НАУКА и ОБРАЗОВАНИЕ

Эл № ФС77 - 48211. Государственная регистрация №0421200025. ISSN 1994-0408

электронный научно-технический журнал

Моделирование микроструктурного разрушения и прочности керамических композитов на основе реакционно-связанного SiC

11, ноябрь 2013 DOI: 10.7463/1113.0659438 Димитриенко Ю. И., Сборщиков С. В., Беленовская Ю. В., Анискович В. А., Перевислов С. Н. УДК 539.3

> Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана ОАО «Центральный научно-исследовательский институт специального машиностроения», Центр высокопрочных материалов «Армоком», МО, РФ ОАО "Центральный научно-исследовательский институт материаловедения",

> > Санкт-Петербург, РФ dimit.bmstu@gmail.com servasbor@gmail.com belenovskaya@yandex.ru sekr_armocom@mail.ru perevislov@mail.ru

Введение

Композиционные материалы на основе матрицы из реакционно-связанного карбида кремния (КРСК) и дисперсного SiC наполнителя являются перспективными материалами для создания ударопрочных защитных систем благодаря их высокой прочности, жесткости, энергии разрушения, а также благодаря относительно низкой стоимости. Однако характеристики этих материалов существенно зависят от технологических режимов изготовления композитов и от рецептурного содержания составляющих их компонентов. Для выбора оптимального содержания компонентов керамических композитов системы SiC/SiC необходима специализированная математическая модель, которая позволила бы прогнозировать прочностные свойства композитов при изменении содержания, формы и дисперсности наполнителя. Существующие в настоящее модели композиционных материалов, армированных частицами, как аналитические, так и численные [1, 2] позволяют с определенной степенью точности прогнозировать упругие свойства композитов, однако численный расчет прочностных характеристик композитов представляет собой существенно более сложную проблему, поскольку он связан с необходимостью построения

адекватных моделей распространения микротрещин в гетерогенных структурах. Попытки построить такие адекватные модели простым сгущением конечноэлементных сеток в имеют мало успехов, поскольку при этом резко возрастает эффект решения. нефизической сингулярности Широко известные коммерческие программные пакеты [3] в настоящее время также не всегда позволяют получать адекватные результаты моделирования микроразрушения композитов. В настоящей работе, которая продолжает цикл исследований [4-9] по созданию моделей и численных методов моделирования процессов микроразрушения композитов, предложена новая - 3-х уровневая модель прочности керамических композитов на основе КРСК, позволяющая описать эффект повышения прочности композита при изменении содержания частиц SiC. Модель создана с использованием метода многоуровневой гомогенизации [4]. который позволяет моделировать микроструктурные процессы деформирования и разрушения композиционных материалов со сложными микроструктурами.

Микроструктура реакционно-спеченного карбидокремниевых композитов

Композиты на основе реакционно-связанного карбида кремния состоят из наполнителя – порошков карбида кремния различных фракций и карбидо-кремниевой матрицы, синтезируемой в результате химических реакций жидкого кремния, сажи и твердого углерода, который образуется в процессе пиролиза фенолформальдегидной смолы [9-14]. Форма наполнителя – частиц карбида кремния, как правило, осколочная, она обычно имеет случайный характер и сильно различается по фракциям. Обычно можно выделить крупные фракции размером 20-100 мкм и мелкие – размером 1-10 мкм.

Фотографии реальной микроструктуры КРСК показаны на рис. 1.





Рис. 1. Микроструктура материала с исходным зерном карбида кремния 28 мкм.

Композит КРСК рассмотрим как трёхуровневую структуру [4, 5, 15-18], 1-й уровень которой образован ячейками периодичности 1 (ЯП1), состоящими из наполнителя крупной фракции и матрицы m₁. Матрица m₁ образована ячейками периодичности 2-го уровня (ЯП2), каждая из них состоит из частиц наполнителя мелкой фракции и реакционно-спеченной карбидо-кремниевой матрицы т₂. В свою очередь матрица m_2 содержит дефекты (повышенное содержание растворенных, но непрореагировавших компонент С и Si, межзеренные области с нарушенными химико-механическими связями, микротрещины из-за технологических напряжений и, главным образом, поры), поэтому введем 3-й структурный уровень, образованный ячейками периодичности ЯПЗ. Каждая ЯПЗ образована бездефектной карбидокремниевой матрицей m₃ и непосредственно дефектом.

Согласно методу многоуровневой гомогенизации (МГ) [7] все структурные уровни 1, 2 и 3 можно рассматривать независимо – сначала вычислить эффективные упругие и прочностные характеристики нижнего 3-го уровня, затем – эффективные характеристики 2-го уровня, полагая матрицу m₂ гомогенным материалом, обладающим эффективными характеристиками 2-го уровня, далее рассчитать характеристики 1-го верхнего уровня.



Рис.2 Модель трехуровневой структуры карбидокремниевой керамики КРСК

Математическая постановка локальных задач теории упругости

Рассмотрим ЯП2 V_{ξ} , образованную матрицей m₂ и мелкодисперсным наполнителем. Полагаем, что ЯП2 имеет симметрию относительно всех 3-х координатных плоскостей и вместо полной ЯП можно рассматривать ее 1/8 часть \tilde{V}_{ξ} . Эта область \tilde{V}_{ξ} состоит из N компонентов: N-1 штук дисперсных частиц мелкодисперсного наполнителя $\tilde{V}_{\xi\alpha}$, $\alpha = 1...N-1$, расположенных определенным

образом, и связывающей их матрицы m₂ (компонента с номером N). Для расчета микронапряжений в ЯП2 \tilde{V}_{ξ} , согласно методу МГ [18-22], сформулируем серию так называемых локальных задач L_{pq} теории упругости на 1/8 части ЯП \tilde{V}_{ξ} :

$$\begin{cases} \sigma_{ij(pq)/j} = 0, \ \ \delta \ \ \tilde{V}_{\xi}, \\ \sigma_{ij(pq)} = C_{ijkl}(\xi_s, z) \varepsilon_{kl(pq)}, \ \ \delta \ \ \tilde{V}_{\xi} \cup \Sigma'_s \cup \Sigma_s, \\ \varepsilon_{ij(pq)} = \frac{1}{2} \left(U_{i(pq)/j} + U_{j(pq)/i} \right), \ \ \delta \ \ \tilde{V}_{\xi}, \\ [U_{i(pq)}] = 0, \quad [\sigma_{ij(pq)}] n_j = 0, \quad \text{Ha} \ \ \ \tilde{\Sigma}_{\xi\alpha N}, \end{cases}$$
(1)

где р, q – индексы локальных задач, изменяющиеся в пределах от 1 до 3 (всего имеется 9 различных задач L_{pq}), $U_{i(pq)}(\xi_s)$ – компоненты векторов перемещений (искомые неизвестные функции задачи) в задаче L_{pq} , $\sigma_{ij(pq)}$, $\varepsilon_{kl(pq)}$ – компоненты тензоров напряжений и деформаций в \tilde{V}_{ξ} , ξ_s – «локальные» безразмерные декартовы координаты в 1/8 ЯП, значения которых изменяются на отрезке $0 \le \xi_s \le 0.5$, операторы дифференцирования по локальным координатам обозначены так: ${}_{ii} = \partial/\partial \xi_i$, $[U_{i(pq)}]$ – скачки функций на поверхностях раздела $\tilde{\Sigma}_{\xi aN}$ компонентов ЯП2, $C_{ijkl}(\xi_s, z)$ – компоненты тензоров модулей упругости структурных компонентов ЯП2 (их различие для разных компонентов, выражения для которого будут представлены далее.

Система (1) в методе МГ дополняется специальными граничными условиями на торцевых поверхностях $\Sigma'_{s} = \{\xi_{s} = 0.5\}$ 1/8 ЯП [11]:

$$\begin{split} & \mu a \ \Sigma_{i}': \ U_{i(pp)} = \frac{1}{2} \overline{\varepsilon}_{pp} \delta_{ip}, \ U_{j(pp)/i} = 0, \ U_{k(pp)/i} = 0, \ i \neq j \neq k \neq i , \\ & \mu a \ \Sigma_{j}': \ U_{i(pq)} = \frac{1}{4} \overline{\varepsilon}_{pq} \delta_{ip}, \ U_{j(pq)/j} = 0, \ U_{k(pq)} = 0, \ i, j = \{p, q\}, \\ & \mu a \ \Sigma_{k}': \ U_{i(pq)/k} = 0, \ U_{j(pq)/k} = 0, \ U_{k(pq)} = 0, \ i \neq j \neq k \neq i, \ p \neq q , \end{split}$$

где $\overline{\varepsilon}_{pq}$ – заданные компоненты осредненного тензора деформации, являющиеся входными данными для задачи L_{pq} . Граничные условия на плоскостях симметрии $\Sigma_s = \{\xi_s = 0\}$ имеют вид аналогичный соотношениям (2), в которых следует положить $\overline{\varepsilon}_{pq} = 0$.

Эффективные упругие характеристики ЯП2

Для определения компонент тензора эффективных модулей упругости гомогенизированного материала, соответствующего ЯП2 (это матрица m₁ в 3-х уровневой структуре КРСК), \overline{C}_{ijpq} , связывающего осредненные по ЯП2 напряжения $\overline{\sigma}_{ii}$ и деформации $\overline{\varepsilon}_{kl}$ композита

$$\overline{\sigma}_{ij} = \overline{C}_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{kl},\tag{3}$$

используем решение серий локальных задач L_{pq} (1),(2) – поля перемещений $U_{i(pq)}$ и напряжений $\sigma_{ij(pq)}(\xi_s)$ в ЯП2 при заданных значениях средних деформаций $\overline{\epsilon}_{kl}$. По этим полям находим средние напряжения в ЯП

$$<\sigma_{ij}>=\sum_{p,q}^{3}\overline{\sigma}_{ij(pq)}, \, \text{где } \overline{\sigma}_{ij(pq)}=\left\langle\sigma_{ij(pq)}\right\rangle=\int_{V_{\xi}}\sigma_{ij(pq)}(\xi_{k})dV_{\xi}, \quad (4)$$

тогда компоненты тензора эффективных модулей упругости композита вычисляются по формулам

$$\overline{C}_{ijpq} = \frac{\overline{\sigma}_{ij(pq)}}{\overline{\varepsilon}_{pq}},$$
(5)

где по *p* и *q* суммирования нет. После расчета компонент тензора модулей упругости \overline{C}_{ijpq} рассчитывается тензор эффективных упругих податливостей $\overline{\Pi}_{ijpq}$, являющийся обратным к \overline{C}_{ijpq} , и технические упругие константы композита: $E_{\alpha} = 1/\overline{\Pi}_{\alpha\alpha\alpha\alpha}$ – эффективные модули Юнга; $v_{\alpha\beta} = -\overline{\Pi}_{\alpha\alpha\beta\beta}E_{\alpha}$ – эффективные коэффициенты Пуассона; $G_{\alpha\beta} = \overline{C}_{\alpha\beta\alpha\beta}$ – эффективные модули сдвига.

Компоненты тензоров концентраций напряжений $B_{ijkl}^{(\alpha)}$ связывают микронапряжения $\sigma_{ij}^{(\alpha)}(\xi_k) = \sum_{p,q}^{3} \sigma_{ij(pq)}(\xi_k)$ в матрице и в наполнителе (мелкодисперсных частицах SiC) со средними напряжениями $\overline{\sigma}_{kl}$ в ЯП2 по следующим формулам:

$$\sigma_{ij}^{(\alpha)}(\xi_k) = B_{ijkl}^{(\alpha)}(\xi_k)\overline{\sigma}_{kl}, \qquad \xi_k \in \tilde{V}_{\xi\alpha}, \qquad \alpha = 1...N.$$
(6)

Сами компоненты $B_{ijkl}^{(\alpha)}$ в матрице и в частицах вычисляются по формулам

$$B_{ijkl}^{(\alpha)}(\xi_k) = \sigma_{ij(pq)}(\xi_s)\overline{\Pi}_{pqkl}, \qquad \xi_s \in \tilde{V}_{\xi\alpha}, \qquad \alpha = 1...N.$$
(7)

где $\sigma_{ij(kl)}$ - решение задачи L_{pq} (1),(2).

Модель прочностных характеристик компонентов

Введем параметр повреждаемости изотропной матрицы m₂ и частиц наполнителя, который имеет следующий вид

$$z = \frac{\sigma_u^{(\alpha)2}}{3\sigma_s^{(\alpha)2}(1+B^{(\alpha)}V(\sigma_-^{(\alpha)}))},\tag{8}$$

где обозначены инварианты тензора напряжений в матрице и наполнителях: $\sigma_{-}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (\left| \sigma^{(\alpha)} \right| - \sigma^{(\alpha)}), \quad \sigma^{(\alpha)} = \sigma_{11}^{(\alpha)} + \sigma_{22}^{(\alpha)} + \sigma_{33}^{(\alpha)}, \quad \sigma_{u}^{(\alpha)} -$ интенсивность напряжений [21,22], $B^{(\alpha)} = \left(\frac{\sigma_{C}^{(\alpha)2}}{3\sigma_{S}^{(\alpha)2}} - 1\right) \frac{1}{\sigma_{C}^{(\alpha)}} -$ константа, $\sigma_{C}^{(\alpha)}, \sigma_{T}^{(\alpha)}, \sigma_{S}^{(\alpha)} -$ пределы прочности на

сжатие, растяжение и сдвиг. Должны быть выполнены соотношения между пределами прочности $\sigma_c > \sqrt{3}\sigma_s$, $\sigma_c > 0$, $\sigma_s > 0$. В (8) введена непрерывная положительная функция от 1-го инварианта $V(\sigma_-^{(\alpha)})$:

$$V(\sigma_{-}^{(\alpha)}) = \begin{cases} 0, & ec\pi u \quad \sigma^{(\alpha)} > 0\\ -\sigma^{(\alpha)}, & ec\pi u - \sigma^{(\alpha)}_{C} < \sigma^{(\alpha)} < 0 \\ \sigma^{(\alpha)}_{C} & ec\pi u \quad \sigma^{(\alpha)} < -\sigma^{(\alpha)}_{C} \end{cases}$$
(9)

Параметр повреждаемости z, заданный формулой (8), имеет значение 0 при отсутствии напряжений в композите, изменяется в диапазоне $0 < z(\sigma_{ij}^{(\alpha)}) \le 1$ в нагруженном состоянии при отсутствии разрушений и принимает значения $z(\sigma_{ij}^{(\alpha)}(\zeta_s)) \ge 1$, если возникает разрушение в некоторой точке ζ_s . Если параметр повреждаемости достигает значения z = 1, то получаем поверхность прочности компонента

$$\sigma_u^{(\alpha)2} = 3\sigma_s^{(\alpha)2}(1 + B^{(\alpha)}V(\sigma_-^{(\alpha)}))$$
(10)

В области растяжении $\sigma^{(\alpha)} > 0$ поверхность прочности является эллипсоидом Мизеса: $\sigma_u^{(\alpha)2} = 3\sigma_s^{(\alpha)2}$, в области сжатия $-\sigma_c^{(\alpha)} < \sigma^{(\alpha)} < 0$ имеет место увеличение предела прочности, а в области «сверхсжатия» при $\sigma^{(\alpha)} < -\sigma_c^{(\alpha)} -$ поверхность прочности снова является эллипсоидом Мизеса, но с измененным пределом прочности: $\sigma_u^{(\alpha)2} = \sigma_c^{(\alpha)2}$.

Если условие $z(\sigma_{ij}^{(\alpha)}(\xi_s)) \ge 1$ выполняется в точке ξ_s или только в некоторой локальной области ЯП2, то полного разрушения не происходит – реализуется частичное разрушение ЯП2, называемое далее микроразрушением. Учет такого микроразрушения компонентов в модели вводится с помощью зависимости компонент модуля упругости от параметра повреждаемости:

$$C_{ijkl}(\xi_s, z) = (1 - h(z(\sigma_{ij}^{(\alpha)}(\xi_s) - 1))C_{ijkl}^{(\alpha)}, \quad \xi_s \in \tilde{V}_{\xi\alpha}, \, \alpha = 1...N,$$
(11)

где $C_{ijkl}^{(\alpha)}$ – компоненты тензора модулей упругости компонентов композита (константы). Согласно формуле (11) при наступлении микроразрушения в точке ξ_s модули упругости в данной точке обнуляются.

Для расчета прочности композита в целом необходимо вычислить предельные значения средних напряжений $\overline{\sigma}_{kl}$, при которых происходит вначале первое микроразрушение в каком-либо одном из компонентов (матрице или в наполнителях) в какой-либо одной точке $\xi_s^* \in \tilde{V}_{\xi}$ в момент времени t*, а затем и полное разрушение, при котором произойдет нарушение целостности всей ЯП2 с разделением ее на части. вычисления предельных значений напряжений в экспериментальных Для исследованиях, как правило, реализуют процесс линейного нагружения, при котором средние напряжения изменяются во времени пропорционально: $\bar{\sigma}_{kl}(t) = \tilde{\sigma}_{kl}t$, где $\tilde{\sigma}_{kl}$ компоненты тензора скоростей изменения напряжений. Подставляя соотношения (6) в критерии прочности (8) матрицы или наполнителей, получаем условие первоначального разрушения композита

$$\max_{\xi_s\in \tilde{V}_{\varepsilon}}\{z(B_{lnkm}^{(\alpha)}(\xi_s)\bar{\sigma}_{km}(t^*))\}=1,$$
(12)

где $\xi_s = \xi_s^*$ – координаты точки в ЯП2, в которой происходит выполнение условия (12), t^* – момент времени, при котором впервые выполняется условие (12), а $\overline{\sigma}_{km}(t^*)$ – предельные напряжения, при которых происходит первичное разрушение композита.

После наступления первоначального разрушения происходит изменение модулей упругости в разрушенных областях матрицы или/и наполнителей в соответствии с описанной выше моделью. По мере дальнейшего увеличения значений средних напряжений $\overline{\sigma}_{km}(t)$ условие разрушения (12) выполняется в большем числе точек ξ_s^* ЯП, т.е. происходит процесс распространения микроразрушения. В ЯП образуется некоторая область $V_{\xi} * (t)$ частичного разрушения композита. При тех значениях $\overline{\sigma}_{km}(t^{**})$, при которых в области частичного разрушения $V_{\xi} * (t^{**})$ впервые появляется хотя бы одна пара предельных точек ξ_s^* и $\tilde{\xi}_s^*$, принадлежащих противоположным граням области $\tilde{V}_{\xi} = 0.5, \tilde{\xi}_i^* = 0, \quad i \in \{1, 2, 3\}.$

Для решения локальных задач (1),(2) был использован метод конечных элементов с применением 4-х узловых тетраэдальных конечных элементов (КЭ), подробно этот метод изложен в работах [23-26]. Конечно-элементные сетки генерировались с помощью свободно-распространяемых генераторов сеток, применялись сетки с различным числом узлов (от 10^4 до 10^6). Сетки с большим количеством КЭ применялись при расчетах эффективных модулей упругости, когда не происходило

микроразрушений. После начала микроразрушения локальная задача становится нелинейной вследствие изменения модулей упругости в матрице или наполнителях, поэтому для ее решения применялся итерационный метод. Число итераций до достижения полного разрушения – порядка 10³ итераций, поэтому для решения этих задач применялись КЭ сетки с меньшим числом элементов, позволяющие сократить время проведения численных экспериментов. Численное решение больших систем линейных алгебраических уравнений методами сопряженных градиентов, препроцессинг и постпроцессинг, в том числе 3D визуализация и анимация, осуществлялись в программном комплексе [27], разработанном в научнообразовательном центре «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Для моделирования эффективных упругих и прочностных характеристик ЯПЗ и ЯП1 применялся аналогичный метод.

Результаты численного моделирования микроразрушения ЯПЗ

При численных расчетах были приняты следующие значения параметров. Характеристики SiC-матрицы m₃: модуль упругости $E_m = 320$ ГПа, коэффициент Пуассона $v_m = 0.35$, пределы прочности $\sigma_{Tm}^0 = 0,07$ ГПа; $\sigma_{Cm}^0 = 4$ ГПа; $\sigma_{Sm}^0 = 0,06$ ГПа. Геометрическая форма поры была принята сферической.

На рис. 3 показаны некоторые из результатов расчетов микронапряжений в ЯПЗ, показаны распределения компоненты $B_{1111}^{(\alpha)}$ тензора концентрации микронапряжений в ЯПЗ с концентрацией пор 20% до начала разрушения и распределение параметра повреждаемости z в ЯПЗ при растяжении в направлении Ox1. На рис. 4 показан сценарий микроразрушения ЯПЗ (матрицы с дефектом) при сжатии. Разрушение ЯПЗ начинается на поверхности поры (дефекта) и прорастает сначала перпендикулярно к направлению действия нагрузки, а затем зона разрушения разворачивается и распространяется вдоль направления действия нагрузки до полного разрушения ЯПЗ.

Различие в механизмах разрушения при растяжении и сжатии показано на рис. 5. При растяжении разрушение происходит вследствие образования трещины в плоскости перпендикулярной направлению растяжения, а при сжатии в плоскости, параллельной направлению сжатия.



Рис. 3. (а) Компонента *B*^(α)₁₁₁₁ тензора концентрации микронапряжений в ЯПЗ (до начала разрушения), (б) распределение параметра повреждаемости z в ЯПЗ при растяжении в направлении Ox₁





Рис. 4 Сценарий разрушения матрицы m₃ с дефектом при сжатии (1/8 шара - область дефекта) по мере увеличения напряжения сжатия.



Рис. 5. Распределение параметра повреждаемости z в ЯПЗ при растяжении и сжатии в направлении Ox₁

Объединенная модель разрушения реакционно-связанной керамики SiC

Расчеты, проведенные для ЯПЗ, аналогичным образом могут быть проведены и для ЯП2 и ЯП1. При построении объединенной модели разрушения всего керамического композита КРСК дополнительно учитывался так называемый масштабный эффект прочности керамических композитов, который заключается в следующем.

Концентрация дефектов в реакционно-спеченной матрице имеет вероятностный характер – в большем объеме матрицы содержится большая концентрация дефектов, в результате прочность КРСК, с большим содержанием реакционно-связанной матрицы (и меньшим содержанием частиц SiC) уменьшается. Масштабный эффект можно обосновать следующим образом: при высокой температуре, когда происходит пропитка жидким кремнием углеродной пористой заготовки матрицы, возникает процесс растворения углерода в жидком кремнии. Растворенный кремний диффундирует от твердой поверхности взаимодействия кремний-углерод в зону жидкого кремния. Далее в объеме жидкого кремния начинается химическая реакция C+Si=SiC с образованием зародышей твердой карбидной фазы. Глубина диффузии углерода зависит как от времени и температуры процесса, так и от геометрических размеров пористого каркаса. Чем меньше размеры пор углеродного каркаса, при одинаковом их количестве, тем более равномерным оказывается распределен углерод в жидком кремнии и тем меньше останется непрореагировавшего C, который выступает в качестве дефекта.

В то же время вместо характерного размера пор (т.е. размера ЯПЗ) могут выступать и мелкие фракции наполнителя: чем больше концентрация мелкодисперсных частиц наполнителя и чем меньше размер этих фракций, тем меньше характерный размер ЯПЗ, и тем более плотной и равномерной будет распределение атомов растворенного углерода в Si. Соответственно, тем меньше будет и остаточных непрореагировавших частиц Si и C. Таким образом, в ЯП2 с меньшим размером частиц SiC оказывается меньше примесей, снижающих прочность матрицы и более высокой прочность матрицы m₂. На основании этих гипотез была предложена следующая модель масштабного эффекта прочности реакционно-спеченной матрицы: концентрация дефектов φ_d в ЯПЗ и концентрация мелкодисперсных частиц SiC φ_{f2} в ЯП2 полагались связанными между собой, в простейшем варианте модели принята линейная зависимость: $\varphi_d + \varphi_{f2} = C_1 = const$. Значение константы $C_1 = 0.65$ было принято близкой к предельному значению, при котором происходит соприкосновение частиц SiC.

Характеристики SiC-частиц, принятые в расчетах: модуль упругости E_f = 380 ГПа, коэффициент Пуассона v_f = 0.35. Пределы прочности частиц SiC наполнителя: σ_{Tf} = 0,7 ГПа; σ_{Cf} = 4 ГПа; σ_{Sf} = 0,6 ГПа.

На рис. 6 показаны результаты расчетов распределения компоненты $B_{1111}^{(\alpha)}$ тензора концентрации микронапряжений в ЯП1 с концентрацией крупной фракции частиц SiC φ_{f1} =60% и с содержанием дефектов φ_d =20% до начала микроразрушения ЯП1, а также распределение параметра повреждаемости z в ЯП1 при растяжении в направлении Ox1. На рис. 7 показан сценарий микроразрушения ЯП1 при сжатии. Разрушение ЯП1 начинается в узкой зоне между соседними частицами SiC, зона разрушения имею эллипсоидальную форму, главные оси которого наклонены примерно под углом 45° к направлению действия сжимающей нагрузки.



Рис. 6. Распределение компоненты $B_{1111}^{(\alpha)}$ тензора концентрации микронапряжений в матрице m₁ ЯП1 до начала разрушения (а) и параметра повреждаемости z в ЯП1 при растяжении в направлении $O\xi_1$ (б) (частицы SiC не показаны).



Рис. 7. Сценарий разрушения матрицы m₁ в ЯП1 с дефектом в ЯП3 при увеличении сжимающего напряжения.

На рис. 8 и 9 показаны графики зависимости эффективного модуля упругости, прочности на растяжение и сжатие матрицы m₂ от содержания дефектов, полученные в результате моделирования микроразрушения ЯПЗ. Увеличение содержания дефектов приводит к резкому уменьшению упруго-прочностных характеристик матрицы m₂. Существенным является различие прочностных свойств керамической матрицы на растяжение и сжатие: примерно в 6-10 раз.



Рис. 8. Зависимость модуля упругости SiC-матрицы m₂ от содержания в ней дефектов



Рис. 9. Зависимость прочности SiC-матрицы m₂ на сжатие (а) и растяжение (б) от содержания в ней дефектов

На рис. 10 и 11 показаны графики зависимости эффективного модуля упругости, прочности на растяжение и сжатие композита КРСК от содержания φ_{f2} мелкодисперсных частиц наполнителя SiC при разных значениях концентрации φ_{f1} крупно дисперсного наполнителя. Результаты расчетов получены по объединенной 3-х уровневой модели разрушения. При изменении концентрации содержания

 φ_{f^2} одновременно изменялась и концентрация дефектов φ_d в матрице, в соответствии с изложенной выше моделью. В результате моделирования установлено, что:

– при наличии полидисперсной структуры керамики КРСК изменение концентрации φ_{f1} более крупных фракций играет значительно менее существенную роль, чем содержание наименьшей фракции - теоретически эта зависимость весьма мала, в то же время изменение концентрации φ_{f2} мелкодисперсной фракции влияет весьма существенно на прочностные свойства керамики, основная причина этого эффекта - это масштабный фактор, обусловленный уменьшением размера дефектов матрицы при уменьшении размера частиц наполнителя;

– тем не менее влияние более крупных фракций наполнителя также играет свою роль, состоящую в том, что эти фракции формируют саму мелкодисперсную структуру, без наличия которой частицы одной мелкой фракции будут формировать кластеры, приводящие к появлению характерного размера матрицы, и соответственно, к повышению вероятностного образования более крупных дефектов, а тем самым к снижению прочности керамики в целом;



Рис. 10. Зависимость модуля упругости композита от содержания φ_{f2} мелкодисперсных частиц наполнителя SiC при разных значениях концентрации φ_{f1} крупно дисперсного наполнителя



Рис. 11. Зависимость прочности композита КРСК на сжатие (а) и растяжение (б) от содержания φ_{f1} крупных частиц наполнителя SiC при разных значениях концентрации

 $\varphi_{_{f2}}$ мелко-дисперсного наполнителя

– оптимальные содержания мелкодисперсной фазы в матрице с точки зрения максимальных значений прочности керамики, достигается в диапазоне 0.55-0.6 (от чистой неармированной матрицы, или 0.55-0.6 φ_{f1} - для общей концентрации в керамике), при более высоких значениях концентрации сферических частиц происходит эффект формирования "тонкого прослоя" между частицами и прочность наполненной матрицы и керамик в целом начинает снижаться;

– оптимальные содержания крупно-дисперсной фазы наполнителя с точки зрения максимальных значений прочности керамики, зависят от содержания мелкодисперсной фазы: с уменьшением содержания мелкодисперсной фазы оптимальная концентрация крупно-дисперсной фазы также немного уменьшается в диапазоне от 0.62 до 0.5, что обусловлено эффектом снижения модуля упругости матрицы, армированной мелко-дисперсными частицами.

Заключение

На основе метода многомасштабной гомогенизации разработана трёхуровневая модель керамических композиционных материалов на основе реакционно-связанного SiC, которая позволяет прогнозировать зависимость прочности материала от содержания и размеров частиц SiC-наполнителя. Результаты расчетов по этой модели показывают, что при наличии полидисперсной структуры керамики изменение концентрации более крупных фракций играет значительно менее существенную роль,

чем содержание наименьшей фракции, в то же время изменение концентрации мелкодисперсной фракции влияет весьма существенно на прочностные свойства керамики, основная причина этого эффекта – это проявление масштабный фактор, обусловленный уменьшением размера дефектов матрицы при уменьшении размера частиц наполнителя.

Список литературы

1. Макаров П.В., Еремин М.О. Моделирование разрушения керамических композиционных материалов при одноосном сжатии // Вестник Томского госуниверситета. Сер. Математика и механика. 2013. № 1 (21). С. 61-74.

 Bonora N., Ruggiero A. Micromechanical modeling of composites with mechanicalinterface. Part 1: Unit cell model development and manufacturing process effects // Composites Science and Technology. 2006. Vol. 66, iss. 2. P. 314-322.

 3.
 ANSYS. Композиционные материалы // CADFEM Company: website. Режим

 доступа:
 <u>http://www.cadfem-cis.ru/no_cache/service/</u>

<u>demo/brochures/?tx_drblob_pi1%5BdownloadUid%5D=37</u> (дата обращения 01.10.2013).

Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Многомасштабное моделирование упругих композиционных материалов // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 5.
С. 20.

5. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Еголева Е.С., Матвеева А.А. Моделирование термоупругих характеристик композитов на основе алюмохромофосфатных связующих // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013. № 11. DOI: <u>10.7463/1113.0623564</u>

6. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П., Садовничий Д.Н., Гафаров Б.Р. Численное и экспериментальное моделирование прочностных характеристик сферопластиков // Композиты и наноструктуры. 2013. № 3. С. 35-51.

7. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П. Численное моделирование микроразрушения и прочностных характеристик пространственно-армированных композитов // Механика композиционных материалов и конструкций. 2013. Т. 19, № 3. С. 365-383.

8. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П., Шпакова Ю.И. Численное моделирование процессов разрушения тканевых композитов // Вычислительная механика сплошной среды. 2013. Т. 6, № 4. С. 389-402. DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.4.43

9. Neshpor V.S., Zaitsev G.P., Maystrenko A.L., et al. The armor ceramics ballistic efficiency evaluation // Abstr. of the 8th CIMTEC-World Ceramics Congress and Forum on New Materials (Florencia, Italy, June 28-July 4, 1994). 1994. P. 102.

 Rozenberg O.A., Maystrenko A.L., Kulich V.G., Shestakov S.I. Peculiarities of manufacturing and properties of high-density silicon carbide — based armored ceramics // Proc. 5th Int. Armament Conf. (Waplevo, Poland). 2004. P. 11-13.

11. Гнесин Г.Г. Карбидокремниевые материалы. М.: Металлургия, 1977. 215 с.

12. Дыбань Ю.П., Сичкарь З.В., Шипилова Л.А. Влияние фракционного состава формовочных смесей на свойства самосвязанного карбида кремния // Порошковая металлургия. 1982. № 6. С. 16-23.

13. Xa Shijie Liu, Zhanyao Ha. Prediction of random packing limit for multimodal particle mixture // Powder Technology. 2002. Vol. 126, iss. 3. P. 283-296. DOI: 10.1016/S0032-5910(02)00075-X

 Takashi Itoh, Yoshimoto Wanibe, Hiroshi Sakao. Relation between packing density and particle size distribution in random packing models of powders // J. Inst. Metals. 1986.
 Vol. 50, no. 8. P. 740-746.

15. Dimitrienko Yu.I. Thermomechanics of Composites under High Temperatures. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht/Boston/London. 1999. 347 p.

16. Димитриенко Ю.И. Механика композиционных материалов при высоких температурах. М.: Машиностроение, 1997. 364 с.

 Димитриенко Ю.И. Кашкаров А.И. Расчет эффективных характеристик композитов с периодической структурой методом конечных элементов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2002. № 2. С. 95-108.

18. Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.И., Макашов А.А. Конечно-элементный расчет эффективных упругопластических характеристик композитов на основе метода асимптотического осреднения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2007. № 1. С. 26-46.

19. Dimitrienko Y.I., Sokolov A.P. Elastic properties of composite materials // Mathematical Models and Computer Simulations. 2010. Vol. 2, no. 1. P. 116-130.

20. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Разработка численного метода расчета эффективных упругих характеристик композиционных материалов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2008. № 2. С. 56-67.

Димитриенко Ю.И. Механика сплошной среды. В 4 т. Т.1 Тензорный анализ.
 М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. 524 с.

22. Димитриенко Ю.И. Нелинейная механика сплошной среды. М.: Физматлит, 2009. 624 с.

23. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Система автоматизированного прогнозирования свойств композиционных материалов // Информационные технологии. 2008. № 8. С. 31-38.

24. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Об упругих свойствах композиционных материалов // Математическое моделирование. 2009. Т. 21, № 4. С. 96-110.

25. Димитриенко Ю.И., Дубровина А.Ю., Соколов А.П. Конечно-элементное моделирование усталостных характеристик композиционных материалов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2011. Спец. вып. «Математическое моделирование». С. 34-50.

Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Численное моделирование композиционных материалов с многоуровневой структурой // Известия РАН. Серия физическая. 2011.
 Т. 75, № 11. С. 1549-1554.

27. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Сборщиков С.В. Программа gcdfes_dll_MultiscaleSolver проведения многомасштабного анализа упруго-прочностных характеристик композиционных материалов: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013614477 РФ. 2013.

SCIENCE and EDUCATION

EL Nº FS77 - 48211. Nº0421200025. ISSN 1994-0408

electronic scientific and technical journal

Modeling microstructural destruction and strength of ceramic composites based on the reaction-bonded SiC

11, November 2013 DOI: 10.7463/1113.0659438 Dimitrienko Yu.I., Sborschikov S.V., Belenovskaya Yu.V., Aniskovich V.A., Perevislov S.N.

Bauman Moscow State Technical University, 105005, Moscow, Russian Federation CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR SPECIAL MACHINERY, Center high-strength materials "Армоком", Moscow region, Russia JSC "Central research Institute of materials science", St. Petersburg, Russian Federation dimit.bmstu@gmail.com servasbor@gmail.com belenovskaya@yandex.ru sekr_armocom@mail.ru perevislov@mail.ru

Using a multi-scale homogenization method, a three-level model was developed for ceramic composite materials based on the reaction-bonded SiC. Numerical simulation was performed with the use of the finite-element method for solving a set of local problems over the periodicity cells of three structural levels. Tensor fields of stress concentration were computed in matrices and fillers. A new strength criterion of a matrix and fillers at multi-axis stress state was applied; this criterion takes into account a significant difference (more than ten times) between strength features of ceramics under tension and compression. A model that takes into account a scale effect of the strength of ceramic composites was proposed. Numerical investigation of sequential microstructural destruction of ceramic composites up to the final fracture was conducted. Computations demonstrated that at the presence of a polydisperse structure of ceramics, a change in concentrations of large-scale fractions plays less considerable role than in the case of small particles fraction.

Publications with keywords: FEM, numerical modelling, multiscale homogenization method, ceramic composites, reaction bonded SiC, microdestruction, strength criterion, stress concentration tensor, scale strength effect
 Publications with words: FEM, numerical modelling, multiscale homogenization method, ceramic composites, reaction bonded SiC, microdestruction, strength criterion, stress concentration tensor, scale strength effect

References

1. Makarov P.V., Eremin M.O. Modelirovanie razrusheniya keramicheskikh kompozitsionnykh materialov pri odnoosnom szhatii [Simulation of ceramic compositional materials fracture upon uniaxial compression]. *Vestnik Tomskogo gosuniversiteta. Ser. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics], 2013, no. 1 (21), pp. 61-74.

2. Bonora N., Ruggiero A. Micromechanical modeling of composites with mechanicalinterface. Part 1: Unit cell model development and manufacturing process effects. *Composites Science and Technology*, 2006, vol. 66, iss. 2, pp. 314-322.

3. *ANSYS. Kompozitsionnye materialy* [ANSYS. Composite materials]. Website of CADFEM Company: Available at: <u>http://www.cadfem-cis.ru/no_cache/service/</u> <u>demo/brochures/?tx_drblob_pi1%5BdownloadUid%5D=37</u>, accessed 01.10.2013.

4. Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. Mnogomasshtabnoe modelirovanie uprugikh kompozitsionnykh materialov [Multiscale modeling of elastic composite materials]. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2012, vol. 24, no. 5, pp. 3-20.

5. Dimitrienko Yu.I., Sborshchikov S.V., Egoleva E.S., Matveeva A.A. Modelirovanie termouprugikh kharakteristik kompozitov na osnove alyumo-khromofosfatnykh svyazuyushchikh [Modeling of thermo-elastic properties of composites with alumino-chromic phosphate matrices]. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana* [Science and Education of the Bauman MSTU], 2013, no. 11. DOI: <u>10.7463/1113.0623564</u>

6. Dimitrienko Yu.I., Sborshchikov S.V., Sokolov A.P., Sadovnichiy D.N., Gafarov B.R.Chislennoe i eksperimental'noe modelirovanie prochnostnykh kharakteristik sferoplastikov [Computer and experimental study modeling of failure of micro-sphere filled composite]. *Kompozity i nanostruktury* [Composites and nanostructures], 2013, no. 3, pp. 35-51.

7. Dimitrienko Yu.I., Sborshchikov S.V., Sokolov A.P. Chislennoe modelirovanie mikrorazrusheniya i prochnostnykh kharakteristik prostranstvenno-armirovannykh kompozitov [Computational modeling of microdestruction and strength of multidimensional reinforced composites]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsiy*, 2013, vol. 19, no. 3, pp. 365-383.

8. Dimitrienko Yu.I., Sborshchikov S.V., Sokolov A.P., Shpakova Yu.I. Chislennoe modelirovanie protsessov razrusheniya tkanevykh kompozitov [Computational modeling of processes of destruction of textile composites]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnoy sredy* [Computational continuum mechanics], 2013, vol. 6, no. 4, pp. 389-402. DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.4.43

9. Neshpor V.S., Zaitsev G.P., Maystrenko A.L. et al. The armor ceramics ballistic efficiency evaluation. *Abstr. of the 8th CIMTEC-World Ceramics Congress and Forum on New Materials*, Florencia, Italy, June 28-July 4, 1994, p. 102.

10. Rozenberg O.A., Maystrenko A.L., Kulich V.G., Shestakov S.I. Peculiarities of manufacturing and properties of high-density silicon carbide - based armored ceramics. *Proc. 5th Int. Armament Conf.*, Waplevo, Poland, 2004, pp. 11-13.

11. Gnesin G.G. *Karbidokremnievye materialy* [Silicon carbide materials]. Moscow, Metallurgiya, 1977. 215 p.

12. Dyban' Yu.P., Sichkar' Z.V., Shipilova L.A. Vliyanie fraktsionnogo sostava formovochnykh smesey na svoystva samosvyazannogo karbida kremniya [Effect of fractional composition of starting mixtures on the properties of self-bonded silicon carbide]. *Poroshkovaya metallurgiya*, 1982, no. 6, pp. 16-23. (English translation: *Soviet Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, 1982, vol. 21, is. 6, pp. 464-470. DOI: 10.1007/BF00801756).

13. Xa Shijie Liu, Zhanyao Ha. Prediction of random packing limit for multimodal particle mixture. *Powder Technology*, 2002, vol. 126, is. 3, pp. 283-296. DOI: 10.1016/S0032-5910(02)00075-X

14. Takashi Itoh, Yoshimoto Wanibe, Hiroshi Sakao. Relation between packing density and particle size distribution in random packing models of powders. *J. Inst. Metals*, 1986, vol. 50, no. 8, pp. 740-746.

15. Dimitrienko Yu.I. *Thermomechanics of Composites under High Temperatures*. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht/Boston/London. 1999. 347 p.

16. Dimitrienko Yu.I. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov pri vysokikh temperaturakh* [Mechanics of composite materials at high temperatures]. Moscow, Mashinostroenie, 1997. 364 p.

17. Dimitrienko Iu.I. Kashkarov A.I. Raschet effektivnykh kharakteristik kompozitov s periodicheskoi strukturoi metodom konechnykh elementov [The calculation of the effective characteristics of composite materials with periodic structure by finite element method]. *Vestnik MGTU im. N.E.Baumana. Estestvennye nauki* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Natural science], 2002, no. 2, pp. 95-108.

18. Dimitrienko Yu.I., Kashkarov A.I., Makashov A.A. Konechno-elementnyy raschet effektivnykh uprugoplasticheskikh kharakteristik kompozitov na osnove metoda asimptoticheskogo osredneniya [Finite element design of effective elastic and plastic characteristics of composites on the basis of method of asymptotic

averaging]. *Vestnik MGTU im. N.E.Baumana. Estestvennye nauki* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Natural science], 2007, no. 1, pp. 26-46.

19. Dimitrienko Y.I., Sokolov A.P. Elastic properties of composite materials. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2010, vol. 2, no. 1, pp. 116-130.

20. Dimitrienko Iu.I., Sokolov A.P. Razrabotka sistemy avtomatizirovannogo vychisleniia effektivnykh uprugikh kharakteristik kompozitov [Development of automated technology of calculation of effective elastic characteristics of composites by method of asymptotic averaging]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Natural science], 2008, no. 2, pp. 56-67.

21. Dimitrienko Yu.I. *Mekhanika sploshnoy sredy*. V 4 t. T.1 Tenzornyy analiz
[Continuum Mechanics. In 4 vols. Vol.1 Tensor Analysis]. Moscow, Bauman MSTU Publ.,
2011. 524 p.

22. Dimitrienko Yu.I. *Nelineynaya mekhanika sploshnoy sredy* [Nonlinear continuum mechanics]. Moscow, Fizmatlit, 2009. 624 p.

23. Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. Sistema avtomatizirovannogo prognozirovaniya svoystv kompozitsionnykh materialov [Automated forecasting of composite material properties by means of homogenization method]. *Informatsionnye tekhnologii*, 2008, no. 8, pp. 31-38.

24. Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. Ob uprugikh svoystvakh kompozitsionnykh materialov [Elastic properties of composite materials]. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2009, vol. 21, no. 4, pp. 96-110. (English translation: *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2010, vol. 2, iss. 1, pp. 116-130. DOI: 10.1134/S2070048210010126).

25. Dimitrienko Yu.I., Dubrovina A.Yu., Sokolov A.P. Konechno-elementnoe modelirovanie ustalostnykh kharakteristik kompozitsionnykh materialov [Finite-element modeling of fatigue characteristics of composite materials]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Natural science], 2011, spec. iss. Matematicheskoe modelirovanie [Mathematical modeling], pp. 34-50.

26. Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. Chislennoe modelirovanie kompozitsionnykh materialov s mnogourovnevoy strukturoy [Numerical modeling of composites with multiscale microstructure]. *Izvestiya RAN. Fizicheskaya seriya*, 2011, vol. 75, no. 11, pp. 1549-1554. (English Translation: *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2011, vol. 75, iss. 11, pp. 1457-1461. DOI: 10.3103/S1062873811110074).

27. Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P., Sborshchikov S.V. *Programma* gcdfes_dll_MultiscaleSolver provedeniya mnogomasshtabnogo analiza uprugoprochnostnykh kharakteristik kompozitsionnykh materialov [Program gcdfes_dll_MultiscaleSolver for multiresolution analysis of elastic-strength characteristics of composite materials]. Certificate RF of state registration of computer program, no. 2013614477. 2013.