

Прогнозирование механических свойств материалов системы $\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$ с учетом влияния их межкомпонентных границ

Д. А. Закарян¹, В. В. Каргузов, А. В. Хачатрян

Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины, Киев, Украина

¹ zakarian.d.a@gmail.com

С помощью метода априорного псевдопотенциала вычислены теоретическая прочность системы $\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$ и максимальная деформация с учетом интерфейса компонент эвтектического состава. Получены зависимость теоретической прочности от концентрации компонент, а также локальный максимум прочности для композита в точке эвтектики.

Ключевые слова: эвтектика, априорный псевдопотенциал, межкомпонентные границы, теоретическая прочность, деформация.

Введение. Представление об эвтектиках, как о простой механической смеси мелких кристаллов, давало основание считать, что механические и некоторые другие свойства сплавов, относящихся по составу к двухфазной области эвтектических систем, должны изменяться аддитивно с изменением концентрации. Согласно известной схеме [1] изотерма состав–механические свойства для этих сплавов должна выражаться прямой линией, и эвтектическая точка на такой изотерме никак не выделяется. Однако многие экспериментальные данные противоречат такой схеме. Общей закономерностью является нелинейная зависимость механических свойств от состава двухфазного сплава, а аддитивность может появляться лишь при определенных условиях. В работах [2–4] выполнены исследования межатомных взаимодействий на поверхности раздела эвтектических фаз. Установлено, что энергетические состояния атомов в граничных слоях и в объеме эвтектических фаз существенно различаются. Эти данные подтверждают, что эвтектики представляют собой не механическую смесь фаз, а единую систему взаимодействующих фаз.

Квазибинарный эвтектический композит – это система, состоящая из двух чистых компонентов (при отсутствии их взаиморастворимости), а их интерфейс (граница контакта) может быть когерентным, полукogerентным или аморфным в зависимости от соотношения параметров кристаллических решеток.

Если известен общий принцип вычисления теоретической прочности для случаев одноосного растяжения через энергии системы для чистых компонентов, то задача ее определения является достаточно неоднозначной и сложной для композитов с точки зрения учета влияния интерфейса компонент.

Цель данного исследования – оценка механических характеристик композита ($\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$) с учетом влияния интерфейса компонент методом априорного псевдопотенциала.

Методы исследования, вычислительный эксперимент и обсуждение результатов. Определение полной энергии сплава в расчете на одну молекулу в рамках метода псевдопотенциалов основано на суммировании потенциалов парных межмолекулярных взаимодействий [5].

Если концентрацию компонента A (матрица LaB_6) обозначим C , то для энергии системы из двух компонентов можно записать

$$U = C^2 U_{AA} + (1 - C)^2 U_{BB} + 2C(1 - C) U_{AB}. \quad (1)$$

Здесь

$$C^2 U_{AA} = \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j} \Phi_{AA}(R_{ij}); \quad (2)$$

$$(1-C)^2 U_{BB} = \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j} \Phi_{BB}(R_{ij}); \quad (3)$$

$$2C(1-C)U_{AB} = \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j} \Phi_{AB}(R_{ij}), \quad (4)$$

где Φ_{AA} , Φ_{BB} , Φ_{AB} – потенциалы взаимодействия между указанными компонентами [6].

Предполагается, что оба сокристалла являются идеальными, и в первом компоненте имеются связи $A-A$, во втором (упрочнитель ZrB_2) – $B-B$, на поверхности раздела – $A-B$. Тогда соотношение (1) можно представить в виде

$$U = C^2 U_{AA} + (1-C)^2 U_{BB} + 2C(1-C)U_{AB} = C^2 U_{AA}^* + (1-C)^2 U_{BB}^*, \quad (5)$$

где

$$U_{AA}^* = U_{AA} + \frac{1-C}{C} U_{AB}; \quad U_{BB}^* = U_{BB} + \frac{C}{1-C} U_{AB}. \quad (6)$$

Напряжение вдоль оси z определяется из соотношения [6]

$$\sigma_z = \frac{1}{S_i d} \frac{\partial U_{ii}(d)}{\partial e_z}, \quad (7)$$

где e_z – относительная деформация; U_{ii} соответствует значениям U_{AA} или U_{BB} ; d – параметр кристаллической решетки по направлению к оси деформации; S_i – площадь атомной плоскости в кристаллической решетке, перпендикулярной к оси деформации.

Для определения физико-механических характеристик композита необходимо найти зависимость энергии электрон-ионной системы от параметра ее кристаллической решетки. Это требует знания общего параметра решетки для квазибинарного эвтектического композита. Для решения этой задачи введем понятие “виртуальной” ячейки интерфейса. Объем элементарной ячейки, который соответствует составу данного композита, вычисляется как $\Omega = C\Omega_A + (1-C)\Omega_B$. Тогда система имеет общий параметр решетки, что позволяет теоретическую прочность вычислять по обычной схеме.

Если виртуальный кристалл представить как смесь двух компонентов, то полную энергию системы можно определить по методике, принятой для сплавов типа замещения.

Вычислим теоретическую прочность при одноосном растяжении виртуального кристалла, полагая, что направление деформации параллельно оси деформации для чистых компонентов. После определения прочности при одноосных деформациях (направление деформации фиксировано и совпадает с направлением оси волокна) отделяем вклад от члена U_{AB} (той части, которая отвечает за взаимодействие связи $A-B$). В результате получим следующие слагаемые:

$$\sigma_A = \frac{1}{d_A S_A} \frac{\partial U_{AA}(d_A)}{\partial e_z}; \quad \sigma_B = \frac{1}{d_B S_B} \frac{\partial U_{BB}(d_B)}{\partial e_z}; \quad \sigma_{AB} = \frac{1}{d_V S_V} \frac{\partial U_{AB}(d_V)}{\partial e_z}. \quad (8)$$

Здесь σ_A , σ_B – теоретическая прочность компонент с учетом их кристаллической решетки; d_A , d_B , d_V – параметры элементарных ячеек A , B компонентов и виртуальной ячейки по направлению к оси деформации; S_A , S_B , S_V – площади атомных плоскостей, перпендикулярных к оси деформации в соответствующих ячейках.

Эффективное взаимодействие между элементами $A-A$, с учетом влияния интерфейса $A-B$, можно представить как первое слагаемое в (5), а эффективное взаимодействие между $B-B$ – как второе слагаемое.

Соответствующие теоретические прочности будут:

$$\sigma_A^* = \left[\frac{1}{d_A S_A} \frac{\partial U_{AA}(d_A)}{\partial e_z} + \frac{1-C}{C} \frac{1}{d_V S_V} \frac{\partial U_{AB}(d_V)}{\partial e_z} \right] = \sigma_A + \frac{1-C}{C} \sigma_{AB}; \quad (9)$$

$$\sigma_B^* = \left[\frac{1}{d_B S_B} \frac{\partial U_{BB}(d_B)}{\partial e_z} + \frac{C}{1-C} \frac{1}{d_V S_V} \frac{\partial U_{AB}(d_V)}{\partial e_z} \right] = \sigma_B + \frac{C}{1-C} \sigma_{AB}. \quad (10)$$

По правилу смесей теоретическая прочность квазибинарных систем без учета влияния интерфейса компонент будет

$$\sigma_K = \delta_A \sigma_A + \delta_B \sigma_B, \quad (11)$$

с учетом влияния интерфейса –

$$\sigma_K^* = \delta_A \sigma_A^* + \delta_B \sigma_B^*, \quad (12)$$

где δ_A , δ_B – объемные доли эвтектических компонентов в системе $\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$, $\delta_A = 0,837$, $\delta_B = 0,163$ [4].

Результаты вычислительного эксперимента представлены в табл. 1, 2 и на рисунке. Рисунок иллюстрирует функциональные зависимости прочности от деформации для компонент и композита, $\sigma_i(\delta_{\max})_B$ – прочность матрицы при максимальной деформации диборида, $\sigma_i(\delta_{\max}^*)_B$ – та же прочность, но с учетом влияния интерфейса. Максимальная деформация выбирается исходя из диаграммы напряжение–деформация для каждого компонента.

Т а б л и ц а 1

Значения максимальной деформации и теоретической прочности (ГПа) для компонент и композита без учета добавочного члена (ε_{\max} , σ_{\max}) и с учетом (ε_{\max}^* , σ_{\max}^*)

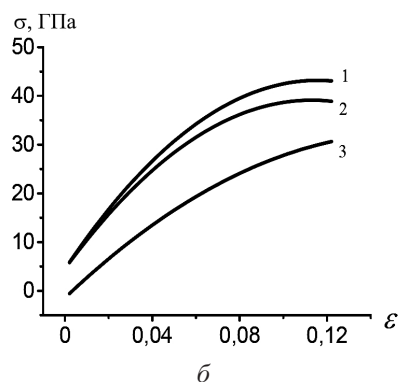
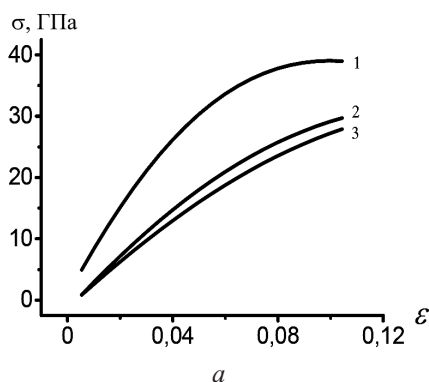
Кристалл	ε_{\max}	σ_{\max}	$\sigma_i(\varepsilon_{\max})_B$	ε_{\max}^*	σ_{\max}^*
ZrB ₂	0,099	39,060	–	0,116	43,170
LaB ₆	0,160	31,589	27,15	–	–
LaB ₆ -ZrB ₂	0,099	29,075	–	0,116	32,209

Из сравнения результатов расчетов теоретической прочности композита $\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$, полученных из вычислительного эксперимента с применением правила “меха-

Т а б л и ц а 2

Максимальная деформация и теоретическая прочность композита (ГПа) в зависимости от концентрации компонент ($C_B = 1 - C$ – концентрация ZrB_2)

C_B	ε_{\max}	σ_{\max}
0,20	0,1181	31,457
0,25	0,1171	31,560
0,28	0,1165	31,860
0,30	0,1160	32,027
0,31	0,1155	31,999
0,32	0,1150	31,999
0,35	0,1140	32,450
0,50	0,1110	33,703



Зависимость теоретической прочности от деформации, рассчитанная по (7), (11) – а и по (9), (10), (12) – б: 1 – ZrB_2 ; 2 – $\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$; 3 – LaB_6 .

нической смеси” (рисунок,а) и с учетом влияния интерфейса компонент (рисунок,б), следует:

1) в первом случае характерные зависимости прочности от деформации композита и матрицы (LaB_6) имеют почти одинаковый вид;

2) во втором случае диаграмма зависимости прочности от деформации композита отличается как от зависимости, характерной для матрицы (LaB_6), так и от зависимости для укрепляющей фазы (ZrB_2). Учет влияния интерфейса в расчетах приводит к увеличению значений теоретической прочности композита.

Максимальная деформация (ε_{\max}) составляет 0,099 для ZrB_2 и 0,16 для LaB_6 без учета добавочного члена, а с учетом влияния интерфейса компонент ее значение увеличивается до 0,1161 в случае ZrB_2 и уменьшается для LaB_6 (табл. 1).

Если считать, что максимальная прочность чистого компонента А (матрица) составляет 31,589 ГПа, то прочность композита с учетом влияния интерфейса будет равняться 32,209 ГПа. С помощью формул (9), (10), (12) вычисляются теоретическая прочность и соответствующая деформация в зависимости от концентрации компонент в системе $\text{LaB}_6\text{-ZrB}_2$. В табл. 2 приведены результаты вычислений максимальной прочности композитов до-, за- и эвтектического составов.

С увеличением концентрации ZrB_2 максимальная деформация композита уменьшается, при этом увеличивается прочность. При $C_B = 0,3$ прочность композита будет

максимальная в интервале $0 < C_B < 0,33$. Дальнейший рост концентрации ZrB_2 приводит к постепенному повышению прочности композита, и ее максимальное значение достигается при $C_B = 1$, что, естественно, происходит благодаря свойствам кристалла.

В вычислительном эксперименте учет взаимодействия компонент (в композитах) на их интерфейсе приводит к увеличению расчетного значения максимальной деформации тугоплавкого компонента и теоретической прочности композита. Такой подход позволяет более реалистично описать физико-механические свойства эвтектических композитов.

Наличие локального максимума прочности для композита в точке эвтектики является подтверждением того, что для эвтектики характерны не только минимальная температура образования, но и улучшенные механические свойства.

Выводы

1. Получены соотношения, учитывающие влияние интерфейса на механические свойства композитов, вычислены теоретическая прочность системы LaB_6-ZrB_2 и максимальная возможная деформация.

2. Получена зависимость теоретической прочности от концентрации компонент и зафиксировано наличие локального максимума теоретической прочности для композита в точке эвтектики.

Резюме

За допомогою методу априорного псевдопотенціалу обчислено теоретичну міцність системи LaB_6-ZrB_2 і максимальну деформацію з урахуванням інтерфейсу компонент евтектичного складу. Отримано залежність теоретичної міцності від концентрації компонент та локальний максимум міцності для композита в точці евтектики.

1. *Залкин В. М.* Природа эвтектических сплавов и эффект контактного плавления. – М.: Металлургия, 1980. – 146 с.
2. *Кахраманов К. Ш., Дидык В. В.* Исследование природы межфазного взаимодействия в эвтектике // *Металлофизика*. – 1981. – 3, № 1. – С. 31–39.
3. *Дутчак Я. И.* Рентгеноспектральное исследование электронной структуры некоторых простых эвтектических сплавов // *Укр. физ. журн.* – 1977. – 22, № 5. – С. 822–828.
4. *Падерно В. Н., Падерно Ю. Б., Мартыненко А. Н., Филиппов В. Б.* Структурный аспект формирования волокнистой вязкой керамики на основе боридов // *Электронная микроскопия и прочность материалов*. – 1995. – вып. 11. – С. 95–112.
5. *Zakaryan D., Kartuzov V., Kartuzov E., et al.* Calculation of composition in LaB_6-TiB_2 , LaB_6-ZrB_2 eutectics by means of pseudopotential method // *J. Eur. Ceram. Soc.* – 2011. – 31, No. 7. – P. 1305–1308.
6. *Закарян Д. А., Картузов В. В., Хачатрян А. В.* Прочностные характеристики материалов в системе LaB_6-MeB_2 (Me–Ti, Zr): Тр. Ин-та проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины. “Моделирование в материаловедении. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении”. – 2013. – Вып. 15. – С. 46–49.

Поступила 10. 01. 2015