечивающие степени сходимости результатов менее 5 %.

При выполнении численного решения задач обеспечивался контроль за устойчивостью численного решения, выполнением условия сохранения общей энергии системы более 95 % .

Адекватность расчета давления, пределов упругости Гюгонио, скоростей распространения упругого предвестника для материалов матрицы и включений была подтверждена хорошим согласием полученных при решении тестовых задач о распространении плоских ударных волн расчетах значений параметров с экспериментальными данными.

Полученные результаты согласуются с имеющимися в литературе данными физических экспериментов и не противоречат положениям существующих теорий механики сред с повреждениями и механики разрушения.

В частности, расчетные профили усредненной массовой скорости в ударной волне, качественно совпадают с экспериментальными данными [66-68].

Получено хорошее качественное совпадение полученной при компьютерном моделировании и экспериментальной зависимости среднего приложенного напряжения τ от интенсивности деформации сдвига в образце диоксид-циркониевой керамики. Количественное отклонение прогнозируемых моментов разрушения образца диоксид-циркониевой керамики с экспериментальными данными составляет менее 10 % и находится внутри интервала достоверности экспериментальных данных.

Полученные при моделировании результаты и сделанные на основе их анализа выводы не противоречат известным данным.

Достигнутая степень сходимости результатов компьютерного моделирования с имеющимися экспериментальными данными по механическим свойствам нанокompозитов составляет 4-5 %.

Для проверки адекватности использованной модификации метода SPH были решены тестовые задачи от распада разрыва при ударном нагружении пластин, задачи о ударе стержня о недеформируемую преграду и задача о моделировании экспериментов о соударении пластин.

Решалась задача о распаде разрыва при соударении пластин из одинакового материала. Область заполнялась частицами, имевшими одинаковые размеры d . Проведены расчеты с использованием частиц, размеры которых различались в 4 раза.

Поле расчетных значений давлений при соударении алюминиевых пластин со скоростью 500 м/с показано на рисунке 28.

Расчетные значения давлений, полученные в расчетах с использованием частиц с размерами 0.004 см и 0.001 см, сплошная линия – аналитическое решение.

Расчетные значения в слоях 3D модели показаны на рисунке 29.

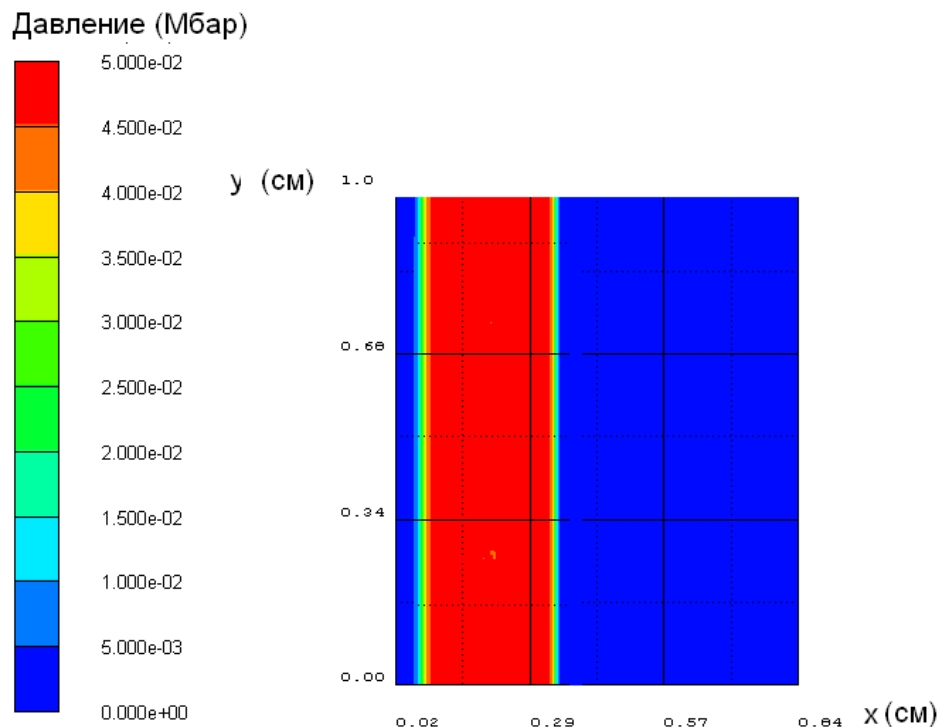


Рисунок 28- Расчетные давления в сечении алюминиевых пластин

Полученное численное решение согласуется с аналитическими оценками распада разрыва. Расчет фронта ударной волны возможен с применением использованного алгоритма SPH без применения искусственной вязкости.

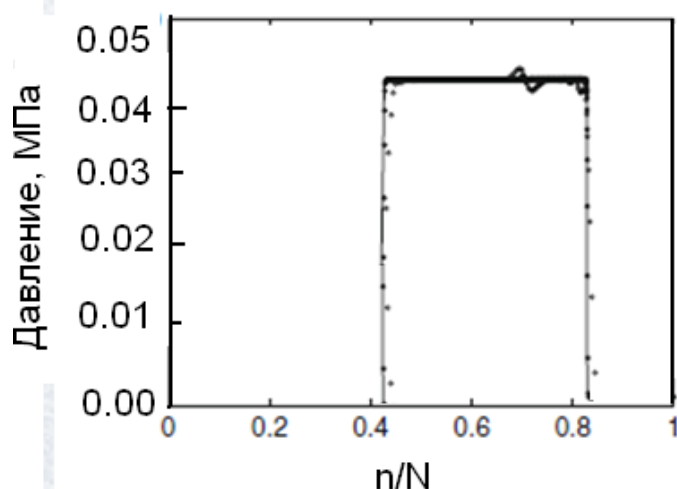


Рисунок 29 - Расчетные давления в сечении алюминиевых пластин

Полученные результаты свидетельствуют о относительно быстрой сходимости численных решений с уменьшением размеров частиц.

Были проведены тестовые расчеты распада разрыва при взаимодействии волны сжатия с контактной поверхностью двух сред с разными значениями механического импеданса. Моделировалось взаимодействие волны напряжения контактной поверхностью стальной и алюминиевой пластин. На рисунке 30 показана 3D расчетная область, заполненная гладкими частицами.

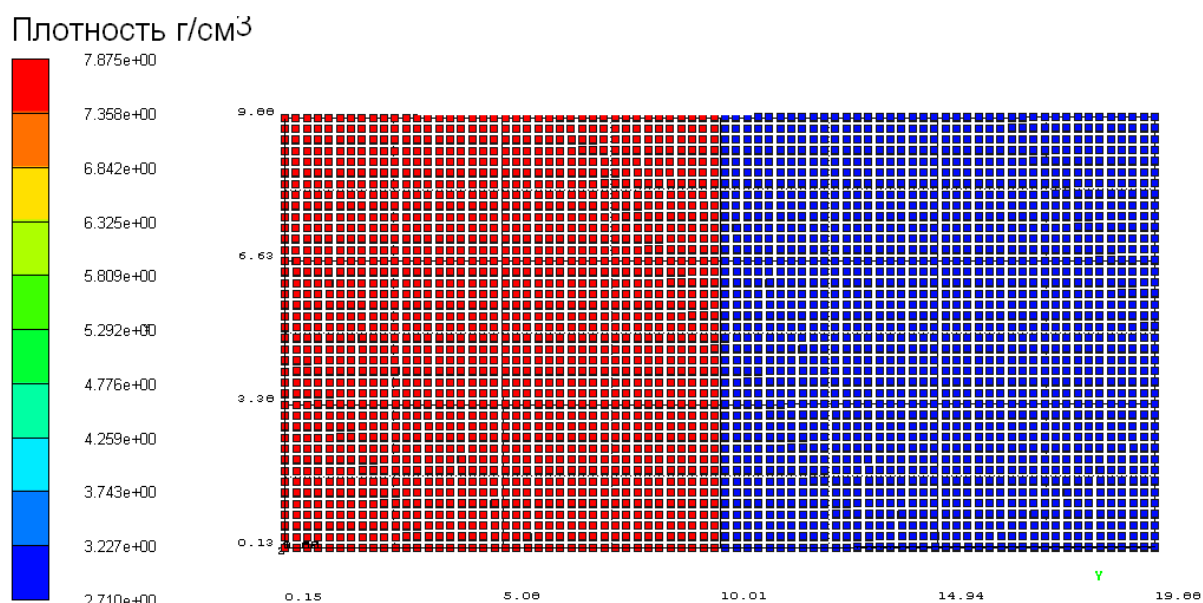


Рисунок 30 - Пространственная область включающая границу контакта стальной и алюминиевой пластины

Поле расчетных значений давлений показано на рисунке 31.

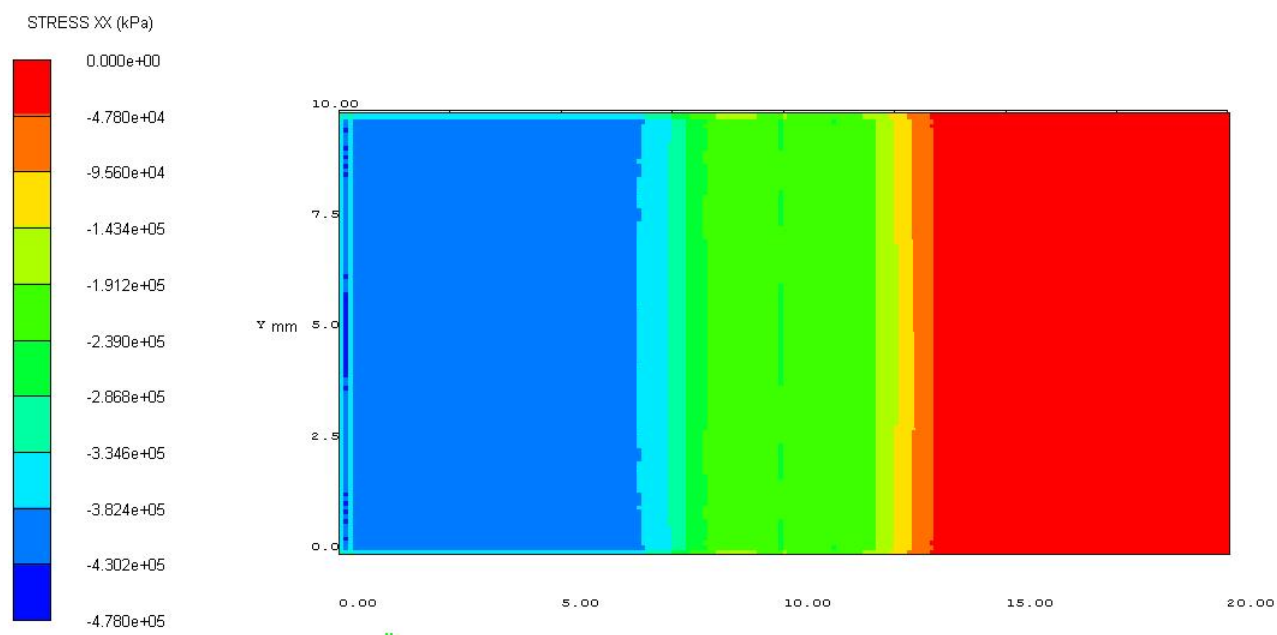


Рисунок 31 - Расчетные давления в сечении расчетной области

На рисунке 32 показаны расчетные значения скорости частиц в слоях перпендикулярных направлению распространения волны.

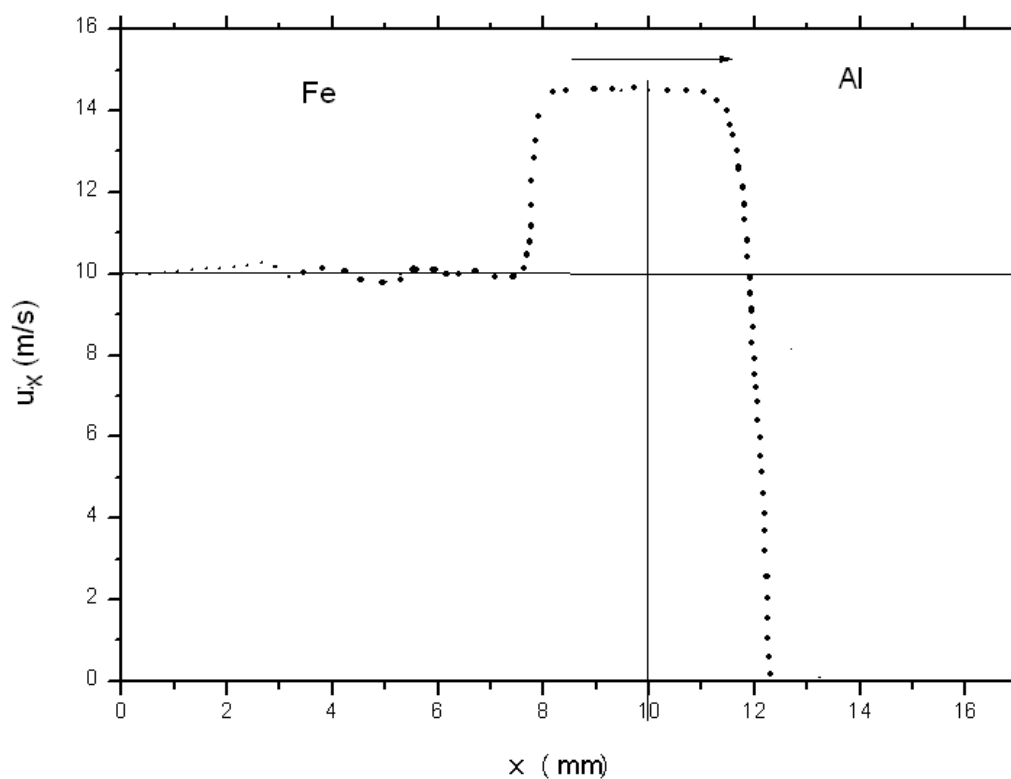


Рисунок 32 - Расчетные значения скорости u_x материальных частиц

Для тестирования метода на адекватность описания процессов разрушения решались задачи об ударе цилиндров из поликарбоната высотой 12 мм и диаметром 16 мм об пластину толщиной 40 мм со скорости соударения 4700 м/с. Масса ударника принималась равной 0.0026 кг.

Для описания упругопластического поведения использовалась модель с критерием Мизеса. Для вычисления давления использовано уравнение состояния на ударной адиабате, задаваемой соотношением $D_s = C_0 + \lambda u_1$. Здесь D_s – скорость ударной волны, C_0 – объемная скорость звука, λ – феноменологический параметр материала, u_1 – амплитуда скорости материальных частиц в ударной волне. Характеристики материалов ударника и мишени приведены в таблице 6.

Таблица 6 – Свойства материалов ударника и мишени

Параметры	Al	Поликарбонат
ρ , кг/м ³	2700	1200
C_L , м/с	6300	1740
K_1 , ГПа	73	5.83
μ , ГПа	23	0.8
Коэффициент Пуассона	0.3	0.35
σ_{sd} , МПа	400	60
σ_B , МПа	600	1200
C_0 , м/с	5350	1.35
λ	1740	1.72

На рисунке 33.а показана деформация преград и образовавшиеся трещины, полученные в данной работе при тестировании алгоритма SPH.

На рисунке 33.б показаны результаты расчетов, выполненные Паршиковым А.Н. при аналогичных значениях параметров материалов и условий соударения.

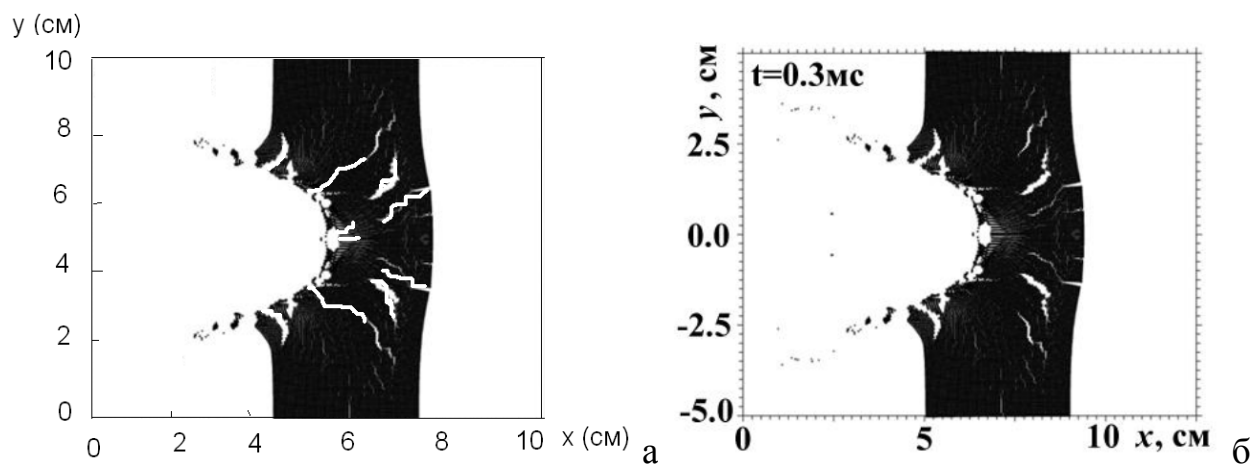


Рисунок 33 – Распределение повреждений в алюминиевой преграде

Хорошее качественное согласие результатов расчетов подтверждает возможность описания фрагментации сред при использовании модифицированного варианта SPH метода [87].

3 Моделирование динамического разрушения керамических композиционных материалов на основе многоуровневого подхода

3.1 Моделирование динамического разрушения наноструктурных композитов с учетом влияния параметров структуры мезоскопического уровня

Важнейшей характеристикой динамических прочностных свойств конструкционных материалов, включая керамические композиты и нанокомпозиты, является динамическая сдвиговая прочность σ_{sd} [99-101]. Динамическую сдвиговую прочность σ_{sd} принято определять по величине предела упругости Гюгонио σ_{HEL} по формуле (52) [99].

Величина предела упругости Гюгонио σ_{HEL} может быть определена с использованием данных физических экспериментов или результатам компьютерного моделирования распространения ударных волн в исследуемых материалах по формуле (54)

$$\sigma_{HEL} = \rho_0 < C_L > < u_{HEL} >, \quad (54)$$

где ρ_0 - массовая плотность материала,

$< C_L >$ - продольная скорость звука в материале (скорость распространения упругого предвестника),

$< u_{HEL} >$ - амплитуда скорости материальных частиц в упругом предвестнике.

Для исследования влияния концентрации включений на макроскопическую величину динамической сдвиговой прочности и значение макроскопического предела упругости Гюгонио проведено численное моделирование деформации и разрушения модельных представительных объемов композитов при воздействии ударных импульсов с микросекундной длительностью. Длительность импульса многократно превышала время прохождения фронта ударной волны по модельному представительному объему. Задание граничных условий (5)

обеспечивало имитацию в расчете прохождения фронта волны через границу представительного объема. Возникновение отраженных от границы объема импульсов разгрузки в расчетах не отмечено.

Скорости материальных частиц u_x определялись в момент времени t на тыльной поверхности модельного объема, при прохождении через него плоской ударной волны.

Модельные представительные объемы нанокompозитов Al_2O_3 - ZrO_2 с объемным содержанием частиц ZrO_2 до 20 % содержали изолированные частицы. При относительном объеме упрочняющей фазы более 25 % модельные структуры нанокompозитов содержали перколяционные кластеры упрочняющих частиц с размером 250 нм. На рисунке 34 показано сечение модельного представительного объема с объемной концентрацией частиц ZrO_2 ~40 %. Точками 1-7 показаны точки, в которых регистрируется история изменений параметров состояния.

На рисунке 35 показано распределение напряжений σ_{xx} за фронтом ударной волны с амплитудой 14.7 ГПа в объеме.

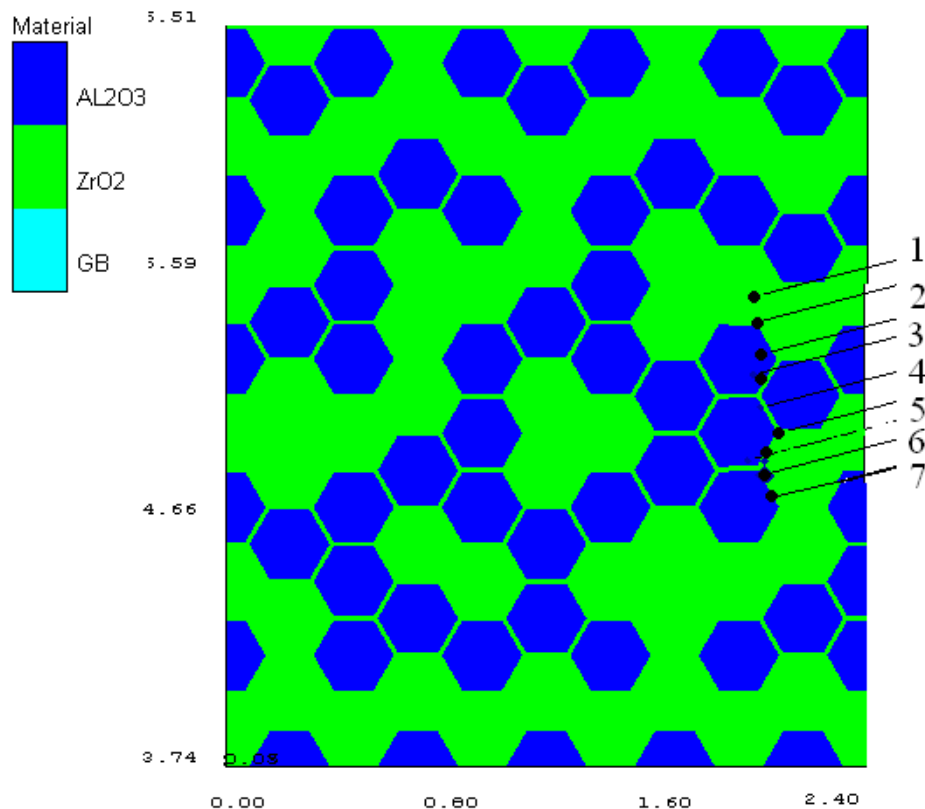


Рисунок 34 – Модельная структура нанокompозита Al_2O_3 - ZrO_2 с перколяционным кластером упрочняющих частиц.

Напряженное состояние на мезоскопическом уровне нанокомпозитов Al_2O_3 - ZrO_2 неоднородно. Указанная неоднородность обусловлена не различием механических свойств фаз, а релаксацией локальных сдвиговых напряжений при зарождении трещин.

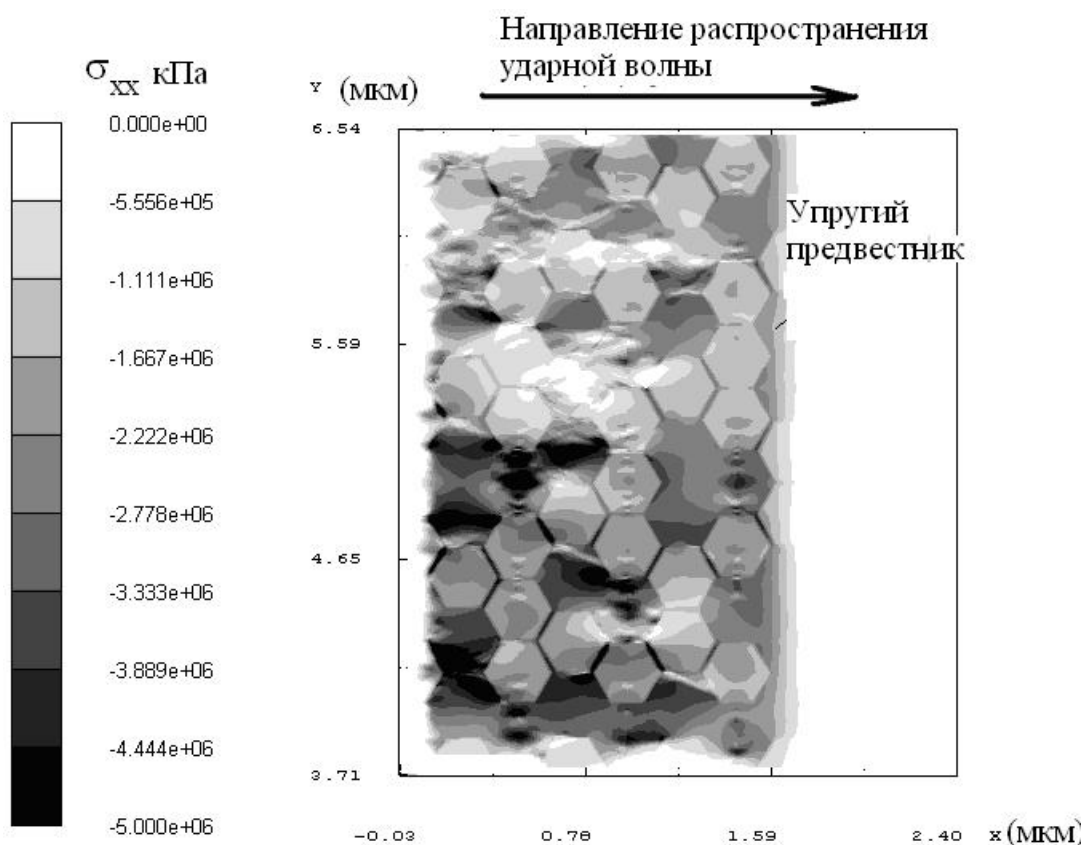


Рисунок 35— Поле напряжений σ_{xx} в сечении представительного объема композита Al_2O_3 - ZrO_2 композита

Распределение параметра поврежденности D в объеме нанокомпозита а фронтом ударной волны показано на рисунке 36. При заданных для кристаллических фаз Al_2O_3 и $t\text{-ZrO}_2$ параметрах модели повреждения зарождаются на границах зерен матрицы и включений. Трещины развиваются из зон тройных стыков зерен через зерна матрицы и зернограницные области.

Полученные результаты подтверждают возможность реализации интеркристаллитного и транскристаллитного разрушения Al_2O_3 - ZrO_2 композита.

На рисунке 37 показаны хронограммы изменения скорости материальных частиц u_x , свидетельствующие о распределении значений на мезоскопическом уровне во фронте волны напряжений в нанокompозите $Al_2O_3 - t-ZrO_2$. Одномодальное распределение u_x для разных моментов времени реализуется в частичных объемах с некоторым характерным размером a .

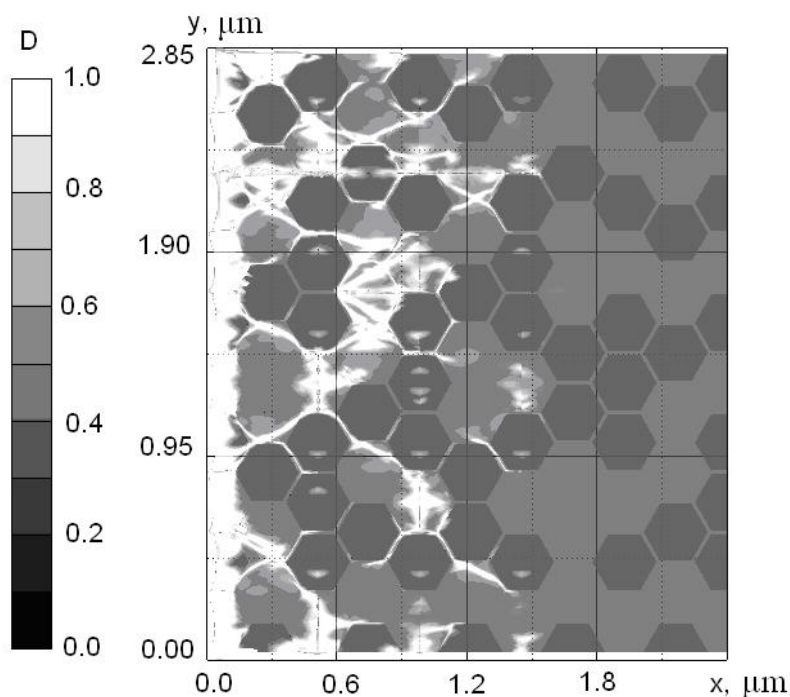


Рисунок 36 – Повреждения в представительном объеме за фронтом ударной волны с амплитудой 5 ГПа

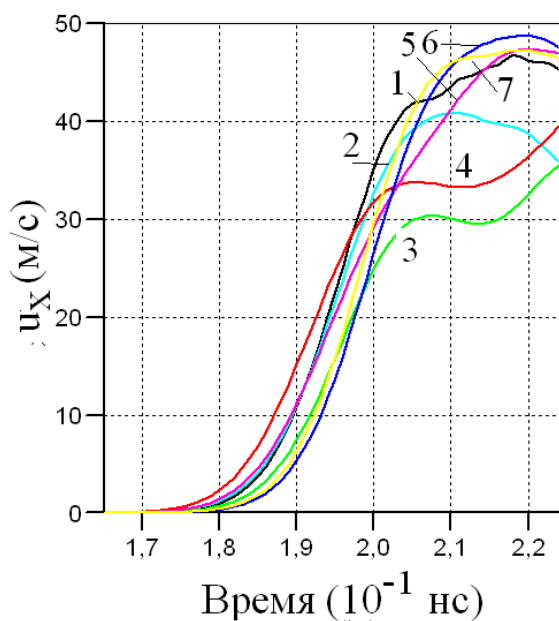


Рисунок 37 – Хронограмма изменения скорости материальных частиц u_x в точках модели 1-7

Частичный объем с минимальным размером, для которого реализуется одномодальное распределение u_x для рассматриваемых условий динамического нагружения, может быть принят в качестве представительного объема.

Усредненные значения $\langle u_x \rangle$ в фронте волны напряжения показаны на рисунке 38 в.

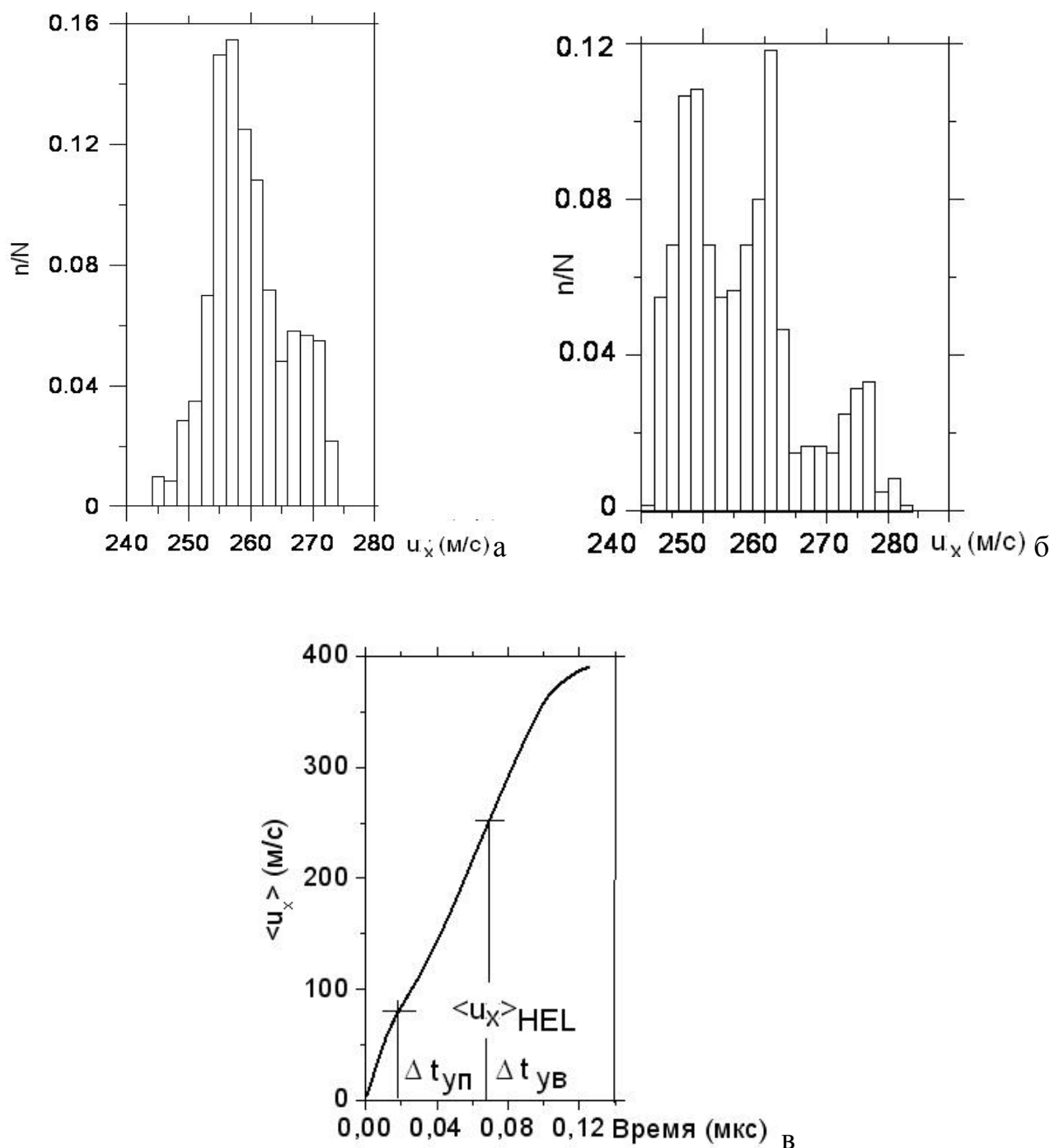


Рисунок 38 – Гистограммы распределения значений скорости материальных частиц во фронте плоской ударной волны в $Al_2O_3-ZrO_2$

В таблице 7 приведены механические характеристики керамических фаз.

Таблица 7 – Свойства некоторых керамических фаз

№	Фаза	Мас- совая плот- ность , 10^3 кг/м^3	Мо- дуль Юн- га, ГПа	Козф- фи- циент Пуас- сона	Козф- фициент линей- ного теплого расши- рения, $\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ при температу- рах (от 293 до 1300 К)	Про- дольная ско- рость звука, км/с	Мо- дуль сдви- га, ГПа	Пре- дел упру- гости Гюго- нио
1	Al_2O_3	3.97	395. 8	0.254	8.8	10.92	156.5	9-14
2	t- ZrO_2 (3 mol. % Y_2O_3)	6.05	219. 0	0.312	12.2	7.07	83.0	8.9- 17.0
3	m- ZrO_2	5,6	236	0.303	8.0-10.6	7.5	86.4	
4	ZrB_2	6.09	450	0.128	5.9-6.5	8.8	212	7.11
5	SiC	3.22	454	0.163	4.7	11.89	195	13.2- 14.7
6	B_4C	2.52	432- 463	0.151- 0.18	4.5	13.42	188	16.0- 17.1
7	WC	15.5	668- 714	0.24	3.85-3.9	7.05	270	7.0
8	TiB_2	4.52	575	0.141	4.6-5.2	11.4	255	8.65
9	Si_3N_4	3.29	310	0.276	2.64-3.3	10.96	115.3	13.9
10	TiC	4.94	460- 497	0.189- 0.25	7.95-8.58	10.1	194	5.87

Эффективные скорости упругого предвестника $\langle C_L \rangle$ и объемной волны сжатия $\langle C_b \rangle$ определяются по хронограмме изменения усредненных значений скорости материальных частиц (См. Рисунок 38 в)

$$\langle C_L \rangle = a / \Delta t_{\text{уп}}, \quad \langle C_b \rangle = a / \Delta t_{\text{ув}}.$$

Вычисленные значения $\langle C_L \rangle$, $\langle u_x \rangle$, $\langle \rho \rangle$ используются для получения оценок предела упругости Гюгонио.

Вычисленные значения $\langle C_L \rangle$, $\langle C_b \rangle$, $\langle \rho \rangle$ позволяют определить эффективные значения модулей упругости по формулам (40)-(42).

Эффективные значения величин предела упругости Гюгонио и динамической сдвиговой прочности определяются по формулам (54) и (52) соответственно.

Для улучшения комплекса механических свойств керамических композитов и нанокомпозитов на основе Al_2O_3 , ZrO_2 , ZrB_2 в матрицу вводятся упрочняющие частицы различных керамических соединений. Повышение прочности и трещиностойкости керамических композитов обусловлено рядом физических механизмов, связанных с зарождением и ростом трещин около включений [66]. В композитах и нанокомпозитах на основе Al_2O_3 , $t\text{-ZrO}_2$, ZrB_2 реализуется большинство механизмов, обеспечивающих повышение прочности и трещиностойкости керамических материалов. В условиях высокоэнергетических воздействий кроме механизмов упрочнения, которые рассмотрены при построении модели в разделе 1.3, на величину предела упругости Гюгонио и величину прочности при растяжении могут оказывать влияние остаточные напряжения. Остаточные напряжения в керамических композитах возникают при изготовлении материалов методами высокотемпературного спекания и горячего прессования. При охлаждении материала от температуры прессования или спекания ($\sim 1280\text{-}1790\text{ K}$) до комнатной из-за различия коэффициентов линейного теплового расширения в керамике возникают внутренние остаточные

напряжения. Шаровая часть эффективных остаточных напряжений p_{res} (усредненных по объему) может быть оценена по формуле [116]

$$p_{res} = \frac{2(\alpha_{inc} - \alpha_m)\Delta T E_m E_{inc}}{E_{inc}(1 + \nu_m) + 2E_m(1 - 2\nu_{inc})},$$

где ΔT - разность температуры спекания и комнатной температуры

α_{inc} , α_m , E_{inc} , E_m , ν_{inc} , ν_m - коэффициенты линейного теплового расширения, модули Юнга, коэффициенты Пуассона фаз включений (inc) и матрицы (m), соответственно.

Таблица 8 - Разность коэффициентов линейного расширения матрицы и включений в керамических композитах

Матрица	Включение	Разность коэффициентов линейного расширения матрицы и включений ($\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$)
Al_2O_3	t-ZrO ₂	-3.4
Al_2O_3	m-ZrO ₂	-1.8
Al_2O_3	ZrB ₂	2.3
Al_2O_3	WC	4.9
Al_2O_3	B ₄ C	4.3
Al_2O_3	Si ₃ N ₄	5.5
Al_2O_3	TiB ₂	3.6
Al_2O_3	TiC	0.22
t-ZrO ₂	Al_2O_3	3.4
t-ZrO ₂	WC	8.3
t-ZrO ₂	B ₄ C	7.7
t-ZrO ₂	SiC	7.5
t-ZrO ₂	TiB ₂	7.0
ZrB ₂	B ₄ C	2.0
ZrB ₂	SiC	1.8
ZrB ₂	TiC	-2.08
ZrB ₂	WC	2.0
ZrB ₂	TiB ₂	1.3
ZrB ₂	t-ZrO ₂	-5.7

В таблице 8 приведены данные о разности коэффициентов линейного расширения керамической матрицы и включений.

На рисунках 38-40 показаны расчетные значения остаточных давлений в керамических композитах с Al_2O_3 , t-ZrO_2 , ZrB_2 матрицами при упрочнении частицами TiC , TiB_2 , Si_3N_4 , B_4C , WC , SiC от разности коэффициентов линейного теплового расширения матрицы и включений при разности температур 1500 К (треугольные символы) и 1000 К (квадратные символы).

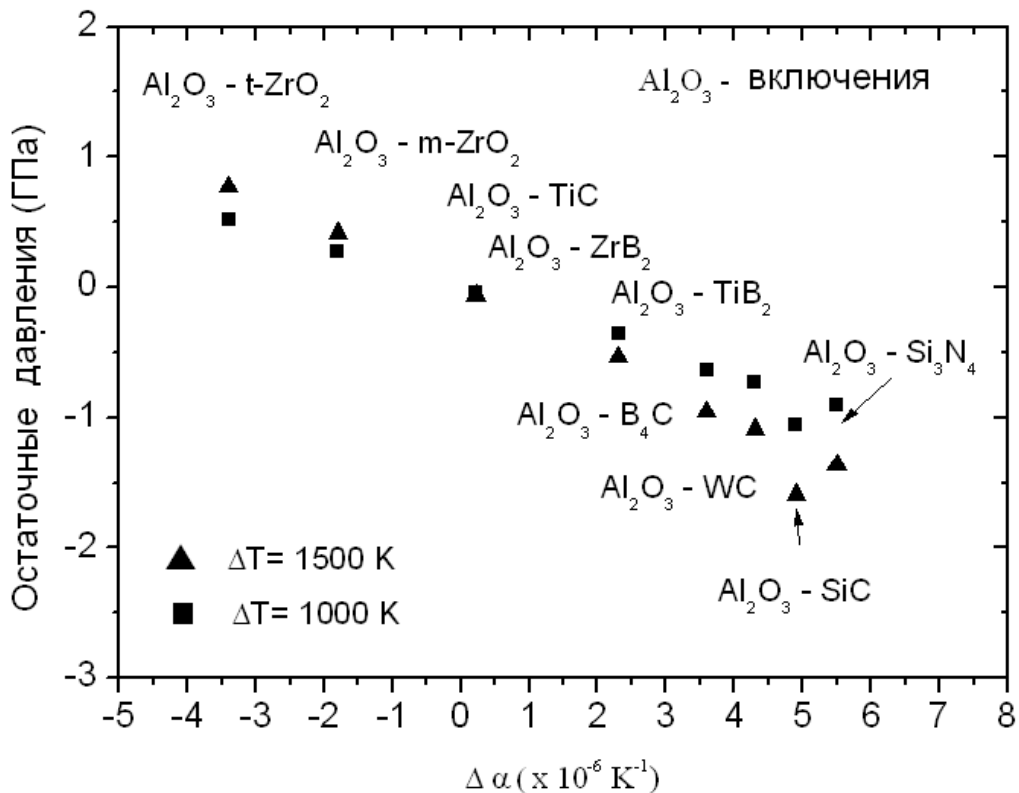


Рисунок 38 –Остаточные напряжения в композиционных материалах на основе Al_2O_3

Приведенные данные свидетельствуют о том, что значения остаточных давлений для рассмотренных фаз включений варьируются от -1.5 до +1.5 ГПа. Учет остаточных давлений при моделировании процессов деформации и разрушения керамических композитов осуществляется путем коррекции постоянных p_{HEL} для матрицы и включений на величину остаточных давлений (См. таблицу 5) и заданием начальных условий (напряжений, деформаций и удельной внутренней энергии) (6). Влияние остаточных

напряжений на величины динамической сдвиговой прочности и предела упругости Гюгонио для исследованных композитов является нелинейным.

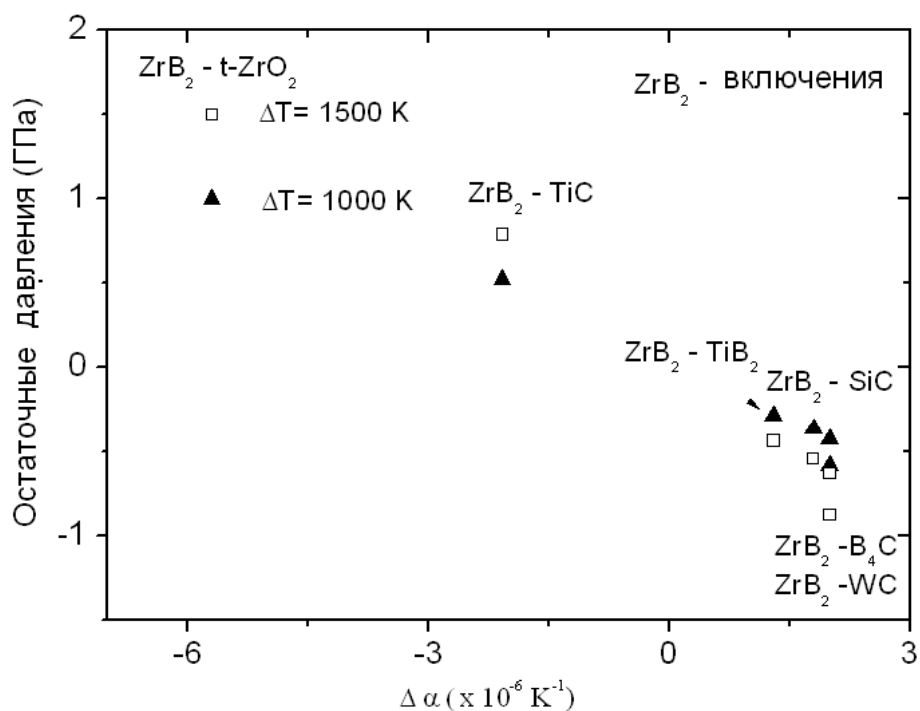


Рисунок 39 – Остаточные напряжения в композиционных материалах на основе ZrB₂

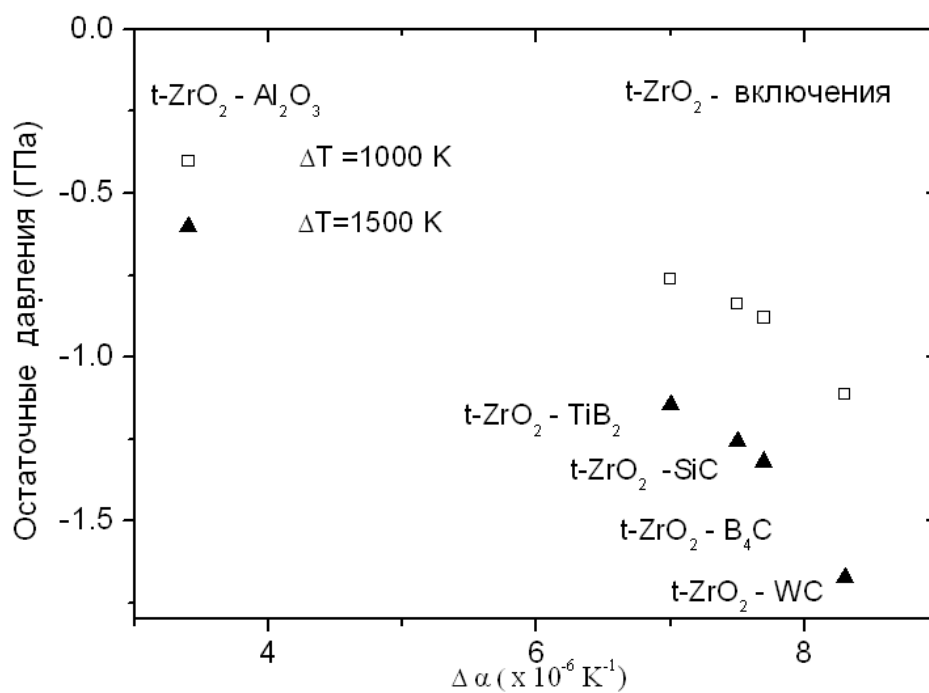


Рисунок 40 – Остаточные напряжения в композиционных материалах на основе t-ZrO₂

3.2 Исследование влияния структуры керамических композитов и нанокомпозитов на сдвиговую прочность при интенсивных импульсных воздействиях

Механическое поведение керамических композитов и нанокомпозитов за пределами упругости определяется развитием повреждений их структуры на разных масштабных уровнях в процессе деформации. Разрушение таких материалов при интенсивных динамических воздействиях является результатом протекания стадийных процессов зарождения повреждений на микроскопическом уровне и формирования локализованных зон повреждений на мезоскопическом уровне [112]. Поскольку на стадии развития повреждений на макро-, микро- и мезоскопических уровнях эти материалы сохраняют сопротивление сдвигу, а на макроскопическом уровне деформируются неупруго, характер механического поведения материалов следует рассматривать как квазихрупкий.

Разработка кинетических моделей повреждаемости и разрушения квазихрупких материалов в динамических условиях нагружения затрудняется нарушением самоподобия закономерностей физических процессов повреждаемости на микро-, мезо- и макроскопических уровнях.

При амплитудах ударных волн (УВ), не превышающих величину макроскопического предела упругости Гюгонио, за фронтом волны нагружения возможен рост поврежденности в фазах матрицы и включений керамических композитов.

Расчетные значения удельной энтропии композитов $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{t-ZrO}_2$ с 5, 10 и 15 % объемным содержанием частиц t-ZrO_2 возрастают с увеличением времени. Это свидетельствует об отсутствии самоорганизации в системе повреждений в волне нагружения.

Рост усредненного параметра поврежденности $\bar{D}$ происходит в зоне взаимодействия волн разгрузки в RVE, где возникают растягивающие напряжения.

Расчетные значения удельной энтропии в RVE возрастают с ростом $\bar{D}$ до значений 0,2 - 0,3 в зависимости от концентрации частиц $t\text{-ZrO}_2$. При дальнейшем увеличении $\bar{D}$ приращение удельной энтропии уменьшается и может принимать отрицательные значения. При этом происходит формирование кластеров разрушенных материальных микрочастиц, что может интерпретироваться как образование мезоскопических трещин. Изменение знака приращения энтропии свидетельствует о возможности самоорганизации в системе локальных повреждений.

При амплитудах ударных волн (УВ), превышающих значения усредненного предела упругости Гюгонио, происходит рост параметра поврежденности во фронте волны объемного сжатия. Рост $\bar{D}$ обусловлен увеличением объемной концентрации локальных повреждений. Во фронте волны объемного сжатия расчетные значения приращений удельной энтропии положительны. Это не позволяет интерпретировать процесс роста поврежденности композиционных материалов $\text{Al}_2\text{O}_3 - t\text{-ZrO}_2$ во фронте УВ с амплитудами до ~ 15 ГПа, как процесс самоорганизации.

Результаты моделирования, показанные на рисунке 40 и 41, свидетельствуют о том, что под действием интенсивных динамических воздействий в композиционных материалах $\text{Al}_2\text{O}_3 - t\text{-ZrO}_2$ может происходить разрушение в результате самоорганизации локальных микроповреждений.

Как показано на рисунке 40, процесс самоорганизации реализуется в зоне взаимодействия волн разгрузки под действием растягивающих напряжений и сопровождается образованием кластеров локальных повреждений в форме трещин.

При нагружении импульсов с амплитудой 5 ГПа существенных повреждений в волне нагружения керамический композит не испытывает, поэтому повреждение и фрагментация происходит именно в зоне взаимодействия волн разгрузки.

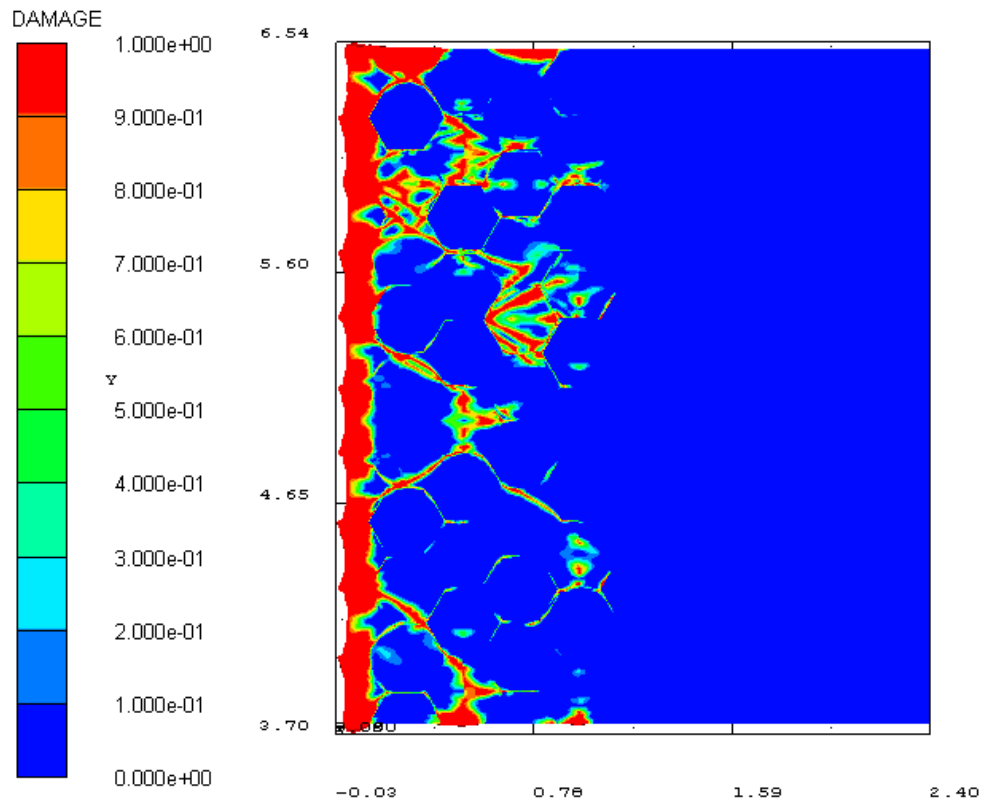


Рисунок 40 – Образование блочной субструктуры за фронтом ударной волны в композиционных материалах $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{t-ZrO}_2$

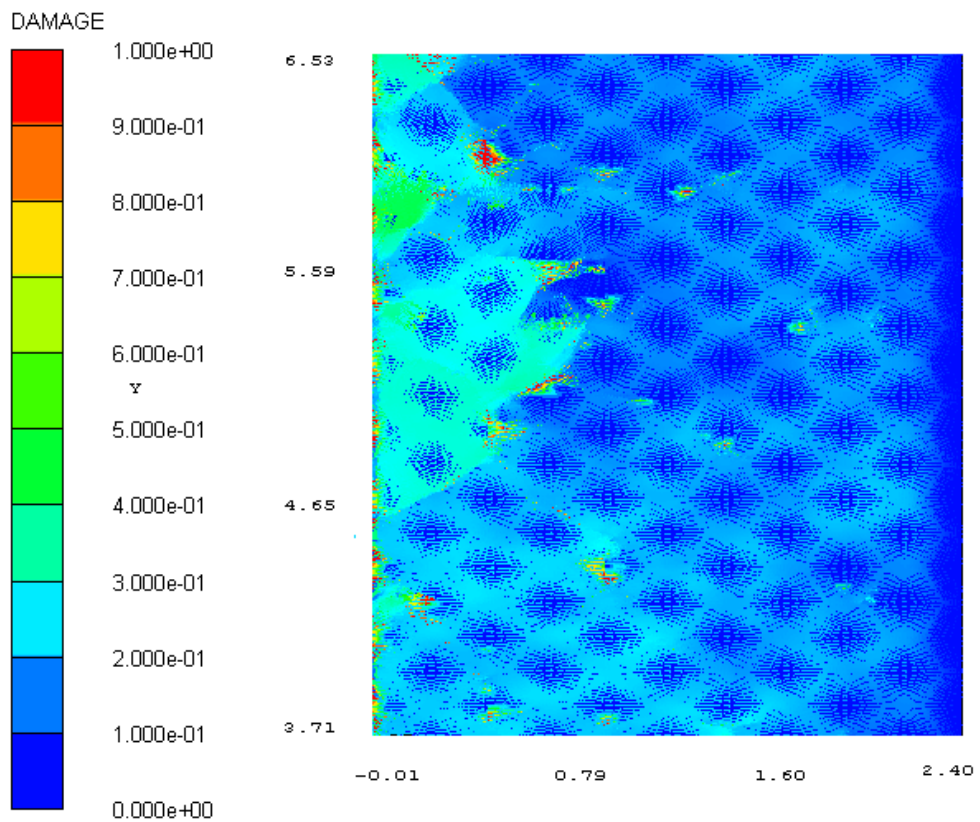


Рисунок 41– Распределение повреждений на мезоскопическом уровне в зоне взаимодействия волн разгрузки в $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{t-ZrO}_2$

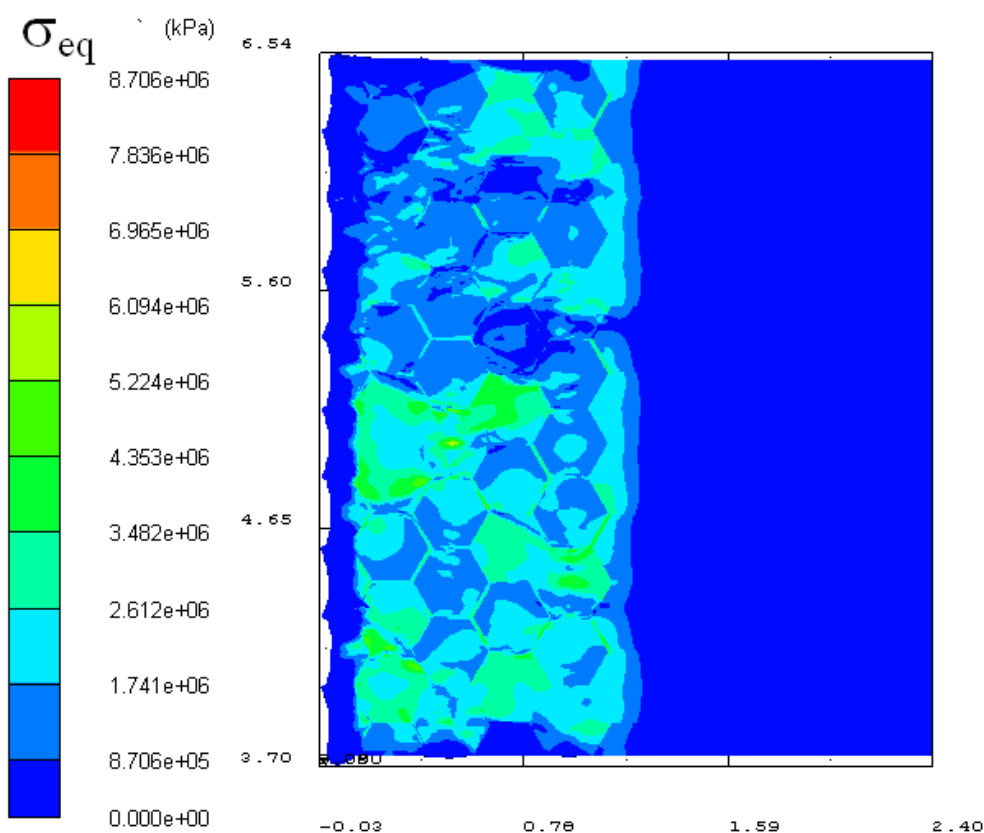
При моделировании импульсного сжатия керамических композитов Al_2O_3 – t-ZrO_2 во фронте волн напряжений с амплитудами изменяющимися в диапазоне от 5 ГПа до предела упругости Гюгонио до 15 ГПа, самоорганизации в системе локальных поврежденных микрообъемов за фронтом волны сжатия не отмечено.

Формирование мезоскопических трещин в этом случае является процессом организации в системе локальных повреждений.

Квазиравномерное распределение упрочняющих частиц в композите способствует формированию повреждений, распределенных в виде границ мезоскопических блоков.

Развитие повреждений в форме блочной структуры обуславливает интенсивной диссипации внутренней энергии в композиционном материале без потери макроскопической прочности из-за разрушения.

На рисунке 42 и 43 показаны расчетные значения интенсивности сдвиговых напряжений в модельном объеме керамического нанокompозита для моментов времени 0,12 и 0,225 нс.



Рисунке 42 – Интенсивность локальных сдвиговых напряжений в нанокompозите Al_2O_3 - t ZrO_2 за фронтом волны напряжения

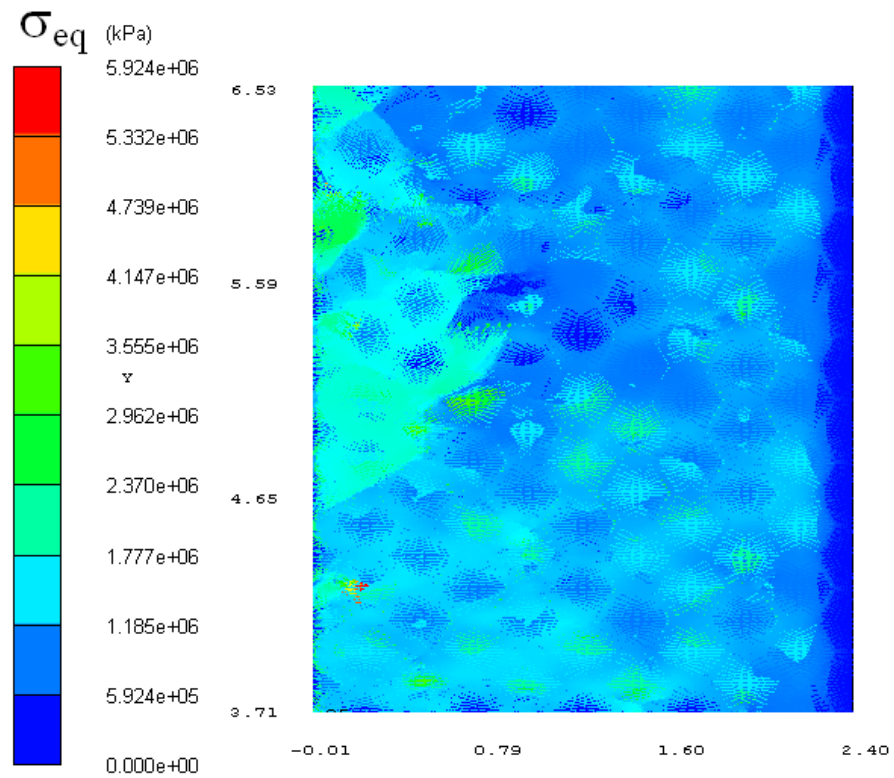


Рисунок 43 – Интенсивность локальных сдвиговых напряжений в нанокompозите Al_2O_3 -t ZrO_2 за фронтом волны напряжения

На рисунке 44 и 45 показаны поля локальных значений модуля вектора скорости материальных частиц.

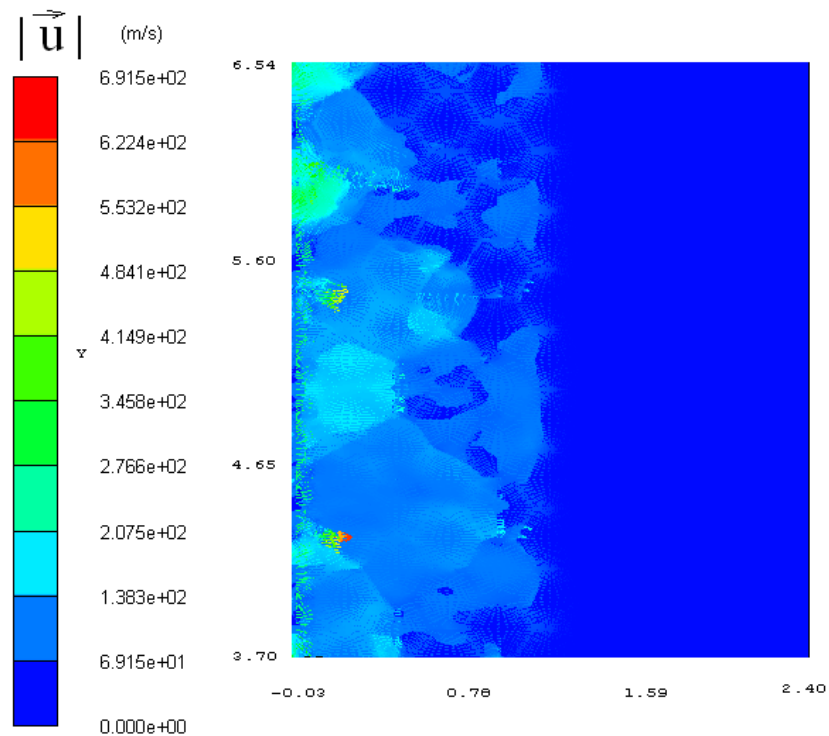


Рисунок 44 – Поле локальных скоростей материальных частиц в нанокompозите Al_2O_3 -t ZrO_2 за фронтом волны напряжения

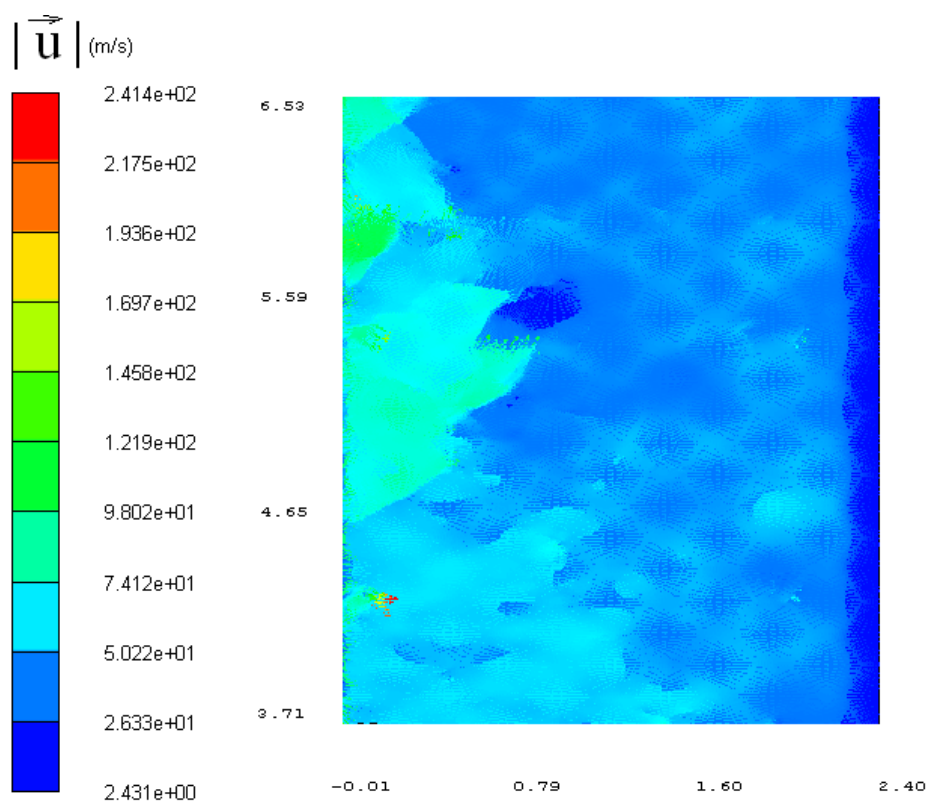


Рисунок 45 – Поле локальных скоростей материальных частиц в нанокompозите Al_2O_3 -t ZrO_2 за фронтом волны напряжения

Значения пределов упругости Гюгонио для керамических композитов Al_2O_3 - ZrO_2 , Al_2O_3 - B_4C , ZrB_2 - B_4C , ZrB_2 - t ZrO_2 , ZrB_2 – Al_2O_3 с концентрацией упрочняющих включений 0, 5, 10, 15, 20, 25 и 30 % приведены в таблице 9.

Таблица 9 – Теоретические значения предела упругости Гюгонио для керамических композитов

Композит	Пределы упругости Гюгонио σ_{HEL} (ГПа)						
	Объемная концентрация упрочняющих включений (%)						
	0	5	10	15	20	25	30
ZrB_2 - B_4C	7.11	7.43	7.8	8.5	9.1	9.55	10.1
ZrB_2 - t ZrO_2	7.11	7.45	8.9	8.53	9.04	9.4	10.01
ZrB_2 – Al_2O_3	7.11	7.30	7.43	7.64	7.9	7.8	7.7
Al_2O_3 - ZrO_2 ,	9.1	9.35	9.67	9.9	10.01	10.3	10.4
Al_2O_3 - B_4C	9.07	9.36	9.77	10.05	10.65	11.5	11.1

Оценки пределов упругости Гюгонио получены для модельных объемов композитов с квазиравномерным распределением упрочняющих частиц в объеме материала. Модельные объемы содержали упрочняющие частицы с размером 1 мкм и поры с размером 0.5 мкм. Интегральная пористость принималась, равной ~2 %.

Наличие кластеров наночастиц в керамических композитах и нанокомпозитах вызывает разброс значений динамической сдвиговой прочности и величин пределов упругости Гюгонио.

На рисунке 46 показаны сечения модельных объемов керамических композитов и нанокомпозитов с объемной концентрацией включений ~25 % и квазиравномерным распределением упрочняющих частиц (а), при наличии кластеров частиц (б). В расчетах были использованы модельные представительные объемы нанокомпозитов $2.5 \times 7.0 \times 0.5$ мкм с показанным распределением включений с размерами 0.3 мкм. Для исследования влияния масштабного фактора на развитие повреждений в керамических композитах были использованы модели с аналогичными типами распределений 3 мкм частиц и размерами модельных представительных объемов $25 \times 70 \times 5$ мкм.

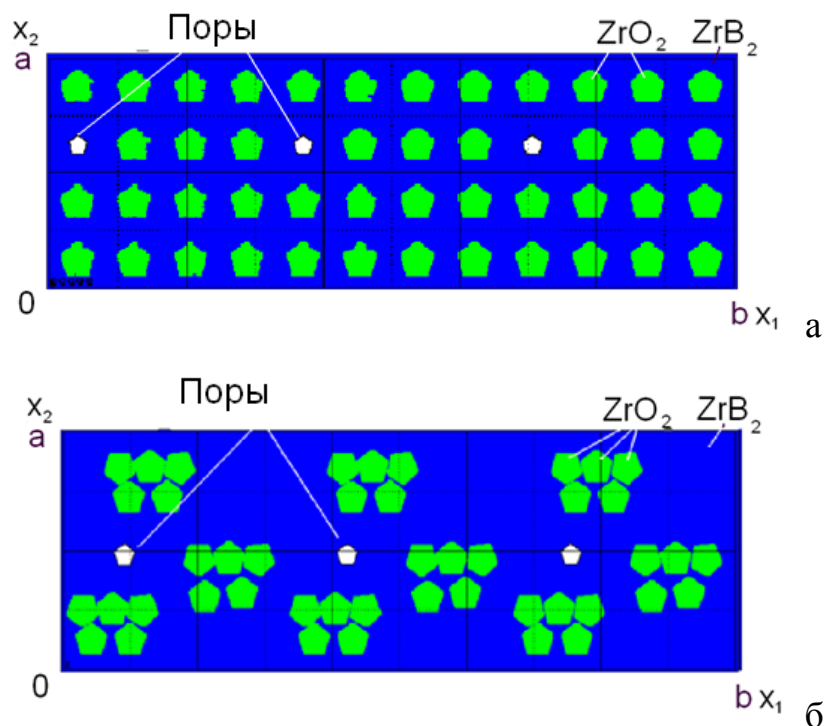


Рисунок 46 - Сечения модельных объемов керамических композитов

На рисунке 47 показано распределение давления за фронтом ударной волны с амплитудой 10 ГПа в образце композита ZrB_2 – 25 об. % t ZrO_2 с квазиравномерным распределением упрочняющих частиц (а) и при наличии кластеров частиц (б).

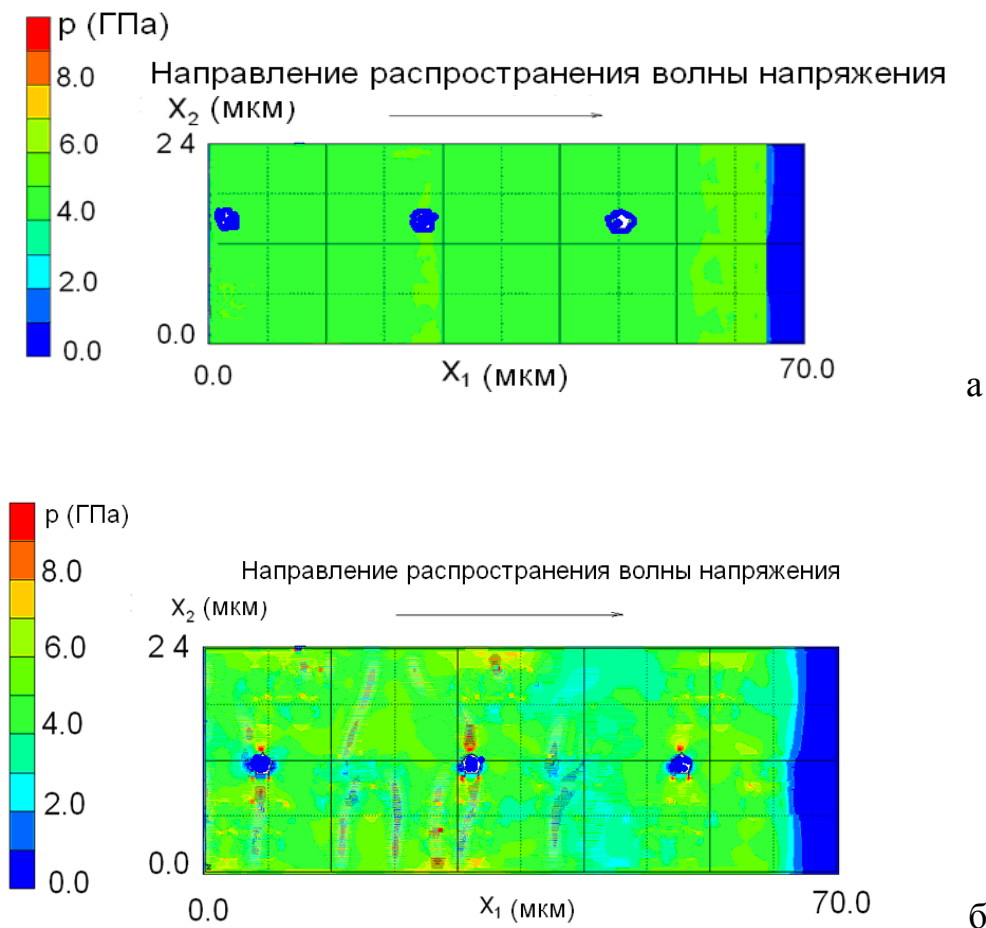


Рисунок 47 - Давление за фронтом ударной волны в образцах композита ZrB_2 – 25 об. % t ZrO_2

Средняя скорость упругого предвестника и волны объемного сжатия для выбранных представительных объемов композитов при эквивалентных интенсивностях ударных волн практически совпадает. Из полученных результатов моделирования распространения ударной волны на мезоскопическом уровне следует слабая зависимость эффективных моделей упругости композитов от характера распределения и формы упрочняющих частиц. Наличие кластеров частиц приводит к появлению распределения параметров состояния (давления, скоростей материальных частиц, скоростей деформаций) в представительном объеме за фронтом ударной волны на мезоскопическом уровне. Деформация и зарождение повреждений при ударном сжатии керамических композитов

сопровождается коллапсом пор. Процесс коллапса пор с размерами 3 мкм в матрице ZrB_2 связано с перемещением фрагментов материала в полость пор. Данный процесс протекает с характерными значениями времени на порядок превышающие соответствующие значения для зарождения наноразмерных и субмикроскопических трещин в керамической матрице. На рисунке 48 показано распределение параметра поврежденности нанокompозитов $ZrB_2-25 \text{ об. \% t } ZrO_2$ с квазиравномерным распределением упрочняющих частиц (а) и при наличии кластеров частиц (б) за фронтом ударной волны с амплитудой 10 ГПа в момент времени $6 \cdot 10^{-10} \text{ [с]}$ после воздействия импульса на правом торце образца.

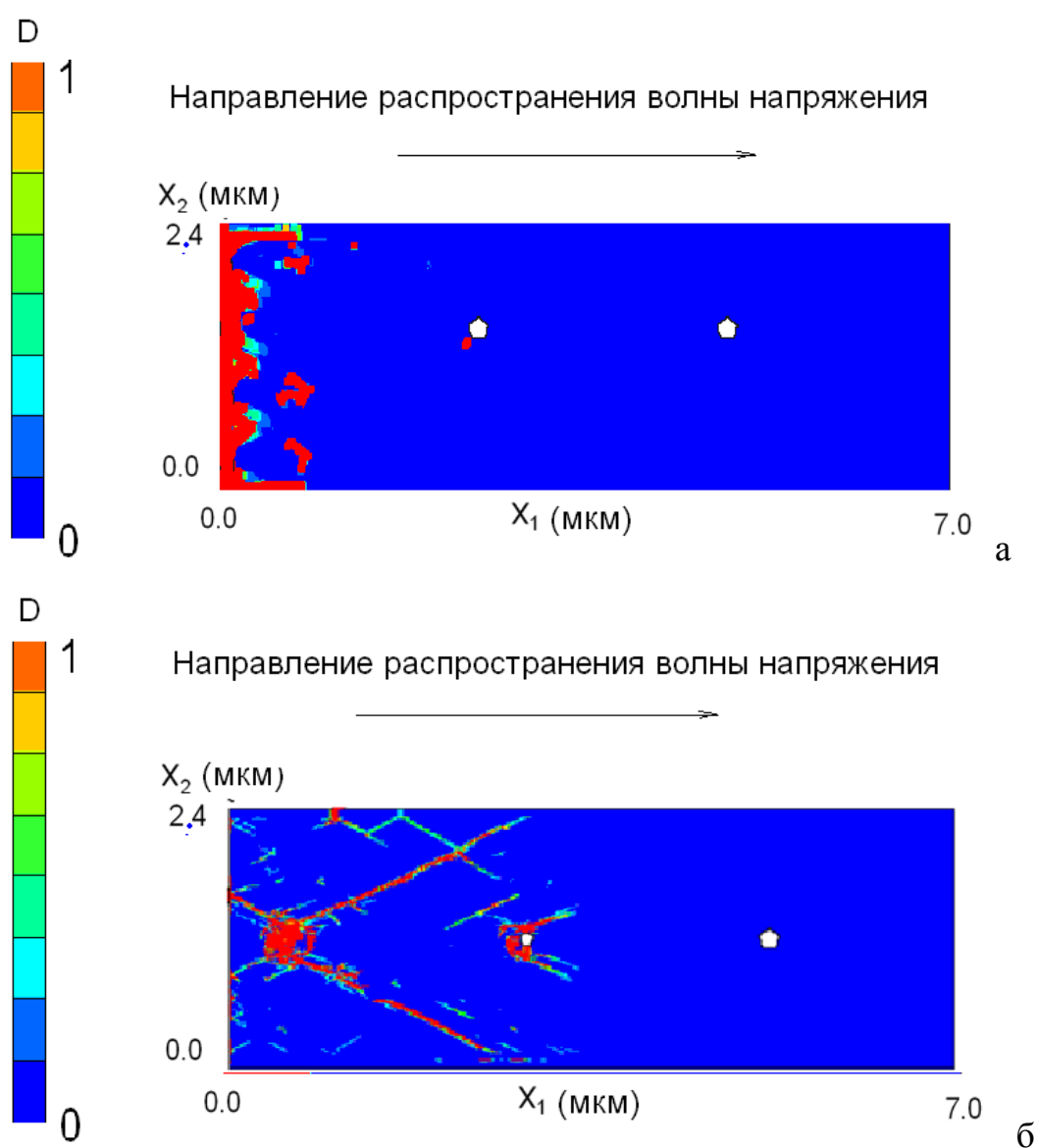


Рисунок 48 – Параметр поврежденности за фронтом ударной волны в образцах композита $ZrB_2-25 \text{ об. \% t } ZrO_2$

Коллапс пор сопровождается развитием вокруг пор наноразмерных трещин и образование трещин сдвига в матрице композита. Частицы $t \text{ ZrO}_2$ препятствуют росту размеров мезоскопических трещин в нанокompозите $\text{ZrB}_2 - t \text{ ZrO}_2$. С увеличением концентрации частиц $t \text{ ZrO}_2$, количество мезоскопических трещин и их средние размеры в матрице ZrB_2 за фронтом ударной волны уменьшаются. В рамках модели это явление обусловлено учетом технологических остаточных напряжений в композите и различием в сжимаемости частиц и матрицы.

В рассмотренном интервале времени (~ 1 нс) не отмечено образование трещин в упрочняющих частицах $t \text{ ZrO}_2$ за фронтом ударной волны с амплитудой 10 ГПа в нанокompозитах $\text{ZrB}_2 - 25 \text{ об. \% } t \text{ ZrO}_2$.

Результаты моделирования позволяют определить величину эффективного предела упругости Гюгонио. Значения пределов упругости Гюгонио определенные для модельных структур композитов с концентрациями упрочняющих частиц 0, 5, 10, 15, 20, 25, 30 об. % приведены в таблице 9.

Распад фронта ударной волны на упругий предвестник и волну объемного сжатия, обусловлен релаксацией сдвиговых напряжений в результате зарождения трещин вблизи пор. Наличие упрочняющих частиц $t \text{ ZrO}_2$, имеющих близкие модули объемного сжатия, не приводит росту локальных сдвиговых напряжений при ударном сжатии нанокompозитов $\text{ZrB}_2 - t \text{ ZrO}_2$. Однако при ударном сжатии композитов $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2 - \text{B}_4\text{C}$ с существенными различиями в модулях объемного сжатия, кластеры упрочняющих частиц способствуют возрастанию локальных сдвиговых напряжений на границах с матрицей и в объемах между кластерами частиц. На рисунке 49 показаны распределение повреждений за фронтом ударной волны с амплитудой 10 ГПа в момент времени 0.8 нс в нанокompозитах $\text{ZrB}_2 - \text{B}_4\text{C}$ с квазиравномерным распределением упрочняющих частиц (а) и при наличии кластеров (б).

Изменение удельной внутренней энергии в материальных точках матрицы, характеризующее диссипацию энергии при разрушении нанокompозитах $\text{ZrB}_2 - \text{B}_4\text{C}$, показано на рисунке 50.

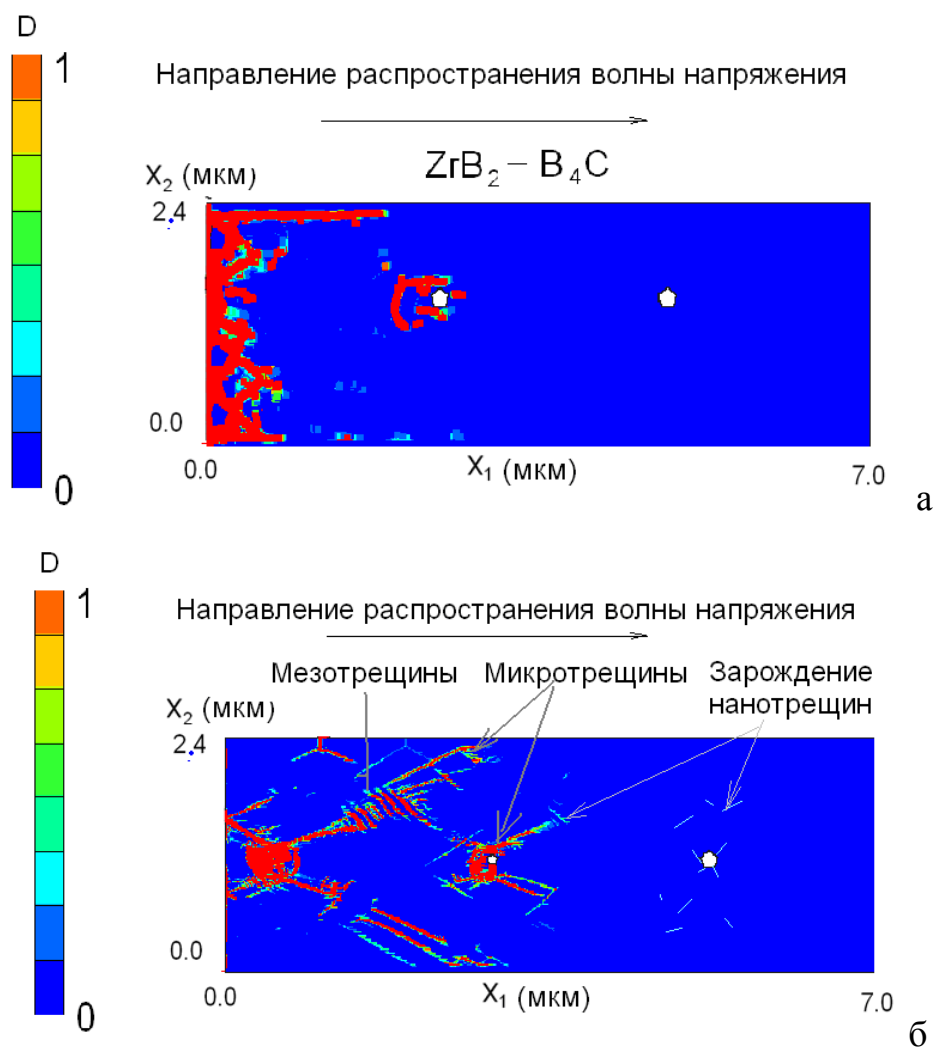


Рисунок 49 – Параметр поврежденности за фронтом ударной волны в образцах композита ZrB_2-25 об. % B_4C

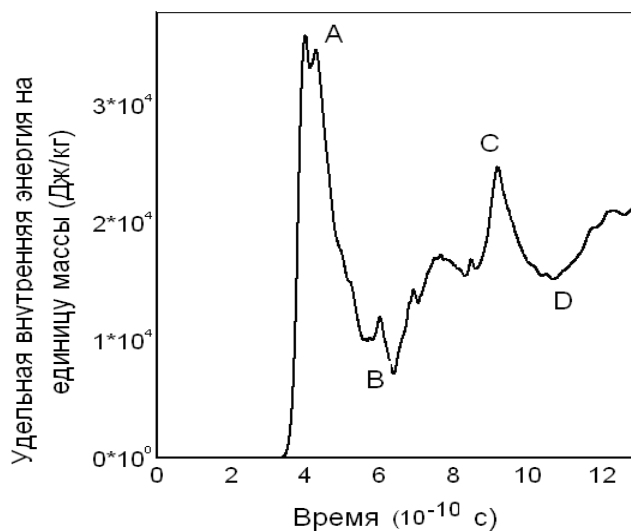


Рисунок 50 – Удельная внутренняя энергия на единицу массы в нанокompозите ZrB_2-25 об. % B_4C

Наноразмерные трещины сдвига зарождаются в матрице вблизи пор и кластеров упрочняющих частиц. Из результатов, показанных на рисунке 50, следует, что зарождение наноразмерных трещин сопровождается релаксацией напряжений и относительно невысокой скоростью диссипации энергии вблизи т. А.

Интенсивная диссипация упругой энергии ударно-сжатого композита $ZrB_2 - B_4C$ связана с процессами самоорганизации нанотрещин и образованием микротрещин (участок АВ на рисунке 50). Участку BCD соответствует процесс формирования мезоскопической трещины. Скорость диссипации энергии снижается в 3-10 раз. Это означает, что характер динамического разрушения рассмотренных классов керамических композитов и нанокомпозитов является квазихрупким. Отметим, что в условиях квазистатического нагружения рассмотренные композиционные материалы при низких гомологических температурах разрушаются хрупко [39-44, 47,48]. Таким образом, нанокомпозиты ZrB_2-B_4C , $ZrB_2-t ZrO_2$ при воздействии ударных импульсов с амплитудами, превышающим макроскопический предел упругости, разрушаются квазихрупко.

Полученные оценки пределов упругости композитов на основе ZrB_2 показывают, что максимальные значения могут иметь композиты ZrB_2-B_4C при концентрации микронных и субмикронных частиц B_4C до 25-30 %.

В керамических композитах $ZrB_2 - Al_2O_3$ концентрация частиц оксида алюминия в пределах от 0 до 30 об. % слабо влияет на величину предела упругости Гюгонио.

3.3 Трещиностойкость керамических композитов и нанокомпозитов при интенсивных динамических воздействиях

При проведении прочностного динамического анализа в процессе проектировании элементов конструкций из керамических композитов возникает потребность в данных о трещиностойкости, динамической прочности при сжатии и при растяжении.

Величина динамической трещиностойкости может быть выражена

$$K_{Id} = \frac{1}{\sqrt{24}} \rho C_L \dot{\varepsilon}_{eq} s^{3/2},$$

где s – средний размер фрагментов ($V_f = \frac{4}{3}s^3$),

V_f – средний объем блока разрушенного модельного объема,

ρ – эффективная массовая плотность композиционного материала,

C_L – продольная скорость звука,

$\dot{\varepsilon}_{eq}$ – усредненная в модельном объеме скорость деформации.

В [111] было предложено соотношение, связывающее неупругую деформацию хрупких сред с величиной динамической трещиностойкости:

$$\dot{\varepsilon}_{eq0}^p = 2.4 \frac{C_L}{s} \frac{K_{IC}}{E} \eta^{1/4},$$

где C_L – продольная скорость звука, s – средний размер мезоскопических трещин, E – модуль сдвига в керамической фазе, η плотность трещин в единице объема, K_{IC} – значение динамической трещиностойкости.

При использовании данного соотношения для анализа результатов компьютерного моделирования могут быть получены оценки динамической трещиностойкости керамических композитов и нанокompозитов.

$$K_{IC} = \frac{1}{2.4} \frac{Es}{C_L} \dot{\varepsilon}_{eq0}^p \eta^{-1/4},$$

В результате моделирования деформации и повреждения модельного представительного объема материала получены изменения во времени полей компонент тензоров напряжений, деформаций, вектора скорости материальных частиц, а также температуры, удельной внутренней энергии, диссипированной энергии в результате развития неупругих деформаций и повреждений.

Для расчета трещиностойкости модельных композиционных материалов K_{IC} также применялось соотношение

$$K_{IC} = J \sqrt{E' / (1 - \nu^2)},$$

где J – интеграл,

$\langle E' \rangle = [9 \langle K \rangle \langle \mu \rangle] / [3 \langle k \rangle + \langle \mu \rangle]$ – эффективный модуль Юнга модельного композита,

$\langle \nu \rangle = [3 \langle K \rangle - 2 \langle \mu \rangle] / [2(3 \langle K \rangle + \langle \mu \rangle)]$ – эффективное значение коэффициента Пуассона для модельного композита.

Значения эффективных модулей объемного сжатия и модуля сдвига модельного композита определяются по результатам моделирования распространения импульсов нагружения с помощью (5).

На рисунке 51 показана полученная в расчетах зависимость эффективных значений трещиностойкости для модельных композиционных материалов $ZrO_2 - Al_2O_3$ с концентрацией Al_2O_3 включений от 0, 5, 10, 15, 20, 25, 30 %. Расчетные значения K_{IC} показаны круглыми символами, треугольные символами показаны экспериментальные данные [35, 37, 42-45]. Для всех модельных материалов размеры зерна матрицы и размеры включений принимались равными 0,5 мкм. Полученная теоретическая зависимость трещиностойкости композитов $ZrO_2 - Al_2O_3$ может быть аппроксимирована в диапазоне концентраций включений от 0 до 30 % уравнением

$$K_{IC} = 3,0095 + 2,873C + 248C^2 - 911C^3,$$

где C – относительный объем упрочняющих частиц.

При более высоком объемном содержании упрочняющих частиц в структуре композитов достигается предел перколяции в системе включений, формируются каркасные армирующие структуры.

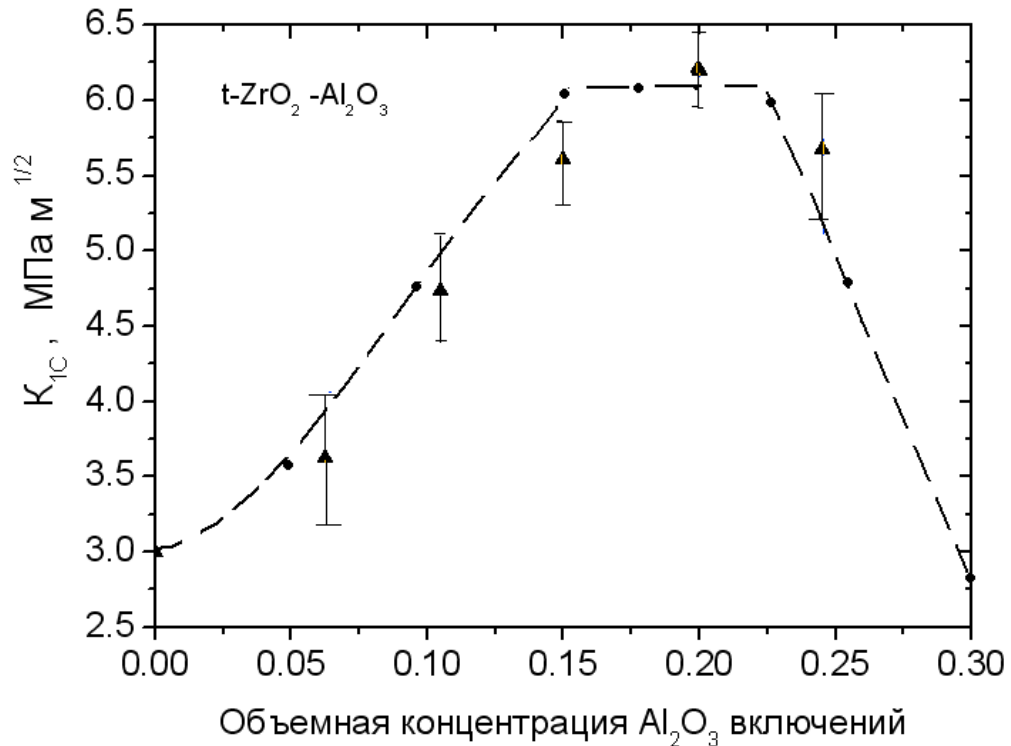


Рисунок 51- Трещиностойкость композитов $\text{ZrO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ от объемного содержания включений Al_2O_3

Результаты моделирования показывают, что макроскопические прочностные характеристик оксидных керамических композитов, включая трещиностойкость, увеличиваются с ростом концентрации упрочняющей фазы до значений соответствующих перколяционному переходу.

Для исследования влияния скорости нагружения на вязкость разрушения и трещиностойкость керамических композитов $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{t-ZrO}_2$ с объемным содержанием субмикронных частиц t-ZrO_2 5, 10 и 15 % проведены вычислительные эксперименты по высокоскоростному сжатию модельных образцов в ударных волнах и высокоскоростному растяжению в области взаимодействия волн разгрузки.

На рисунке 52 показано распределение в модельном объеме удельной работы разрушения композиционного материала Al_2O_3 10 % Vol. t-ZrO_2 при сжатии во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа .

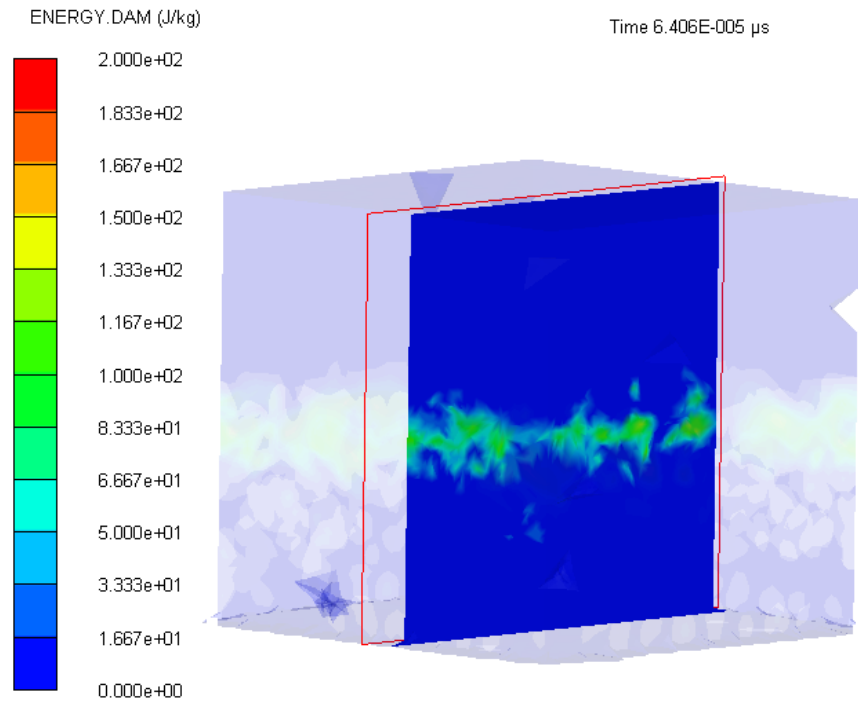


Рисунок 52 – Удельная работа разрушения композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t- ZrO_2 во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа

На рисунке 53 показана эффективная скорость деформации – в момент времени 0,06 нс при сжатии во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа.

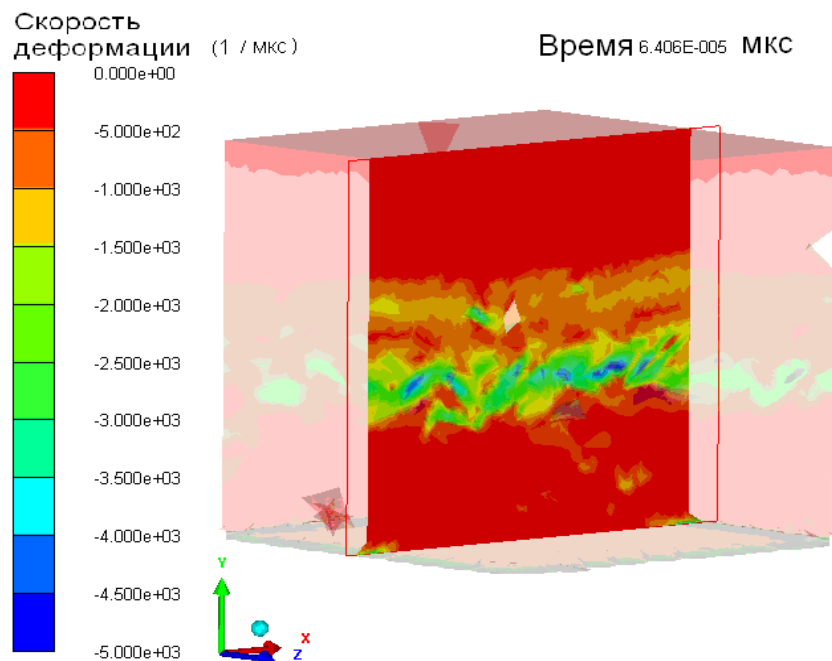
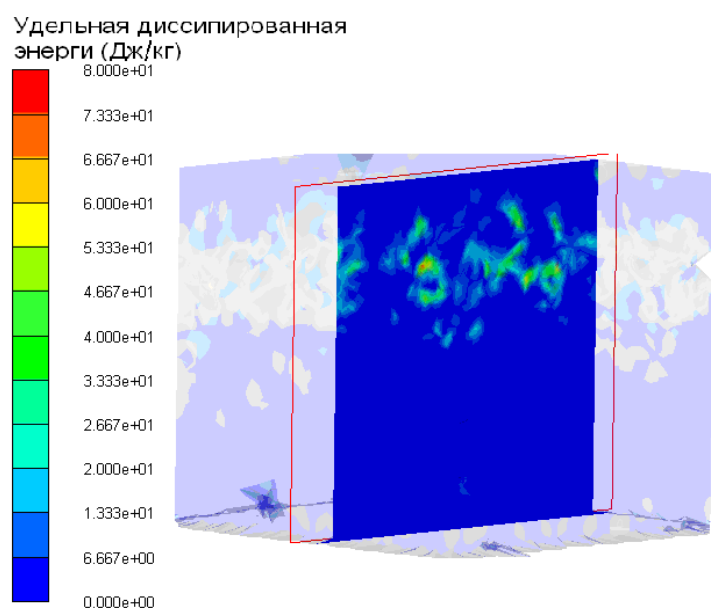


Рисунок 53 – Скорость деформации композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t- ZrO_2 во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа в момент времени 0,06 нс

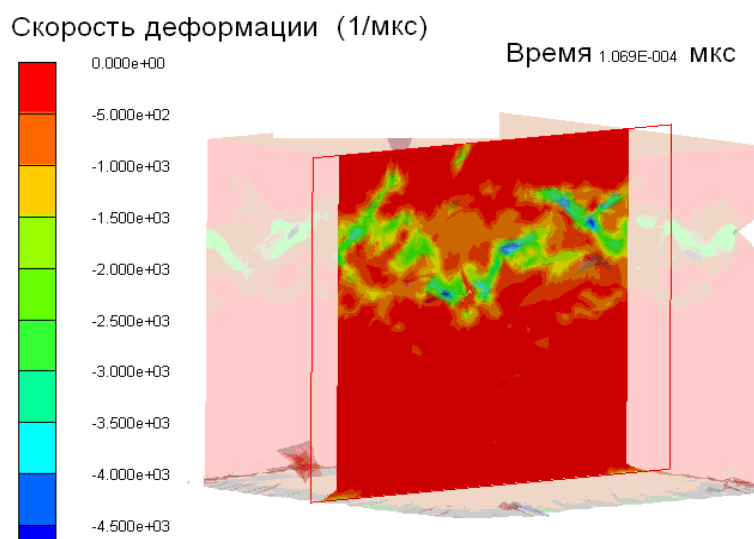
На рисунке 54 показано распределение в модельном объеме удельной работы разрушения композиционного материала Al_2O_3 10 % Vol. t- ZrO_2 при

сжатии во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа - (а) и эффективная скорость деформации - (б) в момент времени 0,1 нс.

Полученные при моделировании результаты показали, что величина удельной работы разрушения в области ударного перехода при высокоскоростном сжатии зависит от концентрации упрочняющих субмикронных частиц и слабо зависит от их формы и размеров (в исследованном диапазоне варьирования).



а



б

Рисунок 54 – Удельная работа разрушения композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t-ZrO₂ во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа - (а) и эффективная скорость деформации - (б) в момент времени 0,1069 нс

На рисунке 55 показано распределение в модельном объеме удельной работы разрушения композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t- ZrO_2 при сжатии во фронте ударной с амплитудой 10 ГПа - (а) и эффективная скорость деформации - (б) в момент времени 0,03856 нс.

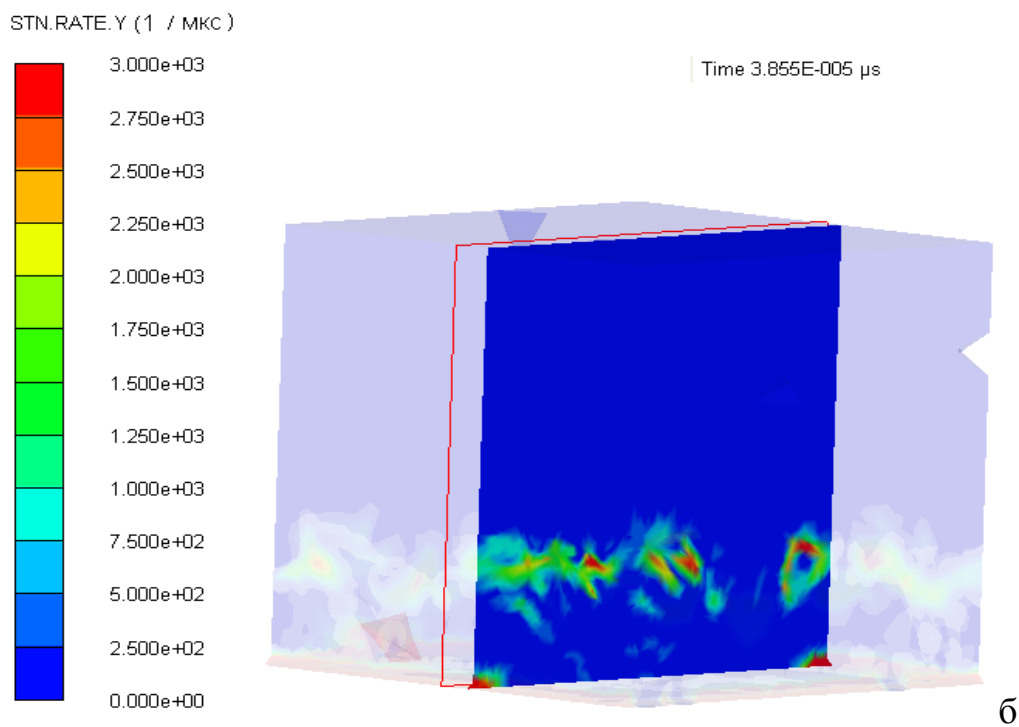
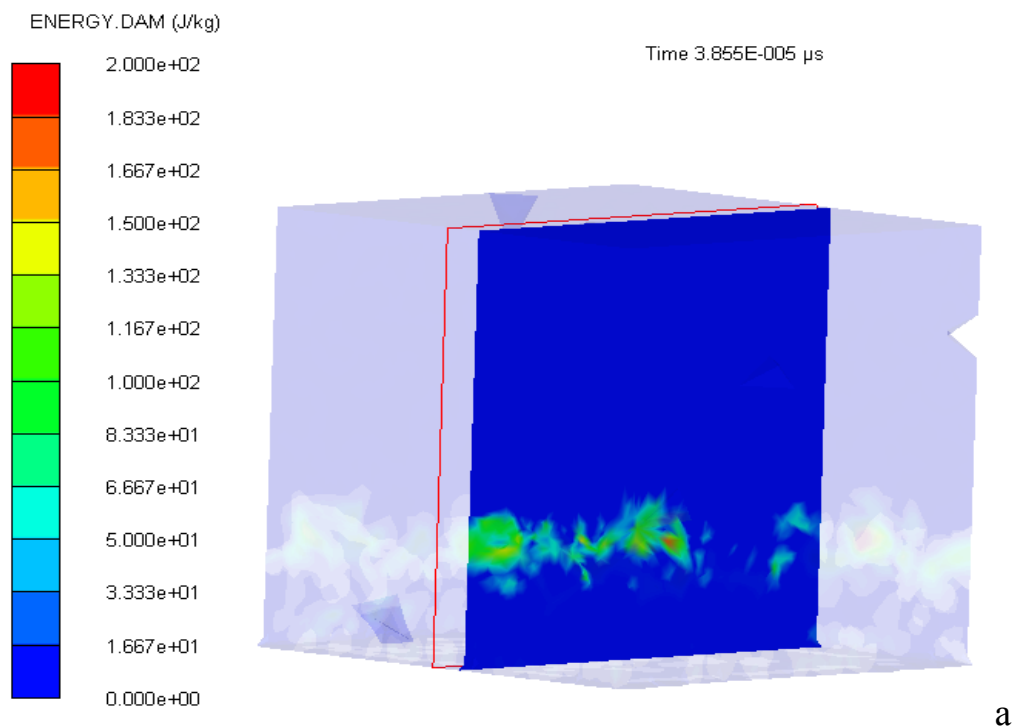


Рисунок 55 – Удельная работа разрушения композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t- ZrO_2 во фронте ударной с амплитудой 10 ГПа - (а) и эффективная скорость деформации - (б) в момент времени 0,03856 нс

На рисунке 56 показано распределение удельной работы разрушения при ударном сжатии того же модельного объема, что и на рисунке 25, но при большей амплитуде нагрузки – 24 ГПа.

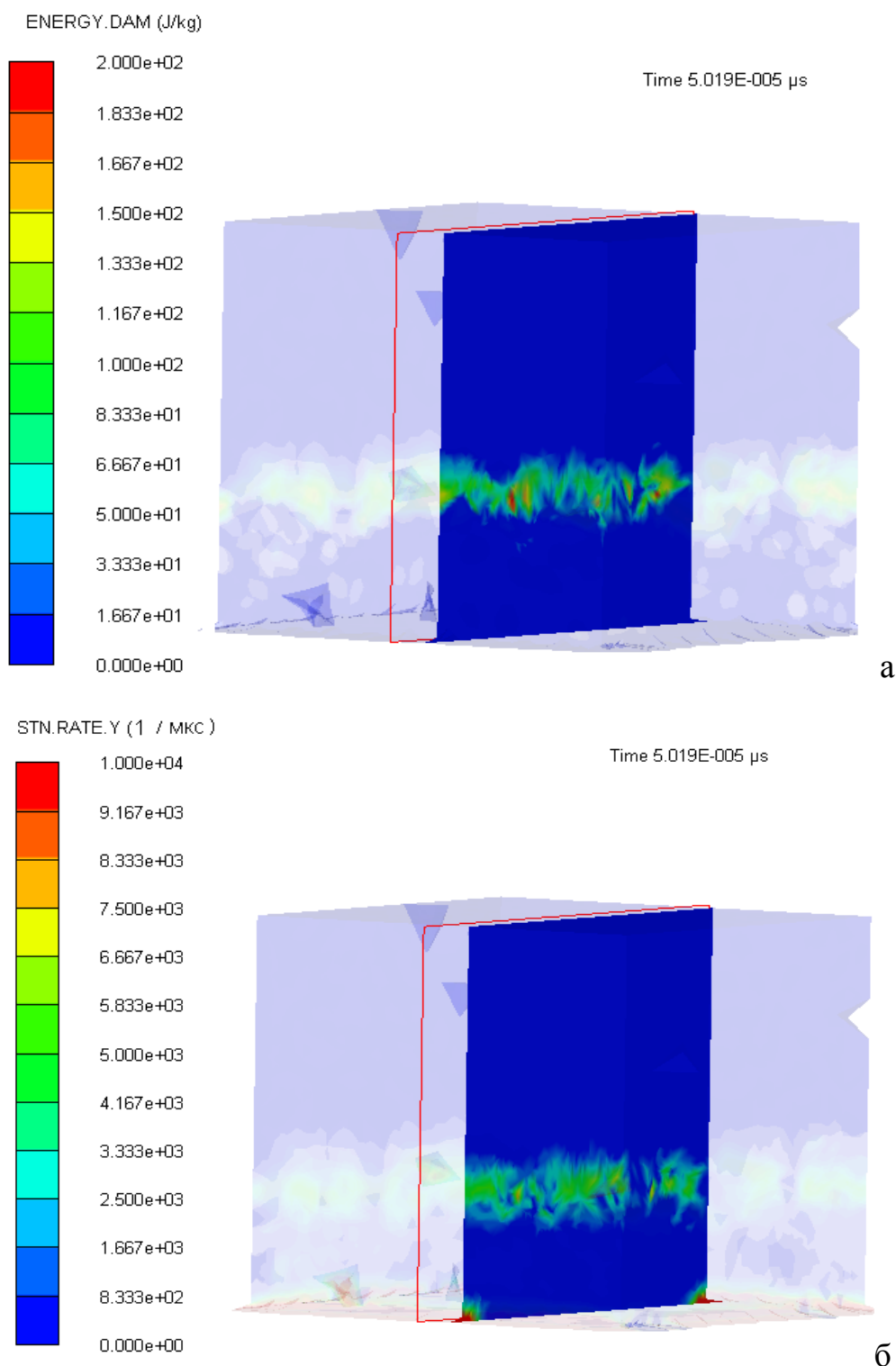


Рисунок 56– Удельная работа разрушения композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t-ZrO₂ во фронте ударной с амплитудой 24 ГПа - (а) и эффективная скорость деформации - (б) в момент времени 0,05 нс

Анализ результатов моделирования показал, что структура композиционного материала и, в частности, объемная концентрация упрочняющей фазы влияет на ширину ударного перехода. В результате, при одинаковых амплитудах нагружения в области ударного перехода композиционные материалы с различной концентрацией упрочняющей фазы деформируются с отличающимися скоростями деформации.

С ростом амплитуды нагрузки скорость деформации для определенного композиционного материала в области ударного перехода увеличивается. В частности, при ударном нагружении композиционного материала Al_2O_3 15 % Vol. t-ZrO₂ с амплитудами 10 и 24 ГПа, скорость деформации в области ударного перехода возросла с 3000 до 6500 1/мкс.

Следует учитывать, что локальные скорости деформации, реализующиеся в области ударного перехода, могут превышать усредненные скорости деформации в макроскопическом объеме композиционного материала более чем на десятичный порядок.

Полученные результаты показали, что при скоростях деформации от 1000 до 6500 1/мкс вязкость разрушения нанокompозитов Al_2O_3 - t-ZrO₂ изменяется слабо. Таким образом, динамическая вязкость разрушения может рассматриваться как одна из прочностных характеристик.

Из результатов моделирования, показанных на рисунках 23-26, следует, что зарождение повреждений инициируется вблизи наноразмерных пор, а не в области упрочняющих частиц.

В рассмотренных условиях нагружения эффект от изменения объема частиц ZrO₂ при фазовом переходе $t \rightarrow \text{Ortho I}$ и $t \rightarrow \text{Ortho II}$ в композиционных материалах Al_2O_3 - t-ZrO₂ оказался не существенным. При более низких скоростях деформации и значениях гидростатического давления, не превышающего 5 ГПа, в композиционных материалах Al_2O_3 - t-ZrO₂ могут протекать фазовые превращения ZrO₂ из тетрагональной в моноклинную фазу. В этом случае, как было показано на предыдущих этапах в данной НИР, прочность, трещиностойкость и вязкость разрушения возрастают.

Следует отметить, что величина упрочняющего эффекта от наполнения наноструктурной оксид-алюминиевой матрицы субмикронными включениями $t\text{-ZrO}_2$ зависит от размеров частиц. При размерах частиц менее 400 нм протекание механоактивируемых мартенситных фазовых переходов $t \rightarrow m$ затруднено. В результате, при интенсивной деформации в зоне зарождения и распространения трещины дисперсные частицы $t\text{-ZrO}_2$ не испытывают фазовых превращений, а играют роль слабдеформируемых частиц.

Для оценки параметра динамической трещиностойкости K_{IC} используются вычисленные значения напряженно-деформированного состояния для последовательных моментов времени.

$$K_{Id} = \delta_I \sqrt{\frac{2\mu G \beta_{II}}{A_I (\delta_I^2 \beta_{II} + \delta_{II}^2 \beta_{II})}},$$

где K_I – коэффициент интенсивности напряжений для трещины отрыва,

δ_I – величина раскрытия трещины, определяемая по смещениям частиц в ортогональном направлении к плоскости трещины,

μ – модуль сдвига,

G – скорость высвобождения энергии трещины,

$$\beta_I = \sqrt{1 - C/C_s^2},$$

$$\beta_{II} = \sqrt{1 - C/C_d^2},$$

$$C_s^2 = \frac{\mu}{\rho},$$

$$C_d^2 = \left[\frac{\xi + 1}{\xi - 1} \right] C_s^2,$$

$$\xi = \frac{3 - \nu}{1 + \nu},$$

ν – коэффициент Пуассона для соответствующей конденсированной фазы частицы,

C – скорость движения трещины, определяемая в текущий момент времени t по изменению значений координат частиц потерявших взаимодействие с соседями в интервале времени t , $t - q \Delta t$ ($9 \leq q < 90$),

$$A_1 = \frac{\beta_1 (1 - \beta_{II}^2)}{4\beta_1 \beta_{II} - (1 + \beta_{II}^2)^2}.$$

Скорость высвобождения энергии трещины определяется приращениями удельной работа разрушения, которые вычисляются при моделировании высокоскоростной деформации повреждаемого модельного объема композиционного материала.

Теоретическая зависимость трещиностойкости композиционных материалов $Al_2O_3 - t-ZrO_2$ в диапазоне изменения эффективной макроскопической скорости деформации от 0,001 до 10^6 1/с показана на рисунке 52. Символами показаны расчетные значения параметров трещиностойкости для модельного объема композиционного материала $Al_2O_3 - 15 \% Vol. t-ZrO_2$.

В рассмотренном диапазоне зависимость трещиностойкости композиционных материалов $Al_2O_3 - t-ZrO_2$ от скорости эффективной макроскопической скорости деформации не является монотонной. Условно можно выделить четыре интервала с характерными зависимостями трещиностойкости от скорости деформации, показанные на рисунке 57. В квазистатической области нагружения I величина трещиностойкости слабо зависит от скорости деформации. Это согласуется с результатами экспериментальных исследований с применением различных методов определения трещиностойкости [1, 3, 8].

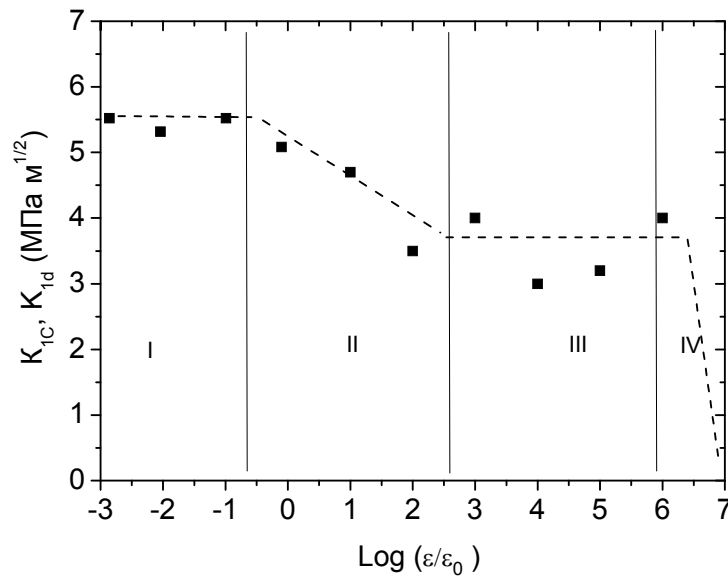


Рисунок 57 – Зависимость K_{Id} и K_{IC} от логарифма макроскопической скорости деформации

В области динамического нагружения II, для рассмотренных модельных композиционных материалов происходит снижение эффективных значений трещиностойкости. Это связано с развитием мезоскопических трещин в матрице и запаздыванием эффекта трансформационного упрочнения за счет мартенситных фазовых переходов в субмикронных частицах $t\text{-ZrO}_2$.

В области интенсивных динамических воздействий, оценки эффективных значений трещиностойкости керамического композита в зоне откола, показывают слабую зависимость K_{Id} от скорости деформации. В области ударно-волновых воздействий с амплитудами существенно, превышающими предел упругости Гюгонио IV – величина трещиностойкости резко снижается.

В рамках использованных модельных представлений такое снижение трещиностойкости обусловлено интенсивным зарождением микротрещин в объеме материала. Характер разрушения в этих условиях связан не с ростом размеров мезоскопических трещин, а с слиянием множественных субмикронных трещин, образующихся в объеме композита. Зарождение повреждений происходит и в наноструктурной матрице и в субмикронных упрочняющих частицах.

Таким образом, повышение вязкости разрушения композиционных материалов может быть достигнуто существенным уменьшением размеров пор и средней пористости композиционного материала, уменьшением размеров зерна матрицы до значений от 100 до 500 нм, наполнением оксидной матрицы упрочняющими частицами оксидных, боридных и карбидных соединений с размерами от 500 нм до 1 мкм. Форма частиц (при варьировании параметра формы от 0,5 до 1) существенного влияния на величину прочностных характеристик не оказывает, что позволяет использовать для упрочнения частицы с широким распределением параметров формы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты диссертационной работы заключаются в следующем

1. Развита методика многоуровневого моделирования механического поведения объемных керамических композитов и нанокompозитов при динамическом нагружении в 3D постановке, позволяющий исследовать влияние структуры на свойства материалов при интенсивных динамических воздействиях. Развитие подхода заключается в разработке методики построения представительных объемов керамических композитов, разработке методики моделирования динамического разрушения, разработке алгоритмов применения метода сглаженных частиц для моделирования деформации и разрушения композитов и нанокompозитов на мезоскопическом уровне при динамических нагрузках.

2. Предложена физико-математическая модель деформации и разрушения объемных керамических композитов и нанокompозитов с учетом структуры на мезоскопическом уровне при динамическом нагружении. Разработанная физико-математическая модель позволяет описывать механическое поведение керамических композитов на основе Al_2O_3 , t ZrO_2 и ZrB_2 при интенсивных динамических воздействиях с амплитудами до 20 ГПа, с учетом размеров упрочняющих включений и пор, объемного содержания фаз, наличия кластеров упрочняющих частиц на мезоскопическом уровне.

3. Разработана методика численного моделирования процессов деформации и разрушения керамических композитов и нанокompозитов на мезоскопическом уровне с использованием метода сглаженных частиц для прогнозирования влияния структуры материалов на модули упругости, пределы упругости Гюгонио при интенсивных динамических воздействиях с амплитудами до 20 ГПа. Разработан алгоритм реализации предложенной модели для компьютерного моделирования процессов деформации и динамического разрушения керамических композитов при интенсивных импульсных воздействиях.

4. В результате проведенных численных исследований с использованием разработанных моделей и алгоритмов впервые получены закономерности

развития повреждений и разрушения, объемных наноструктурных керамических композиционных материалах $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{--}t\text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ при концентрации упрочняющих частиц до 30 об. % при интенсивных динамических воздействиях.

5. В результате проведенных численных исследований с использованием разработанных моделей и алгоритмов впервые получены теоретические данные о пределах упругости Гюгонио прочности нанокомпозитов $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{--}t\text{ ZrO}_2$, $\text{ZrB}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ в диапазоне изменения концентрации упрочняющих частиц до 30 об. %.

6. В результате компьютерного моделирования установлено, что нанокомпозиты $\text{ZrB}_2\text{--B}_4\text{C}$, $\text{ZrB}_2\text{--}t\text{ ZrO}_2$ при воздействии ударных импульсов с амплитудами, превышающим макроскопический предел упругости, разрушаются квазихрупко. Динамическая трещиностойкость нанокомпозитов повышается с ростом скорости деформации. Величина динамической трещиностойкости нанокомпозитов снижается с ростом концентрации кластеров упрочняющих частиц.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 12 печатных работах, включая 4 статьи в журналах из перечня ВАК РФ [113-122].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Милейко С.Т. Композиты и наноструктуры // Композиты и наноструктуры, 2009. - N 1. –С. 6-36.
2. Лукин Е.С., Макаров Н.А., Козлов А.И. и др. Современная оксидная керамика и области ее применения // Конструкции из композиционные материалов. -2007. - №1. -С.3-13.
3. Лякишев Н.П., Алымов М.И. Наноматериалы конструкционного назначения //Российские Нанотехнологии. –2006. –Т. I, № 1. –С. 71-81.
4. Quaresimin, M., Salviato, M., and Zappalorto, M. Strategies for the assessment of nanocomposite mechanical properties Composites: Part B. 2012. Vol. 43, pp. 2290–2297.
5. 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. – С. 27–54.
6. Коноваленко И.С., Смолин А.Ю., Псахье С.Г. Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов. // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12. – № 5. –с. 29-36.
7. Skripnyak V.A., Skripnyak E.G., and Skripnyak V.V. Fracture of nanoceramics with porous structure at shock wave loadings // Proc. Shock Compression of Condensed Matter. AIP Conf. Proc. 2012. Vol. 1426. - pp. 1157 – 1160.
8. Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.А., Кульков С.С., Коробенков М.В., Скрипняк В.В. Моделирование механического поведения керамических композитов с трансформационно-упрочненной матрицей при динамических воздействиях//Вестник Томского государственного университета, 2010, N2 (10). С. 94-101.

9. Смолин А.Ю., Роман Н.В. Моделирование деформации и разрушения материалов на основе совмещенного дискретно-континуального подхода // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского.– 2011.– № 4 (2).– С. 535–537.
10. Коноваленко Иг.С., Смолин А.Ю., Кульков С.Н., Буякова С.П., Псахье С.Г. Развитие многоуровневого подхода к моделированию хрупких сред с иерархической поровой структурой в рамках метода подвижных клеточных автоматов // Известия вузов. Физика. – 2011. – №11/3. – С. 20–24.
11. Bonora N., Ruggiero A. Micromechanical modeling of composites with mechanical interface – Part 1: Unit cell model development and manufacturing process effects // Composites Science and Technology. – 2006. – V. 66 – P. 314–322.
12. Bonora N., Ruggiero A. Micromechanical modeling of composites with mechanical interface – Part II: Damage mechanics assessment // Composites Science and Technology. - 2006. –V. 66. –P. 323–332.
13. Clayton J.D., Kraft R.H., Leavy R.B. Mesoscale modeling of nonlinear elasticity and fracture in [ceramic polycrystal under dynamic shear and compression] // Int. J. of Solids and Structures, 2012. - V. 49. – P. 2686-2702.
14. Давыдова М.М., Уваров С.В., Наймарк О.Б. Масштабная инвариантность при динамической фрагментации кварца. // Физическая мезомеханика. – 2013. – №4. – С. 129-136.
15. Пантелеев И.А., Плехов О.А., Наймарк О.Б. Некоторые автомодельные закономерности развития поврежденности при квазихрупком разрушении твёрдых тел//Вычислительная механика сплошных сред. - 2011. - Т.4, №1. - С. 90-100.
16. Панин В.Е., Панин А.В.. Масштабные уровни пластической деформации и разрушения наноструктурных материалов // Нанотехника.- 2005.- Т. 3.- С. 28-42.
17. Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах / отв. ред. В. Е. Панин ; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т физики

прочности и материаловедения. - Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2006. - 520 с. - (Интеграционные проекты СО РАН; вып. 8).

18. Панин В.Е., Гриняев Ю.В. Физическая мезомеханика - новая парадигма на стыке физики и механики деформируемого твердого тела // Физ. мезомех. - 2003. - Т. 6. - № 4. - С. 9-36.

19. Balokhonov R.R., Romanova V.A., Schmauder S. Computational analysis of deformation and fracture in a composite material on the mesoscale level // Computational Materials Science. - 2006. - V.37. - P. 110-118.

20. Балохонов Р.Р. Иерархическое моделирование неоднородной деформации и разрушения материалов композиционной структуры // Физическая мезомеханика. - 2005. - Т.8. - №3. - С. 107-128.

21. Нелинейная механика геоматериалов и геосред / Отв. ред. Л.Б. Зуев ; Рос. акад. наук, Сиб. отделение, Ин-т физики прочности и материаловедения; ООО "Горный-ЦОТ". – Новосибирск: Академическое изд-во "Гео", 2007. – 235 с.

22. Ревуженко А.Ф., Клишин С.В. Линии тока энергии в деформируемом горном массиве, ослабленном эллиптическими отверстиями // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых. – №3. – май-июнь 2009 г. – С.3-8.

23. Клишин С.В., Ревуженко А.Ф. Задача о формировании системы параллельных трещин в хрупком слое // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых. – № 2. – 2001 г. – С.58-68.

24. Клишин С.В., Лавриков С.В., Ревуженко А.Ф. Численное моделирование выпуска раздробленного материала методами дискретных элементов и клеточных автоматов. В кн.: «Геодинамика и напряженное состояние недр Земли». Труды XX Всероссийской научной конференции, Новосибирск, 07-11 октября 2013, с. 208-215.

25. Ghosh S., Nowak Z., Lee K. Tessellation-based computational methods for the characterization and analysis of heterogeneous microstructures. // Composite Sci. Technol. – 1997. – №57. – p. 1187–1210.

26. Zavattieri P. D., Raghuram P. V., Espinosa H. D. A computational model of ceramic microstructures subjected to multi-axial dynamic loading // *J. Mech. and Phys. Solids*. – 2001. – V. 49. – P. 27-68.

27. Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.А., Скрипняк В.В., Козулин А.А. Сопротивление разрушению композиционных керамических материалов с трансформационно-упрочненной матрицей при динамических воздействиях // *Известия вузов. Физика*. – 2010. – №12/2. – С. 103-108.

28. Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Пасько Е.Г., Коробенков М.В., Скрипняк В.В., Козулин А.А. Влияние поровой структуры хрупкой керамики на разрушение при динамическом нагружении // *Известия ТПУ. Математика и механика. Физика*. – 2009. – Т. 315. – № 2. – С. 113 – 117.

29. Шилько С.В., Черноус Д.Ф., Панин С.В. Анализ механического поведения дисперсно-армированного композита. Оценка локальной прочности включения, межфазного слоя и приграничного слоя матрицы // *Физическая мезомеханика*. 2011. Т. 14. № 1. С. 67-73.

30. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. – М.: «Янус-К», 1996. – 408 с.

31. Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Жукова Т.В. Повреждаемость керамических покрытий и конструкционной керамики при интенсивном импульсном нагружении // *Хим. Физика*, 2002, том. 21, №9, – С. 76 – 82.

32. Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Жукова Т.В. Механическое поведение нанокристаллической керамики на основе оксидов металлов при интенсивных импульсных воздействиях/ В сб.: *Прикладная синергетика, фракталы и компьютерное моделирование структур*. Томск: Изд-во физмат лит. 2002. – С. 330 – 342.

33. Hannink R. H. J., Kelly P.M. Muddle B. C. Transformation toughening in zirconia-containing ceramics// *J. Am. Ceram. Soc.* – 2000. – Vol. 83. – P. 461–487.

34. Bakshi S. D., Basu B., Mishra S. K. Microstructure and mechanical properties of sinter-HIPed ZrO_2 – ZrB_2 composites // *Composites: Part A*. – 2006. – V. 37. – P. 2128–2135.

35. Choi S. R., Bansal N. P. Mechanical behavior of zirconia/alumina composites // Ceramics International. – 2005. – Vol. 31. – P. 39-46.
36. Basu B., Vleugels J., Van der Biest O. Processing and mechanical properties of $\text{ZrO}_2\text{-TiB}_2$ composites // Journal of the European Ceramic Society. -2005. –V. 25. – P. 3629–3637.
37. Basu B., Vleugels J., Van der Biest O. $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ composites with tailored toughness // Journal of Alloys and Compounds. -2004. –V. 372. –P. 278–284.
38. Li B., Deng J., Li Y. Oxidation behavior and mechanical properties degradation of hot-pressed $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrB}_2/\text{ZrO}_2$ ceramic composites // Int. Journal of Refractory Metals & Hard Materials. 2009. Vol. 27. –pp. 747–753
39. Casellas D., Nagl M. M., Llanes L., Anglada M. Fracture toughness of alumina and ZTA ceramics: microstructural coarsening effects // Journal of Materials Processing Technology. – 2003. – Vol. 143-144. – P. 148-152.
40. Szutkowska M. Fracture resistance behavior of alumina-zirconia composites// Journal of material processing technology. 2004. –Vol. 153-154. –P. 868-874.
41. Cesari F., Esposito L., Furguele F.M., Maletta C., Tucci A. Fracture toughness of alumina–zirconia composites // Ceramics International. – 2006. – V. 32. – P. 249–255.
42. Tuan W.H., Chen R.Z., Wang T.C., et. al. Mechanical properties of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$ composites // Journal of the European Ceramic Society. – 2002. –V. 22. – P. 2827–2833.
43. Rao P.G., Iwasa M., Tanaka T., et al. Preparation and mechanical properties of $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-15wt.\% ZrO}_2$ composites // Scripta Materialia 2003. –V. 48. –P. 437–441.
44. Guimaraes F. A. T., Silva K. L., Trombini V., et. al. Correlation between microstructure and mechanical properties of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$ nanocomposites // Ceramics International. – 2009. – Vol. 35. – P. 741-745.
45. Халтурин В.Г., Кульметьева В.Б., Климов Л.А. Нанокристаллическая керамика системы $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3$, полученная из ультрадисперсных порошков, синтезированных методом лазерного испарения мишени // Вестник ПГТУ.

Проблемы современных материалов и технологий: [Сб. науч. тр.] / ПГТУ. – Пермь, 1997. С.194-202.

46. Pabst W., Ticha G., Gregorova E., Tynova E. Effective elastic properties of alumina-zirconia composite ceramics part 5. Tensile modulus of alumina–zirconia composite ceramics // *Ceramics – Silikaty*. 2005. Vol. 49. N.2, -pp.77-85.

47. Huang S.G., Vanmeensel K., Vleugels J. Powder synthesis and densification of ultrafine B_4C - ZrB_2 composite by pulsed electrical current sintering // *J. of the European Ceram. Soc.* 2014. Vol. 34, pp. 1923-1933.

48. Shu-Qi Guo Densification of ZrB_2 -based composites and their mechanical and physical properties: A review. // *Journal of the European Ceramic Society*. -2009. –Vol. 29. –P. 995–1011.

49. Teng Yu., Sun Zh., Zhang K., Lu W. Microstructure and mechanical properties of high-pressure sintered Al_2O_3/SiC nanocomposites. *J. of Alloys and Comp.* 2013. Vol. 578, pp. 67-71.

50. Johnson G. R., and Holmquist T. J. Response of boron carbide subject to large strains, high high strain rates, and high pressures // *J. Appl Phys.* 1999; Vol. 85, pp.8060–8073

51. Коротаев А.Д., Мошков В.Ю., Овчинников С.В. и др. Наноструктурные и нанокомпозитные свехтвердые покрытия // *Физическая мезомеханика*. 2005. Т. 8. № 5. С. 103-116.

52. Tomar, V. Analyses of the role of grain boundaries in mesoscale dynamic fracture resistance of SiC – Si_3N_4 intergranular nanocomposites// *Engng Fract. Mech.* 2008. Vol. 75, pp. 4501-4512.

53. Mantena, P.R., Al-Ostaz, A., and Cheng, A.H.D. Dynamic response and simulations of nanoparticle-enhanced composites *Composites Sci. and Tech.* 2009. Vol. 69, pp. 772-779.

54. Hasheminejad, S. M., and Avazmohammadi, R. Size-dependent effective dynamic properties of unidirectional nanocomposites with interface energy effects // *Composites Sci. and Tech.* 2009. Vol. 69, pp. 2538-2546.

55. Zhu T., Li W., Zhang X., et al Damage tolerance and R-curve behavior of $\text{ZrB}_2\text{--ZrO}_2$ composites // Materials Science and Engineering. 2009. Vol. A 516, pp. 297–301.

56. Cheng M., Chen W. Measurement and determination of dynamic biaxial flexural strength of thin ceramic substrates under high stress-rate loading // International Journal of Mechanical Sciences. – 2005. –Vol. 47. –P. 1212–1223.

57. Разоренов С.В., Каннель Г.И., Савиных А.С., Скрипняк В.А., Кульков С.Н. Деформирование и разрушение нанокристаллических образцов ZrO_2 и Al_2O_3 в ударных волнах / Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики. – Томск: Изд-во Том. Ун-та. – 2002. –С. 182-186.

58. Woodward R.L., Gooch W.A., O'Donnell Jr. R.G., et. all. A study of fragmentation in the ballistic impact of ceramics // Int. J. of Impact Eng. 1994. Vol. 15. N. 5, - pp. 605-618.

59. Gust, W. H. , and Royce, E. B. Dynamic yield strengths of B_4C , BeO , and Al_2O_3 ceramics. J. Appl. Phys. 1971. Vol. 42, -pp. 276–295.

60. Бакунов В.С. , Беляков А.В. Перспективы повышения воспроизводимости структуры и свойств керамики // Огнеупоры и техническая керамика. 1998. №2. Сю 16-21.

61. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. М.: Металлургия, 1976. - 270 с.

62. Maznoy A.S. On the methods for studying porosity of SHS materials//Pro. of the 16th Int. Sci. and Pract. Conf. of Students, Post-graduates and Young Scientists “Modern technique and technologies MTT’2010”April 12-16, 2010 Tomsk, Russia, p.55-57.

63. Степанов И.А., Скрипняк В.А., Андриец С.П. и др. Исследование закономерностей уплотнения наноструктурной керамики на основе диборида циркония при горячем прессовании//Ядерная физика и инжиниринг. 2011. Т. 2. № 3. - С. 1-16.

64. Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Ваганова И.К., Янюшкин А.С., Скрипняк В.В., Лобанов Д.В. Механические свойства наноструктурной керамики на основе

диборида циркония// Известия высших учебных заведений. Физика. 2012. Т. 55. № 7/2. -С. 119-123.

65. Grady, D.E. and Kipp, M.E.: Geometric statistics and dynamic fragmentation// Journal of Applied Physics, 1985. -Vol. 58, No. 3, -pp. 1210-1222.

66. Hutchinson J.W. Mechanism of toughening in ceramics // Theoretical and applied mechanics. North-Holland: Elsiever Press. IUTAM. 1989, -pp. 139-144.

67. Рахматуллин Х., Шемякин Е., Демьянов Ю., Звягин А. Прочность и разрушение при кратковременных нагрузках. М.: Университетская книга. 2008. -624 с.

68. Medina D.F., Chen J.K. Three-dimensional simulations of impact induced damage in composite structures using the parallelized SPH method // Composites: Part A. – 2000. –V. 31, -pp. 853–860.

69. Monaghan J. J. SPH without a Tensile Instability// J. of Computational Physics 2000. – V. 159, -pp. 290–311.

70. Герасимов А.В., Черепанов Р.О. Применение метода гладких частиц для решения задач соударения твердых тел. Томск. Изд-во ПАПА. 2010. -154 с.

71. ANSYS AUTODYN Explicit software for nonlinear dynamics. Theory manual [Электронный ресурс]. – режим доступа: <http://www.autodyn.org>. – 29.06.2009.

72. Parshikov A.N., Medin S.A., Loukashenko I.I., and Milekhin V.A. Improvements in SPH Method by means of interparticle contact algorithm and analysis of perforation tests at moderate projectile velocities // Int. J. Impact Eng. 2000. Vol. 24, -pp. 779-796.

73. Parshikov A.N., Medin S.A. Smoothed particle hydrodynamics using interparticle interparticle contact algorithms // J. Comp. Phys. 2002. Vol. 180, -pp. 358-382.

74. Clayton J.D., McDowell D.L. Finite polycrystalline elastoplasticity and damage: multiscale kinematics International //Journal of Solids and Structures. 2003. Vol. 40. –pp. 5669–5688.

75. Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications Overview No. 149// *Acta Materialia*. 2010. Vol. 58. –pp. 1152–1211.
76. Hill R. Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1963. Vol. 11. N.5. –pp. 357–372. doi:10.1016/0022-5096(63)90036-x.
77. Ohtaka O., Fukui H., Kunisada T., Fujisawa T. Phase relations and equations of state of ZrO_2 under high temperature and high pressure// *Phys. Rev. B*. -2001. –Vol. 63. –P. 174-178.
78. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. –336 с.
79. Селиванов В.В. Механика разрушения деформируемого тела: Прикладная механика сплошных сред. Том 2. Учебник для вузов. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1999. - 420 с.
80. Holmquist T.J., Johnson G.R. Response of silicon carbide to high velocity impact// *J. Appl Phys*. 2002. –V. 91. –P. 5858–66.
81. Johnson, G.R. and Holmquist, T.J., 1994: An Improved Computational Constitutive Model for Brittle Materials, *High Pressure Science and Technology-1993*, AIP Press, New York, 981-984 p.
82. Cronin D. S., Bui K., Kaufman C. Implementation and Validation of the Johnson-Holmquist Ceramic Material Model in LS-Dyna // 4th European LS-DYNA Users conference. – D-I-47-60, Ulm, Germany.
83. Рихтмайер Р., Мартон К. Разностные методы решения краевых задач. – М.: Мир. – 1972. – 420 с.
84. Уилкинс М.Л. Вычислительные методы в гидродинамике. – М.: Мир. – 1967.
85. Паршиков А.Н. Метод SPH на основе решения задачи Римана / Препр. ИВТАН № 2-414. Москва, 1998. 18с.

86. Паршиков А.Н. Применение решения задачи Римана в методе частиц // ЖВМ и МФ. 1999. т.39. №7. С. 1216-1225.
87. Parshikov A.N., Medin S.A., Loukashenko I.I., Milekhin V.A., Improvements in SPH Method by means of Interparticle Contact Algorithm and Analysis of Perforation Tests at Moderate Projectile Velocities // Int. J. Impact Eng. V.24. 2000. P.779.
88. Parshikov A.N., Medin S.A. Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Interparticle Contact Algorithms // J. Comp. Phys. 2002. V.180. P. 358-382.
89. Паршиков А.Н., Медин С.А. Применение решений распада разрывов в методе SPH // Математическое моделирование: проблемы и результаты / Под ред. О.М. Белоцерковского и В.А. Гущина – М.: Наука, 2003. С.320-358.
90. Медин С.А., Паршиков А.Н., Развитие метода SPH и его применение в задачах гидродинамики конденсированных сред // ТВТ. 2010. Т.48. № 6. С. 973-980.
91. Герасимов А.В., Черепанов Р.О. Разработка алгоритма расчета условий на свободной и контактной границах для моделирования деформирования материалов методом SPH // Физическая мезомеханика. 2010. Т.13. № 2. С.69-75.
92. Workbench ANSYS Autodyn, ANSYS Inc. Release 13.0, 2010. [Электронный ресурс] URL: http://hpclab.iitgn.ac.in/doc/wb2_help.pdf . (Дата обращения: 18.02.2012).
93. Пасько Е.Г. Численное моделирование процессов деформации и разрушения сред с поровыми структурами при динамических нагрузках. : дис. канд. физ. мат. наук : 01.02.04 / ТГУ. – Томск, 2012. – 116 с.
94. Коробенков М. В. Моделирование процессов деформации, повреждения и разрушения хрупких гетерогенных сред при динамических нагрузках.: дис. канд. физ. мат. наук : 01.02.04 / ТГУ. – Томск, 2012. – 127 с.
95. Dorre E. , Hubner H. Alumina. Properties, Processing, and Application. 1984. Berlin. N.-Y. - 329 p.

96. Kelly J. R., Denry I. Stabilized zirconia as a structural ceramic: An overview // *Dental materials*. – 2008. Vol. 24, –pp. 289–298.
97. Gust W. H., and Royce E. B. Dynamic yield strengths of B_4C , BeO , and Al_2O_3 ceramics// *J. Appl. Phys.* 1971. Vol. 42, -pp. 276–295.
98. Разоренов С.В., Канель Г.И., Савиных А.С., Скрипняк В.А., Кульков С.Н. Деформирование и разрушение нанокерамических образцов ZrO_2 и Al_2O_3 в ударных волнах // *Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики*. – Томск. – 2002. – С. 182 – 186.
99. Канель. Г.И., Разоренов. С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Экспериментальные профили ударных волн в конденсированных средах. – М: Физматлит. – 2008. – 248 с.
100. Кульков С.Н., Скрипняк В.А., Е.Г. Скрипняк, С.П. Буякова Механические свойства поликристаллических объёмных нанокристаллических керамических материалов на основе оксида алюминия и диоксида циркония в кн. Синтез и свойства нанокристаллических и субмикроструктурных материалов. Под ред. А.Д. Коротаева. – Томск: Изд-во Том. Ун-та. –2007. –С. 232–328.
101. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. - 1996. -М., Янус-К”. -402 с.
102. Gust W. H., Holt A. C., and Royce E. B. Dynamic yield, compressional, and elastic parameters for several lightweight intermetallic compounds // *J. Appl. Phys.* 1973. Vol. 44, - pp. 550–560.
103. Batsanov, S.S. Effects of explosions on materials: Modification and synthesis under high-pressure shock compression. Springer, 1994.
104. Физические величины: Справочник/А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. - М., Энергоатомиздат, 1991. - 1232 С.
105. Fried L.E., Howard W.M., Souers P.C. A new equation of state library for high pressure thermochemistry [Электронный ресурс] URL: [http://www.intdetsymp.org/detsymp2002/ Paper Submit/Final Manuscript/pdf/Fried-228.pdf](http://www.intdetsymp.org/detsymp2002/Paper%20Submit/Final%20Manuscript/pdf/Fried-228.pdf). (Дата обращения: 18.02.2012).

106. Gong J., Miao H., Zhao Z. The influence of TiC-particle-size on the fracture toughness of Al_2O_3 –30 wt.% TiC composites// Journal of the European Ceramic Society. 2001. Vol. 21, -pp. 2377-2381 .

107. Mechanical Benavente R., Salvador M.D., Penaranda-Foix F.L., et al. properties and microstructural evolution of alumina–zirconia nanocomposites by microwave sintering//Ceramics International. 2014. Vol. 40, Part B, -pp. 11291-11297

108. Nayak P. K., Lin H.-T., Chang M.-P., et al. Microstructure analysis and mechanical properties of a new class of Al_2O_3 –WC nanocomposites fabricated by spark plasma sintering // Journal of the European Ceramic Society. 2013. Vol. 33, -pp. 3095-3100.

109. Li Y., Zhang Z., Vogt R., et al. Boundaries and interfaces in ultrafine grain composites //Acta Materialia. 2011. Vol. 59, -pp 7206-7218.

110. Benedetti I., Aliabadi M.H. A three-dimensional cohesive-frictional grain-boundary micromechanical model for intergranular degradation and failure in polycrystalline materials//Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2013. Vol. 265, -pp. 36-62.

111. Kimberley J. K., Ramesh T., Daphalapurkar N.P. A scaling law for the dynamic strength of brittle solids // Acta Materialia. 2013. Vol. 61 , -pp. 3509–3521.

112. Curran D.R., Seaman L. Simplified models of fracture and fragmentation. / In: Davison L, Grady DE, Shahinpoor M, editors. High-pressure shock compression of solids II – dynamic fracture and fragmentation. – Berlin: Springer. – 1996. - P. 340–65.

113. Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Ваганова И.К., Янюшкин а.с., Скрипняк в.в., Лобанов Д.В. Механические свойства наноструктурной керамики на основе диборида циркония // Известия Вузов Физика 2010, – Т. 55. № 7/2 . - С. 119-123.

114. Skripnyak V.A., Skripnyak E.G., Vaganova I.K., Skripnyak V.V. Modeling of processes of deformation and fracture of brittle heterogeneous materials, taking into account dependence of the mechanical response on strain rate //Proc. Int. Conf. Shock Waves In Condensed Matter. Kiev, Ukraine, 16-21 September, 2012. P. 284- 287.

115. Ваганова И.К., Скрипняк В.В., Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г. Моделирование процессов разрушения керамических нанокompозитов при высокоэнергетических воздействиях // Известия вузов Физика. 2013. Т. 56. №7/3. -С.23-25

116. Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.В., Ваганова И.К., Скрипняк В.А. Самоорганизация микроповреждений хрупких гетерогенных сред в условиях интенсивных динамических воздействий // Известия вузов Физика. 2013. Т. 56. №7/3. -С.86-88.

117. Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.В., Ваганова И.К. Многоуровневое моделирование процессов деформации и разрушения структурированных твердых тел. проблема определения представительного объема для динамических условий нагружения // Известия вузов Физика. 2013. Т. 56. №7/3. -С.80-82.

118. Skripnyak E. G., Skripnyak N. V., Skripnyak V. A., Skripnyak V. V., Vaganova I. K. Multiscale computational model for simulation of mechanical behavior of heterogeneous brittle ceramics under dynamic loading // Zbornik radova konferencije MIT-2013. Beograd. 2013. p. 661-670. (www.mit.rs/2013/zbornik-2013.pdf)

119. Skripnyak E.G., Skripnyak V.V., Skripnyak V.A., and Vaganova I.K. Fracture of Ceramic Materials under Dynamic Loadings // Proc. 19th European Conference on Fracture (ECF19) Kazan , Russia, 26 - 31 August, 2012. 639-proceeding.

120. Skripnyak V.A., Skripnyak E.G., Skripnyak N.V., Vaganova I.K., Skripnyak V.V. Computer simulation of fracture quasi-brittle ceramic nanocomposites under pulse loading // Proc. World Congress on Computational Mechanics (WCCM2014) 5th. European Conference on Computational Mechanics (ECCM V) 6th. European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD VI) July 20 - 25, 2014, Barcelona, Spain. P. 3904-3914.

121. Скрипняк Е.Г. , Чахлов С.В., Ваганова И.К., Скрипняк В.В., Скрипняк В.А. Многоуровневое моделирование процессов деформации и разрушения в

структурированных конденсированных системах (тезисы) XVIII Зимняя школа по механике сплошных сред. Пермь. 18-22 февраля 2013 г. Тезисы докладов. Пермь. - Екатеринбург, 2013. С. 311.

122. Skripnyak V. A., Skripnyak E.G., Skripnyak V.V., and Vaganova I.K. Development of multiscale approach for deformation and fracture simulation of structured condensed systems // Тезисы. Международной конференции XV Харитоновские тематические научные чтения. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. 18 марта – 22 марта 2013г. г. Саров, Россия, 2013.