Дислокационный механизм проскальзывания полых волокон в процессе разрушения керамических нанокомпозитов

© М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько

Институт проблем машиноведения Российской академии наук, 199178 Санкт-Петербург, Россия E-mail: gutkin@def.ipme.ru, ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 3 марта 2008 г.)

Предложена дислокационная модель, описывающая проскальзывание полых волокон (в частности, углеродных нанотрубок) как микромеханизм релаксации упругой энергии вблизи трещин в керамических нанокомпозитах. В рамках модели проскальзывание полого цилиндрического волокна происходит путем зарождения и скольжения призматической круговой дислокационной петли по границе между волокном и матрицей. Рассчитаны энергетические характеристики такого процесса и критическое напряжение, необходимое для безбарьерного зарожденияи и скольжения петли. Показано, что это критическое напряжение увеличивается с ростом отношения модулей сдвига матрицы и волокна, а в широком интервале изменения этого отношения — с ростом толщины стенки волокна.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 08-01-00225-а и 08-02-00304-а), Федерального агенства по науке и инновациям (контракт 02.513.11.3190 Программы "Индустрия наносистем и материалов"), Программы РАН "Структурная механика материалов и элементов конструкций" и Санкт-Петербургского научного центра РАН.

PACS: 61.46.-w, 62.25.+g, 81.05.Je

1. Введение

Физическая природа процессов пластической деформации и разрушения в нанокристаллических твердых телах и нанокомпозитах представляет собой предмет интенсивных фундаментальных исследований (см., например, [1-11]). Благодаря особенностям наноструктуры эти процессы носят необычный характер и приводят к уникальным механическим свойствам таких материалов. В частности, керамические нанокомпозиты обладают сверхвысокими прочностью и твердостью при обычных и высоких температурах [12-21], что делает их привлекательными для широкого применения в современных и будущих высоких технологиях. При этом основным недостатком большинства керамических нанокомпозитов остается низкая трещиностойкость механическая характеристика, чрезвычайно важная с точки зрения их практического использования [15]. Вместе с тем имеются отдельные примеры керамических нанокомпозитов с достаточно высокими показателями трещиностойкости [12,13,15–17]. В частности, можно назвать нанокристаллические керамики, упрочненные углеродными нанотрубками [13,16,17]. Такие примеры стимулируют изучение физических микромеханизмов торможения роста трещин за счет релаксации упругой энергии в прилегающих областях нанокомпозита. Основная цель настоящего исследования — разработка дислокационной модели проскальзывания полых волокон (в частности, углеродных нанотрубок) как микромеханизма релаксации упругой энергии вблизи трещин в керамических нанокомпозитах.

2. Модель разрушения нанокомпозита в режиме бриджинга

Рассмотрим модельный волокнистый нанокомпозит, состоящий из керамической матрицы, упрочненной однонаправленными непрерывными волокнами (сплошными или полыми). Предположим, что под действием приложенного однородного растягивающего напряжения σ в таком материале образуется микротрещина. На начальном этапе ее развития разрушается только хрупкая матрица, а волокна остаются неповрежденными и подобно мостикам (bridges) связывают между собой берега трещины, препятствуя ее дальнейшему раскрытию (рис. 1, а). В таком случае принято считать, что трещина с берегами, которые связаны друг с другом волокнами, развивается в режиме бриджинга (bridging), подробно исследованном в случае обычных композитов с микроструктурой [22-24]. Вместе с тем режим бриджинга в нанокомпозитах с учетом наномасштабных эффектов может существенно отличаться от такового в случае обычных композитов [15]. Выделим следующие стадии бриджинга, наступающие по мере продвижения и раскрытия трещины в нанокомпозите.

1) Волокна в зоне трещины испытывают повышенную упругую деформацию, но не проскальзывают в матрице (рис. 1, a).

2) Начинается проскальзывание волокон, физическим механизмом которого служит зарождение на берегах трещины вокруг волокон призматических дислокационных петель, способных скользить по границе между волокнами и матрицей (рис. 1, b).



Рис. 1. Схема зарождения дислокационных петель, их скоплений и нанотрещин вблизи вершины микротрещины, растущей в режиме бриджинга в волокнистом керамическом нанокомпозите. a — начальное положение трещины; b — рост трещины сопровождается зарождением призматических дислокационных петель, охватывающих волокна и скользящих от поверхности трещины в объем материала вдоль границ между волокнами и матрицей; c — по мере дальнейшего роста трещины испущенные петли останавливаются у случайных препятствий и формируют дислокационные скопления, при этом продолжается зарождение и скольжение новых петель; d — в местах скопления дислокационных петель происходят разрывы волокон, которые увеличиваются за счет поглощения новых петель; эта стадия предшествует переходу от роста трещины в режиме бриджинга к ее росту в режиме выдергивания волокон.

3) Проскальзывание волокон развивается, испускаются все новые петли, однако первые зародившиеся петли останавливаются у препятствий на границах, что приводит к образованию дислокационных скоплений (рис. 1, c).

4) В местах скопления петель образуются разрывы волокон, которые увеличиваются с поглощением все новых петель (рис. 1, d).

Четвертая стадия бриджинга предшествует переходу к режиму выдергивания (pull-out) волокон из матрицы следующему этапу развития трещины в нанокомпозите. Предложенная схема может быть реализована в том случае, если на всех стадиях бриджинга сохраняется сплошность межфазной границы, т.е. отсутствуют отслоения волокна от матрицы. Последнее — обычное явление в микрокристаллических керамических композитах [25,26], разрушение которых представляет собой чередование хрупких разрывов матрицы, волокна и границы между ними. Для нанокомпозитов, в которых поперечные размеры волокон составляют десятки нанометров и для достижения межфазной трещиной гриффитсовского размера просто мало места, наша схема может оказаться более эффективной. Легко видеть, что возможность ее осуществления определяется условиями, необходимыми для зарождения первых призматических дислокационных петель. Определение этих условий — основная цель настоящей работы.

Модель зарождения дислокационной призматической петли вокруг волокна на поверхности трещины

Для проведения оценочных расчетов примем модель, показанную на рис. 2. Локальное проскальзывание полого цилиндрического волокна с внешним радиусом а и толщиной стенки h на участке границы длиной p+bосуществляется путем зарождения и скольжения по границе на расстояние р призматической круговой дислокационной петли с вектором Бюргерса b. Зарождение петли вызывается действием локального сдвигового напряжения т как реакции системы на попытку выдернуть волокно из матрицы приложенной к волокну силой F. В рамках модели предполагается, что материалы волокна и матрицы упругоизотропны и характеризуются соответственно модулями сдвига G_1 и G_2 и коэффициентами Пуассона v1, v2. Поскольку для определения критических условий зарождения дислокаций обычно достаточно анализа ситуации непосредственно вблизи точки зарождения, локальное напряжение т можно считать здесь постоянным.

Зарождение призматической дислокационной петли в такой модельной системе приводит к изменению полной энергии системы на величину

$$\Delta W = W_{\rm el} + W_c + \Delta W_s - A, \tag{1}$$

где $W_{\rm el}$ — упругая энергия петли в данной системе, W_c — энергия ее ядра, ΔW_s — изменение поверхностной энергии волокна в месте зарождения петли, A работа локального напряжения τ по зарождению петли. Упругую энергию петли всегда можно представить в виде произведения ее погонной энергии $w_{\rm el}$ на длину дислокационной линии

$$W_{\rm el} = w_{\rm el} 2\pi a. \tag{2}$$

Энергию дислокационного ядра аппроксимируем формулой

$$W_c = \overline{D}b^2 Z 2\pi a, \qquad (3)$$

где $\overline{D} = (D_1 + D_2)/2$, $D_i = G_i/[4\pi(1-\nu_i)] = G_i/[\pi(1+k_i)]$, $k_i = 3 - 4\nu_i$; i = 1, 2; $Z \approx 1$. При зарождении петли свободная поверхность волокна увеличивается, а граница раздела между волокном и матрицей уменьшается на полосу площадью $2\pi ab$. Соответствующее изменение энергии ΔW_s естественно записать в виде

$$\Delta W_s = (\gamma_1 - \gamma_b) 2\pi a b. \tag{4}$$

Здесь γ_1 — удельная энергия свободной поверхности волокна, γ_b — удельная поверхностная энергия границы между волокном и матрицей. Работа локального напряжения τ по зарождению петли определяется обычным выражением

$$A = \tau 2\pi a b p. \tag{5}$$



Рис. 2. Схема действия дислокационного механизма проскальзывания полого волокна по его границе с матрицей в процессе разрушения волокнистого керамического нанокомпозита за счет зарождения на поверхности трещины и скольжения вдоль границы круговой призматической дислокационной петли.

Подставляя (2)–(5) в (1) и сокращая обе части равенства на $2\pi a$, получаем изменение энергии системы $\Delta w = \Delta W/(2\pi a)$ в расчете на единицу длины дислокации

$$\Delta w = w_{\rm el} + \overline{D}b^2 + (\gamma_1 - \gamma_b)b - \tau bp. \tag{6}$$

Точный аналитический расчет величины w_{el} в общем случае для модели, представленной на рис. 2, вряд ли возможен, поскольку требует учета четырех различных поверхностей раздела с разной геометрией, т.е. решения очень сложной граничной задачи теории упругости. Однако в частном случае, когда толщина стенки волокна много меньше его радиуса, $a \gg h$, возможен приближенный расчет w_{el}, учитывающий все основные параметры системы. Действительно, в этом случае близость внутренней свободной поверхности волокна обеспечивает более существенную экранировку упругих полей дислокационной петли, чем сама петлевая форма дислокации. Это означает, что можно от объемной граничной задачи теории упругости для дислокационной петли перейти к плоской граничной задаче о прямолинейной дислокации. Соответствующая упрощенная модель показана на рис. 3. Здесь прямолинейная краевая дислокация с вектором Бюргерса b зарождается на краю границы между полубесконечной подложкой (матрицей) и тонким слоем (стенкой волокна) толщиной h и занимает положение (x = 0, y = p). Предполагается, что обе свободные поверхности системы (поверхность трещины и внутренняя поверхность волокна) и граница раздела слоя и подложки (волокна и матрицы) становятся плоскими. При этом выступающая часть стенки волокна $(0 \le x \le h, y < 0)$ просто отрезается, что, конечно, несколько затрудняет зарождение дислокации (усиливается ее притяжение к нижней границе y = 0), но делает задачу разрешимой. Однако и в таком сильно упрощенном виде она еще достаточно сложна и, повидимому, никем пока не решалась. В то же время,



Рис. 3. Приближенная модель, используемая для расчета погонной упругой энергии дислокационной петли в частном случае тонкостенного волокна: прямолинейная краевая дислокация с вектором Бюргерса **b** на границе у края тонкого слоя (стенки волокна) и полубесконечной подложки (матрицы) под действием локального сдвигового напряжения τ . Притяжение дислокации к краю системы (поверхности трещины) моделируется с помощью дислокации изображения с вектором Бюргерса –**b**.

если не стремиться к точному расчету упругих полей дислокации, а ограничиться изучением изменения ее энергии в зависимости от перемещения вдоль границы p, то можно описать взаимодействие дислокации с нижней границей как взаимодействие с дислокацией изображения. Тем самым задача определения $w_{\rm el}$ сводится к расчету погонной упругой энергии диполя краевых дислокаций с плечом 2p, расположенного на границе полубесконечной подложки и слоя с разными упругими модулями. Заметим, что ключевое допущение $a \gg h$ как раз соответствует наиболее интересному случаю композита, упрочненного тонкостенными нанотрубками.

Погонная упругая энергия диполя краевых дислокаций, расположенных на границе полубесконечной подложки и тонкого слоя

Погонную упругую энергию $w_{\rm el}$ дислокационного диполя рассчитаем как работу по его зарождению в собственном поле упругих напряжений $\sigma_{xy}^{(d)}$

$$w_{\rm el} = \frac{b}{2} \int_{-p+r_c}^{p-r_c} \sigma_{xy}^{(d)}(x=0,y) dy,$$
(7)

где r_c — радиус обрезания поля напряжения дислокации на ее ядре. Поле дислокационного диполя $\sigma_{xy}^{(d)}$ есте-

ственно записать в виде разности

$$\sigma_{xy}^{(d)}(x,y) = \sigma_{xy}(x,y-p) - \sigma_{xy}(x,y+p).$$
(8)

Здесь $\sigma_{xy}(x, y)$ — компонента поля напряжений положительной краевой дислокации, расположенной в точке (x = 0, y = 0) на границе полубесконечной подложки и тонкого слоя. Ее можно найти как предельный случай решения более сложной задачи о краевой дислокации в тонкой пластине, состоящей из двух слоев с разными упругими модулями [27,28]. Полагая толщину одного из слоев бесконечной, помещая дислокацию на границу между слоями и ориентируя ее вектор Бюргерса вдоль оси *y*, с помощью выражений, найденных в работе [27], получаем напряжение в границе раздела

$$\sigma_{xy}(x=0,y) = D_1 b \left\{ \frac{A+B-2}{y} - \int_0^{+\infty} f(s,h,A,B) \sin(sy) ds \right\}, \quad (9)$$

где $A = (1 - \Gamma)/(1 + k_1\Gamma), \quad B = (k_2 - k_1\Gamma)/(k_2 + \Gamma),$ $\Gamma = G_2/G_1$ и функция f(s, h, A, B) имеет вид

$$f(s, h, A, B) = \frac{e^{-4sh}[(1+AB)(A+B) - 4AB] - 2e^{-2sh}[2(1-A)^2s^2h^2 - (1-A)(2-A-B)sh + (1-A)(1-B)]}{e^{-4sh}AB - e^{-2sh}(4As^2h^2 + A + B) + 1}.$$
(10)

Первое слагаемое в формуле (9) описывает сдвиговое напряжение в плоскости скольжения краевой дислокации, расположенной на границе двух полупространств с разными упругими модулями. Если положить эти упругие модули равными, то параметры A и B обратятся в нуль, и это слагаемое сведется к известному выражению для бесконечной однородной среды [29]. Второе слагаемое в формуле (9) учитывает конечную толщину слоя h, т.е. описывает экранировку упругого поля дислокации со стороны свободной поверхности x = h (с учетом разницы упругих модулей слоя и подложки). При $h \to \infty$ это слагаемое пропадает.

Подставляя (8)–(10) в (7), получаем интегральное представление для энергии $w_{\rm el}$

$$w_{\rm el} = D_1 b^2 \left\{ (2 - A - B) \ln \frac{2p - r_c}{r_c} + 2 \int_0^{+\infty} \sin(sp) \sin[s(p - r_c)] f(s, h, A, B) \frac{ds}{s} \right\}.$$
 (11)

Далее показано, что интегральное выражение (11) удобно для проведения численных расчетов. В частных случаях, когда упругие модули слоя и подложки одинаковы (A = B = 0) или слабо отличаются друг от друга $(A, B \to 0,$ но $A \neq B \neq 0)$, интеграл в формуле (11) можно взять аналитически

$$w_{\rm el}(A = B = 0) = \frac{Gb^2}{2\pi(1 - \nu)}$$

$$\times \left\{ \ln \frac{2p - r_c}{r_c} - \frac{1}{2} \ln \frac{4h^2 + (2p - r_c)^2}{4h^2 + r_c^2} + \frac{2h^2(4h^2 + 3r_c^2)}{(4h^2 + r_c^2)^2} - \frac{2h^2[4h^2 + 3(2p - r_c)^2]}{[4h^2 + (2p - r_c)^2]^2} \right\}, \quad (12)$$

$$w_{\rm el}(A, B \to 0, A \neq B \neq 0)$$

$$= D_1 b^2 \Biggl\{ (2 - A - B) \ln \frac{2p - r_c}{r_c} - (1 - A - B) \Biggr\}$$

$$\times \ln \frac{4h^2 + (2p - r_c)^2}{4h^2 + r_c^2} + \frac{A + B}{2} \ln \frac{16h^2 + (2p - r_c)^2}{16h^2 + r_c^2} \Biggr\}$$

$$+ \frac{4h^2(4h^2 + 3r_c^2)}{(4h^2 + r_c^2)^2} - \frac{4h^2[4h^2 + 3(2p - r_c)^2]}{[4h^2 + (2p - r_c)^2]^2} \Biggr\}$$

$$+ 8Ah^2 \Biggl[\frac{4h^2 - r_c^2}{(4h^2 + r_c^2)^2} - \frac{4h^2 - (2p - r_c)^2}{[4h^2 + (2p - r_c)^2]^2} \Biggr]$$

$$- \frac{16(3A + B)h^2p(p - r_c)}{(4h^2 + r_c^2)[4h^2 + (2p - r_c)^2]} \Biggr\},$$
(13)

где $G = G_1 = G_2$ и $v = v_1 = v_2$. Очевидно, что формула (13) переходит в (12) при A = B = 0. Формула (12) при $h \to \infty$ и $p \gg r_c$ сводится к погонной упругой энергии дислокационного диполя в бесконечной однородной среде

$$w_{\rm el}(A = B = 0, \ h \to \infty, \ p \gg r_c) = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{2p}{r_c}.$$
 (14a)

Другой предельный переход в формуле (12) к случаю отдельной дислокации, $p \to \infty$, дает при $h \gg r_c$ погонную упругую энергию краевой дислокации у свободной поверхности

$$w_{\rm el}(A=B=0, \ p \to \infty, \ h \gg r_c) = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \left(\ln \frac{2h}{r_c} + \frac{1}{2} \right).$$
(14b)

Выражения (12) и (13) могут быть использованы в различных приложениях для описания поведения дислокаций у свободной поверхности соответственно в упругооднородных структурах и в структурах со слабой упругой неоднородностью.

5. Критическое напряжение зарождения первой петли

Рассчитав погонную энергию w_{el} , вернемся к обсуждению следующих слагаемых выражения (6), описывающего изменение энергии системы в расчете на единицу дли-

ны дислокации. Слагаемое, учитывающее энергию ядра дислокации, содержит введенный параметр \overline{D} , который можно представить как

$$\overline{D} = \frac{D_1 + D_2}{2} = \frac{D_1}{2} \left(1 + \Gamma \frac{1 - \nu_1}{1 - \nu_2} \right).$$
(15)

Разность поверхностных энергий $\gamma_1 - \gamma_b$ можно переписать как $\gamma_1(1-\alpha)$, где $\alpha = \gamma_b/\gamma_1$. При этом используем обычную оценку для свободной поверхностной энергии твердого кристаллического тела: $\gamma_1 \approx G_1 b/8$. Тогда изменение поверхностной энергии выражается через упругие константы волокна и параметр α

$$\gamma_1 - \gamma_b \approx D_1 b \, \frac{\pi}{2} \, (1 - \nu_1)(1 - \alpha).$$
 (16)

С учетом выражений (11), (15) и (16) перепишем формулу (6) в безразмерном виде

$$\frac{\Delta w}{D_1 b^2} = (2 - A - B) \ln(2\xi - 1) + 2 \int_0^{+\infty} \sin(\eta\xi) \sin[\eta(\xi - 1)] f(\eta, \lambda, A, B) \frac{d\eta}{\eta} + \frac{1}{2} \left(1 + [\Gamma + \pi(1 - \nu_2)(1 - \alpha)] \frac{1 - \nu_1}{1 - \nu_2} \right) - \frac{\tau}{D_1} \xi, \quad (17)$$

где $\xi = p/b, \ \eta = sb, \ \lambda = h/b$ и $r_c \approx b$. Результаты численного анализа полученного выражения (17) показаны на рис. 4. В расчетах зависимости $\Delta w(\xi)$ использовались следующие значения параметров: $\alpha = 0.5$; $v_1 = v_2 = 0.3; \ \Gamma = 0.1$ (рис. 4, *a*) 1 (рис. 4, *b*), 10 (рис. 4, *c*); $\lambda = 5$ (сплошные линии) и 50 (штриховые линии); $\tau/D_1 = 0, \ldots, 4$. Из рис. 4 следует, что вид функции $\Delta w(\xi)$ сильно зависит от отношения модулей сдвига Г и локального приложенного напряжения т. Функция $\Delta w(\xi)$ может монотонно возрастать при малых значениях т, монотонно убывать при больших или вести себя немонотонно — сначала расти, а затем, достигнув точки максимума, монотонно падать при средних. Так, при малых Γ (здесь при $\Gamma = 0.1$, рис. 4, *a*) режим монотонного роста (при au = 0) сменяется режимом монотонного убывания уже при $au = D_1$. При средних Γ (здесь при $\Gamma = 1$, рис. 4, b) такая смена поведения функции $\Delta w(\xi)$ требует напряжения $\tau = 3D_1$, а при больших Γ (здесь при $\Gamma = 10$, рис. 4, *c*) для этого не хватает еще большего напряжения $\tau = 4D_1$. В то же время функция $\Delta w(\xi)$ относительно слабо зависит от толщины стенки волокна $\lambda = h/b$. При малых Γ кривые $\Delta w(\xi)$, построенные для $\lambda = 5$ и 50, практически неразличимы (рис. 4, *a*). При средних и больших Г различия уже видны, но они не принципиальны: значения функции несколько возрастают с ростом λ , причем в наиболее интересной и важной для анализа начальной области оси ξ эти изменения очень малы.



Рис. 4. Зависимость изменения погонной энергии системы Δw от безразмерного расстояния $\xi = p/b$, пройденного дислокационной петлей при различных значениях приложенного локального сдвигового напряжения τ , отношения модулей сдвига $\Gamma = 0.1$ (*a*), 1 (*b*), 10 (*c*) и безразмерной толщины стенки волокна $\lambda = h/b = 5$ (сплошные линии) и 50 (штриховые линии). На части *a* сплошные и штриховые кривые настолько близки, что практически неразличимы. Изменение энергии дано в единицах $D_1 b^2$, значения напряжения τ указаны в единицах D_1 у соответствующих кривых.

Монотонный рост функции $\Delta w(\xi)$ означает, что зарождение дислокационной петли (проскальзывание волокна по границе с матрицей) энергетически невыгодно. Если функция ведет себя немонотонно, то ее максимум определяет высоту энергетического барьера для зарождения петли, а его положение — критическое расстояние, которое петля должна пройти, чтобы ее дальнейшее скольжение стало энергетически выгодным. Как видно из рис. 4, высота барьера и критическое расстояние сильно увеличиваются с ростом Г и уменьшением τ . В области относительно малых Γ и больших τ энергетический барьер исчезает, и функция $\Delta w(\xi)$ становится монотонно убывающей, что соответствует энергетически выгодному и безбарьерному зарождению петли. В качестве критерия перехода системы к такому режиму естественно потребовать одновременного выполнения следующих условий в начальной расчетной точке $\xi = 1$:

$$\begin{cases} \Delta w(\xi = 1) \le 0, \\ \frac{\partial \Delta w}{\partial \xi}\Big|_{\xi=1} = 0, \qquad \frac{\partial^2 \Delta w}{\partial \xi^2}\Big|_{\xi=1} < 0. \end{cases}$$
(18)

Выполнение первого из этих условий гарантирует, что зарождение дислокационной петли не приведет к повышению полной энергии системы, а второго и третьего, что петле не придется преодолевать энергетический барьер при скольжении по границе раздела волокна и матрицы. Этим условиям приближенно отвечают кривые, соответствующие $\tau = D_1$ на рис. 4, *a* и $\tau = 3D_1$ на рис. 4, *b*.

Подставляя выражение (17) в условия (18), получаем систему

$$\begin{cases} \tau \geq \frac{D_{1}}{2} \left[1 + \left[\Gamma + \pi (1 - \nu_{2})(1 - \alpha) \right] \frac{1 - \nu_{1}}{1 - \nu_{2}} \right] = \tau', \\ \tau = 2D_{1} \left[2 - A - B + \int_{0}^{+\infty} \sin \eta f(\eta, \lambda, A, B,) d\eta \right] = \tau'', \\ \frac{\partial^{2} \Delta w}{\partial \xi^{2}} \bigg|_{\xi = 1} = -4(2 - A - B) \\ + 4 \int_{0}^{+\infty} \eta \cos \eta f(\eta, \lambda, A, B) d\eta < 0. \end{cases}$$
(19)

Графическая интерпретация этой системы представлена на рис. 5. Здесь показаны зависимости правых частей первой и второй строк, обозначенных как τ' и τ'' , а также второй производной $\partial^2 \Delta w / \partial \xi^2 |_{\xi=1}$ от отношения модулей сдвига Γ матрицы и волокна при $\alpha = 0.5$, $v_1 = v_2 = 0.3$ и $\lambda = 5$. Из рис. 5 сразу видно, что неравенство в третьей строке системы (19) выполняется при любых Γ . Далее, прямая $\tau'(\Gamma)$ дважды пересекает кривую $\tau''(\Gamma)$, выделяя таким образом области изменения Γ , в которых в качестве критического напряжения зарождения дислокационной петли τ_c следует принимать большее из τ' и τ'' : $\tau_c(\Gamma) = \max{\{\tau'(\Gamma), \tau''(\Gamma)\}}$. Действительно, в интервалах $0 < \Gamma \leq \Gamma_{c1}$ и $\Gamma \geq \Gamma_{c2}$ выполняется неравенство $\tau' \geq \tau''$, которое означает, что при $\tau \geq \tau_c = \tau'$ зарождение петли не потребует



Рис. 5. Зависимость напряжений τ', τ'' и второй производной изменения энергии $\partial^2 \Delta w / \partial \xi^2 |_{\xi=1}$ от отношения модулей сдвига Г при $\lambda = 5$ в области малых (*a*) и больших (*b*) значений Г. Сплошная линия показывает зависимость критического напряжения $\tau_c = \max\{\tau', \tau''\}$ от Г. Значения напряжений и энергии даны соответственно в единицах D_1 и $D_1 b^2$.

преодоления энергетического барьера и не приведет к повышению энергии системы. В промежуточном интервале $\Gamma_{c1} < \Gamma < \Gamma_{c2}$ справедливо неравенство $\tau'' > \tau'$, которое означает, что при $\tau \ge \tau_c = \tau''$ зарождение петли обеспечит понижение энергии системы и также произойдет без преодоления барьера.

Чтобы убедиться в том, что наши выводы справедливы и для других значений λ , рассмотрим функции $\tau'(\Gamma)$ и $\tau''(\Gamma)$, показанные на рис. 6 для $\lambda = 1, \ldots, 5$. Поскольку, как видно из первой строки системы (19), функция $\tau'(\Gamma)$ не зависит от λ , а функция $\tau''(\Gamma)$ зависит от нее довольно слабо, определение $\tau_c(\Gamma, \lambda) = \max\{\tau'(\Gamma), \tau''(\Gamma, \lambda)\}$ верно для любых значений λ при $\lambda \ll a/b$. Можно заключить, что критическое напряжение τ_c не зависит от приведенной толщины стенки волокна λ при малых и больших значениях Γ (точнее, в интервалах $0 < \Gamma \leq \Gamma_{c1}$ и $\Gamma \geq \Gamma_{c2}$) и слабо увеличивается с ее ростом при средних значениях Γ (в интервале $\Gamma_{c1} < \Gamma < \Gamma_{c2}$). При этом интервал зависимости $\tau_c(\lambda)$ расширяется с ростом λ от $\approx 0.2 < \Gamma < 9.3$ при $\lambda = 1$ до $0.16 < \Gamma < 13.5$ при $\lambda = 5$.

С практической точки зрения наибольший интерес представляет изучение зависимости критического напря-

жения τ_c в области $\Gamma < 1$, поскольку для упрочнения керамики обычно выбирают волокна с более высокими значениями упругих констант (здесь не рассматривается случай металлических волокон, используемых для пластификации керамики). В области $\Gamma < \Gamma_{c1}$, где $\tau_c = \tau'(\Gamma, \alpha)$, можно оценить наименьшее из возможных значений τ_c . Не принимая в расчет изменение коэффициентов Пуассона, которое на практике оказывается незначительным, получаем, что при $\nu_1 = \nu_2 = \nu$ критическое напряжение τ_c определяется простой формулой

$$\tau_{c}(\Gamma < \Gamma_{c1}, \nu_{1} = \nu_{2} = \nu) = \frac{D_{1}}{2} \left[1 + \Gamma + \pi (1 - \nu)(1 - \alpha) \right].$$
(20)

Тогда если поверхностная энергия границы раздела волокна и матрицы настолько велика, что приближается



Рис. 6. Зависимость напряжений τ' и τ'' от отношения модулей сдвига Γ для разных значений безразмерной толщины стенки волокна $\lambda = h/b = 1, 2, 3, 4, 5$ (кривые снизу вверх) в области малых (*a*) и больших (*b*) значений Γ . Сплошные линии соответствуют критическому напряжения $\tau_c = \max{\tau', \tau''}$. Значения напряжений даны в единицах D_1 .

к энергии свободной поверхности волокна $(\alpha \to 1)$, то, пренебрегая также величиной Γ по сравнению с единицей, получаем оценку для наименьшего критического напряжения: $\tau_{c,\min} \approx D_1/2 = G_1[8\pi(1-\nu)]$, что дает примерно $G_1/18$ при $\nu = 0.3$. Если же оставить прежнюю оценку $\alpha \approx 0.5$, то величины в квадратных скобках выражения (20) дают в сумме примерно 2, и $\tau_c \approx D_1 = G_1/[4\pi(1-\nu)]$, т.е. примерно $G_1/9$. Таким образом, при $\Gamma < \Gamma_{c1}$ можно считать, что критическое напряжение τ_c составляет величину от $G_1/18$ до $G_1/9$ при $\nu = 0.3$.

Полученные оценки критического напряжения τ_c представляются существенно завышенными. Например, первые два слагаемых в квадратных скобках формулы (20) отражают вклад дислокационного ядра. При учете этого вклада использовалась стандартная оценка для энергии ядра краевой дислокации в бесконечной среде [29]. Вблизи от свободных поверхностей трещины и волокна (здесь при $\xi = 1$, т.е. примерно на межатомном расстоянии от поверхности трещины) энергия дислокационного ядра должна быть существенно меньше. Аналогична ситуация и с третьим слагаемым в квадратных скобках формулы (20), которое возникает при учете изменения поверхностной энергии. Здесь для описания удельной энергии свободной поверхности волокна использовалась очень грубая оценка $G_1b/8$. Таким образом, полученные оценки можно расценивать только как ориентировочные.

6. Заключение

Таким образом, проскальзывание полых волокон (в частности, углеродных нанотрубок) вблизи трещин в керамических нанокомпозитах может происходить путем зарождения и скольжения призматических круговых дислокационных петель по границе между волокном и матрицей. Согласно результатам настоящей работы, зарождение и скольжение таких петель становятся энергетически выгодными и реализуются без преодоления энергетического барьера при достаточно высоких, но реальных критических значениях локальных сдвиговых напряжений вблизи берегов растущей трещины. Показано, что такое критическое напряжение увеличивается с ростом отношения модулей сдвига матрицы и волокна, а в широком интервале изменения этого отношения с ростом толщины стенки волокна. Предложенный дислокационный механизм проскальзывания полых волокон приводит к значительной релаксации упругой энергии вблизи трещин и торможению их роста в керамических нанокомпозитах, что должно значительно повышать трещиностойкость нанокерамики. В частности, действие этого механизма способно внести существенный вклад в экспериментально наблюдаемое повышение трещиностойкости керамических нанокомпозитов, упрочненных углеродными нанотрубками, по сравнению с их аналогами, которые не содержат таких нанотрубок [13,16,17].

Список литературы

- [1] В.А. Поздняков, А.М. Глезер. ФТТ 47, 793 (2005).
- [2] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. ФТТ 48, 1410 (2006).
- [3] Г.А. Малыгин. ФТТ 49, 961 (2007).
- [4] С.В. Бобылев, Н.Ф. Морозов, И.А. Овидько. ФТТ 49, 1044 (2007).
- [5] В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Н.Н. Песчанская, А.Е. Романов, Б.И. Смирнов, И.А. Александров, Н.А. Еникеев, В.У. Казыханов, А.А. Назаров. ФТТ 49, 644 (2007).
- [6] Г.А. Малыгин. ФТТ 49, 2161 (2007).
- [7] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, Н.В. Скиба. ФТТ 49, 252 (2007).
- [8] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Rev. Adv. Mater. Sci. 16, 1 (2007).
- [9] В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев, V. Sklenicka, I. Saxl. ФТТ 49, 1787 (2007).
- [10] О.В. Клявин, В.И. Николаев, Б.И. Смирнов, Л.В. Хабарин, Ю.М. Чернов, В.В. Шпейзман. ФТТ 49, 1590 (2007).
- [11] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Plastic deformation in nanocrystalline materials. Springer, Berlin (2004). 187 p.
- [12] J.A. Vreeling, V. Ocelik, G.A. Hamstra, Y.T. Pei, J.Th.M. De Hosson. Scr. Mater. 42, 589 (2000).
- [13] G.-D. Zhan, J.D. Kuntz, J. Wan, A.K. Mukherjee. Nature Mater. 2, 38 (2002).
- [14] S. Veprek. Rev. Adv. Mater. Sci. 5, 6 (2003).
- [15] G.-D. Zhan, J.D. Kuntz, A.K. Mukherjee. MRS Bull. 29, 22 (2004).
- [16] G.-D. Zhan, J.D. Kuntz, A.K. Mukherjee. Int. J. Appl. Ceram. Technol. 1, 161 (2004).
- [17] G.-D. Zhan, A.K. Mukherjee. Rev. Adv. Mater. Sci. 10, 185 (2005).
- [18] S. Zhang, D. Sun, Y. Fu, Y.T. Pei, J.Th.M. De Hosson. Surf. Coat. Technol. 200, 1530 (2005).
- [19] D. Galvan, Y.T. Pei, J.Th.M. De Hosson. Surf. Coat. Technol. 200, 6718 (2005).
- [20] J. Wan, R.-G. Duan, M.J. Gasch, A.K. Mukherjee. J. Am. Ceram. Soc. 89, 274 (2006).
- [21] A. Akbari, J.P. Riviere, C. Templier, E. Le Bourhis, G. Abadias. Rev. Adv. Mater. Sci. 15, 111 (2007).
- [22] D.B. Marshall, B.N. Cox, A.G. Evans. Acta Metall. 33, 2013 (1985).
- [23] S. Nemat-Nasser, M. Hori. Mech. Mater. 6, 245 (1987).
- [24] М.А. Греков, Н.Ф. Морозов. ПММ 70, 1054 (2006).
- [25] A.G. Evans, D.B. Marshall. Acta Metall. 37, 2567 (1989).
- [26] L.S. Sigl, A.G. Evans. Mech. Mater. 8, 1 (1989).
- [27] М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов. Препринт ФТИ АН СССР № 1407. Л. (1989). 64 с.
- [28] M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. Phys. Status Solidi A 125, 107 (1991).
- [29] J.P. Hirth, J. Lothe. Theory of dislocations. Wiley, N.Y. (1982). 857 p.