

01;05.1

## **Оценка механических свойств межзеренной фазы в нанокристаллических и субмикроструктурных материалах с использованием модели упругой многослойной периодической среды**

© А.Г. Слепнёв

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана  
E-mail: andslepnev@yandex.ru

*В окончательной редакции 30 марта 2007 г.*

Указано на некорректность использования моделей Ройсса (Reuss) и Фойгта (Voigt) для определения механических характеристик межзеренной фазы в нанокристаллических и субмикроструктурных материалах по измеренным скоростям звука в них. Предложена более общая методика оценки, основанная на модели распространения упругих волн в многослойной среде.

PACS: 62.25.+g, 81.70.-q, 68.35.Gy, \*43.40.Lc

Субмикрокристаллические (СМК) и нанокристаллические (НК) материалы обладают рядом интересных свойств (механических, теплофизических, магнитных, электрических), которые во многом определяются свойствами межзеренной фазы, объем которой может достигать 50% (для НК материалов) в объеме материала [1]. Толщина и свойства межзеренной фазы зависят от методов получения СМК или НК материалов. Изучение свойств межзеренной фазы необходимо для понимания ее структуры, а также для возможности предсказания и моделирования свойств СМК и НК материалов.

Методы акустического контроля широко применяются для изучения механических свойств материалов. По измеренным скоростям звука восстанавливают упругие модули исследуемых образцов. Целью данной работы является оценка механических свойств межзеренной фазы в НК и СМК материалах по измеренным скоростям звука. Последователь-

ность исследования в подобных работах, как правило, следующая:

- а) измеряются скорости звуковых волн в образце;
- б) на базе полученных скоростей рассчитываются усредненные модули упругости по известным соотношениям:

$$E = \frac{\rho c_t^2(3c_l^2 - 4c_t^2)}{c_l^2 - c_t^2}, \quad (1)$$

$$G = \rho c_t^2, \quad (2)$$

где  $E$  — модуль Юнга,  $G$  — модуль сдвига,  $c_l$  — скорость продольных звуковых волн,  $c_t$  — скорость поперечных звуковых волн,  $\rho$  — плотность;

в) с помощью моделей СМК и НК материалов находят механические модули межзеренной фазы. Наиболее простыми и часто используемыми моделями являются: модель Ройсса [2,3]:

$$\frac{1}{M} = \frac{1 - \eta}{M_1} + \frac{\eta}{M_2}, \quad (3)$$

модель Фойгта [3]:

$$M = (1 - \eta)M_1 + \eta M_2, \quad (4)$$

где  $\eta$  — объемная доля межзеренной фазы,  $M_1$  — упругий модуль зерна,  $M_2$  — упругий модуль межзеренной фазы. Часто пользуются моделью Хилла (Hill) [3], в которой берутся средние модули от модулей Фойгта и Ройсса. Модель Ройсса описывает статику многослойного композиционного материала под действием силы, перпендикулярной плоскостям слоев. Модель Фойгта описывает статику многослойного материала под действием силы, направленной вдоль слоев. Эти модели обладают двумя недостатками. Первый заключается в пренебрежении разницей в плотностях составляющих композиционного материала. Вторым заключается в пренебрежении разницей в коэффициентах Пуассона составляющих.

Действительно, связь модулей сдвига  $G_1$  и  $G_2$  слоев композиционного материала с усредненным модулем сдвига  $G$ :

для модели Ройсса

$$\frac{1}{G} = \frac{1 - \eta}{G_1} + \frac{\eta}{G_2}, \quad (5)$$

для модели Фойгта

$$G = (1 - \eta)G_1 + \eta G_2. \quad (6)$$

Модуль сдвига связан с модулем Юнга  $E$  известным соотношением:

$$E = 2(1 + \nu)G, \quad (7)$$

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

Из выражений (5) и (6) можно получить выражения для модуля Юнга только тогда, когда коэффициенты Пуассона составляющих 1 и 2 одинаковы. Два указанных недостатка можно обойти, используя модель распространения упругих волн в многослойной среде [4]. В многослойной среде максимальные скорости соответствуют распространению волн вдоль слоев (общий случай модели Фойгта), а минимальные — перпендикулярно слоям (общий случай модели Ройсса). НК и СМК материалы — существенно более сложные объекты, но, вероятно, скорости распространения звука в них будут лежать между скоростями звука вдоль и поперек слоев в многослойной системе. Далее предположим, что из-за наличия большого количества границ зерен скорость распространения упругих волн в НК и СМК материалах близка к скорости распространения упругих волн в многослойных системах перпендикулярно слоям. Скорости распространения волн перпендикулярно слоям в многослойной структуре [4]:

скорость продольных волн

$$c_{ZZ} = \sqrt{\frac{(1 + \eta)^2 c_{T1}^2}{(1 + \frac{\eta}{r\xi_L})(1 + \eta r)}}, \quad (8)$$

скорость поперечных волн

$$c_{XZ} = \sqrt{\frac{(1 + \eta)^2 c_{T1}^2}{(1 + \frac{\eta}{\xi_{TT}})(1 + r\eta)}}, \quad (9)$$

где введены обозначения:  $\eta = h_2/h_1$ ,  $r = \rho_2/\rho_1$ ,  $\xi_L = c_{L2}^2/c_{L1}^2$ ,  $\xi_T = c_{T2}^2/c_{T1}^2$ ,  $h_1$  — средний размер зерна (слоя 1 в многослойной системе),  $h_2$  — толщина межзеренного пространства (слоя 2),  $\rho_1$  — плотность материала зерна,  $\rho_2$  — плотность межзеренного пространства,  $c_{L2}$  — скорость продольного звука в материале межзеренного пространства,  $c_{T2}$  — скорость поперечного звука в материале межзеренного пространства,  $c_{L1}$  — скорость продольного звука в материале зерна,  $c_{T1}$  — скорость поперечного звука в материале зерна. Из выражений (8) и (9) получаются выражения модели Ройсса (3), если положить  $r = 1$  и одинаковый

коэффициент Пуассона для составляющих 1 и 2. Зная величины  $r$ ,  $\eta$ ,  $\xi_{ZZ} = c_{ZZ}^2/c_{11}^2$ ,  $\xi_{XZ} = c_{XZ}^2/c_{11}^2$ , можно определить отношение квадратов скоростей звука в межзеренной фазе и в зерне:

$$\xi_L = \frac{\xi_{ZZ}\eta(1+\eta r)}{(1+\eta)^2 r - \xi_{ZZ}r(1+\eta r)}, \quad (10)$$

$$\xi_T = \frac{\xi_{XZ}\eta(1+\eta r)}{(1+\eta)^2 r - \xi_{XZ}r(1+\eta r)}. \quad (11)$$

Оценив величины  $\xi_L$  и  $\xi_T$ , можно найти коэффициент Пуассона для межзеренной фазы:

$$v_2 = \frac{2\frac{\xi_T}{\xi_L}\xi_1 - 1}{2\left(\frac{\xi_T}{\xi_L}\xi_1 - 1\right)}, \quad (12)$$

где  $\xi_1 = c_{11}^2/c_{11}^2$ ,  $v_1$  — коэффициент Пуассона зерна. Зная коэффициент Пуассона, можно оценить отношение модулей упругости межзеренной фазы к модулям упругости зерна:

отношение модулей сдвига

$$\frac{G_2}{G_1} = r\xi_T,$$

отношение модулей Юнга

$$\frac{E_2}{E_1} = r\xi_T \frac{1+v_2}{1+v_1}.$$

В качестве данных для расчета используем значения скоростей звука, полученных экспериментально [2,3].

В работе [2] исследовались упругие свойства СМК медных образцов, полученных методом равноканального углового прессования, средний размер зерен был  $h_1 = 0.2 \mu\text{m}$ , толщина межзеренной фазы  $h_2 = 6 \text{ nm}$  ( $\eta = 0.033$ ). Скорость продольных волн была  $c_{ZZ} = 4660 \text{ m/s}$ , поперечных  $c_{XZ} = 2240 \text{ m/s}$ . После отжига (размер зерен увеличивался, толщина межзеренной фазы стремилась к нулю) скорости стремились к значениям  $c_{11} = 4770 \text{ m/s}$  и  $c_{11} = 2380 \text{ m/s}$ . Плотности СМК и отожженного образцов были равны, что дает возможность пренебречь изменением плотности ( $r = 1$ ). Таким образом, для  $\eta = 0.033$ ,  $r = 1$  и  $v_1 = 0.34$  получаем следующие величины:  $\xi_L = 0.379$ ,  $\xi_T = 0.184$ ,

$\nu_2 = 0.431$ ,  $G_2/G_1 = 0.184$ ,  $E_2/E_1 = 0.197$ . В приближении Ройсса [2] отношения  $G_2/G_1 = 0.225$ ,  $E_2/E_1 = 0.22$ . Разница в полученных данных для модулей Юнга составляет  $\sim 11\%$ , для модулей сдвига  $\sim 22\%$ .

В работе [3] исследовались НК образцы керамики MgO, полученные прессованием порошков. Образцы с наименьшей пористостью имели размер зерен  $h_1 = 41$  nm, толщину межзеренной фазы  $h_2 = 1$  nm ( $\eta = 0.024$ ). Эти образцы имели плотность  $\rho = 3533$  kg/m<sup>3</sup>, что составляет 99% от плотности кристаллов MgO и приводит к соотношению  $r = 0.86$ . Скорость продольных волн была  $c_{ZZ} = 9040$  m/s, поперечных  $c_{XZ} = 5681$  m/s. После отжига  $c_{11} = 9537$  m/s и  $c_{11} = 5948$  m/s. Таким образом, для  $\eta = 0.024$ ,  $r = 0.93$  и  $\nu_1 = 0.178$  получаем следующие величины:  $\xi_L = 0.185$ ,  $\xi_T = 0.21$ ,  $\nu_2 = 0.103$ ,  $G_2/G_1 = 0.21$ ,  $E_2/E_1 = 0.183$ . В приближении Ройсса [3] отношение  $G_2/G_1 = 0.148$ ,  $E_2/E_1 = 0.144$ . Разница в полученных данных для модулей Юнга составляет  $\sim 21\%$ , для модулей сдвига  $\sim 29\%$ .

#### Выводы.

Предложен метод оценки механических свойств межзеренной фазы, основанный на модели распространения упругих волн в многослойной системе и учитывающий разницу в коэффициентах Пуассона и плотностях зерна и межзеренной фазы.

С помощью предложенного метода получены упругие модули и коэффициент Пуассона межзеренной фазы по экспериментально полученным скоростям звука [2,3].

Для более полной картины следует вычислять отношения  $E'_2/E_1$  и  $G'_2/G_1$  так же, как и для модели распространения упругих волн вдоль слоистого композита. Реальные значения упругих модулей межзеренной фазы, вероятно, лежат в интервалах  $(E'_1, E_1)$  и  $(G'_1, G_1)$ .

## Список литературы

- [1] Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. М.: Физматлит, 2001. 224 с.
- [2] Ахмадеев Н.А., Валиев Р.З., Кобелев Р.Р. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 12. С. 3155.
- [3] Yeheskel O., Chaim R., Shen Z. // J. Mater. Res. 2005. V. 20. N 3. P. 719.
- [4] Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973. 343 с.