

Численный анализ механизмов деформации и разрушения материалов с покрытиями на мезоуровне*

Р. Р. БАЛОХОНОВ, В.А. РОМАНОВА, Р.А. БАКЕЕВ, Е.А. ШВАБ
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
e-mail: rusy@ispms.tsc.ru

В работе исследуются процессы деформации и разрушения стали с боридным покрытием. Краевая динамическая задача решается численно методом конечных разностей в постановке плоской деформации. Для описания механической реакции стальной основы и боридного покрытия используются релаксационное определяющее уравнение на основе дислокационных механизмов и критерий разрушения типа Губера, соответственно. Проведены серии численных экспериментов растяжения и сжатия материала с покрытием при различных скоростях нагружения. Показано, что прочность материала с покрытием при сжатии экспоненциально возрастает с увеличением скорости деформирования. Исследовано влияние толщины покрытия на прочность композита. Установлено, что величина максимальной концентрации напряжений экспоненциально уменьшается с увеличением толщины покрытия. Данный эффект наблюдается в упругости, усиливается по мере развития пластической деформации в подложке, и на стадии предразрушения может достигать 25%. Даны рекомендации, которые могут быть использованы при выборе оптимальной толщины покрытия.

Введение. Вопросам получения твердых и сверхтвердых покрытий, включая наноструктурные, исследованию их механических, физических и химических свойств посвящено большое количество работ в отечественной и зарубежной литературе, к примеру, обзор [1]. При этом основное внимание уделяется структуре и характеристикам прочности, твердости, жаро- и коррозионной стойкости самих покрытий. Другая важная задача - изучение свойств композита как целого, к примеру, способности материала, имеющего покрытие с определенными физико-механическими свойствами, сопротивляться внешним нагрузкам, включая динамические. Отличительной особенностью поверхностно-упрочненных материалов является наличие границы раздела "основной материал - покрытие". К примеру, технология диффузионного борирования позволяет получать на поверхности материалов высокопрочные покрытия с игольчатым профилем границы раздела, имеющей высокую степень кривизны (рис. 1). Основная цель настоящей работы - исследовать влияние двух факторов: скорости деформирования и толщины покрытия на механическое поведение композита.

Постановка задачи. При моделировании деформации материала с покрытием решается общая система уравнений, включающая законы сохранения массы, количества движения, соотношения для деформаций и определяющие уравнения, характеризующие среду. В данном случае введены модели упруго-пластического поведения стальной подложки и хрупкого разрушения покрытия. Краевая

*Работа выполнена при поддержке Президента РФ (грант МД-202.2011.8), Российского фонда фундаментальных исследований (проект 10-08-00084-а) и Российской академии наук (проект № 23.1).

динамическая задача решается численно методом конечных разностей в постановке плоской деформации. Структура композита и схема нагружения представлена на рис. 1б. Введение структуры материала в качестве начальных данных позволяет ввести масштабный фактор. В расчеты явным образом вводится иерархия неоднородностей структуры на разных уровнях: мезо II - зубья боридов как целые с характерным размером порядка 100 мкм., мезо I - выпуклости и вогнутости границы раздела (10 мкм.) и микро - локальная зона разрушения (1 мкм.). Граничные условия на левой и правой поверхностях моделируют одноосное растяжение композиции в направлении X, а на нижней и верхней - соответствуют условиям симметрии и свободной поверхности, соответственно (рис. 1б).

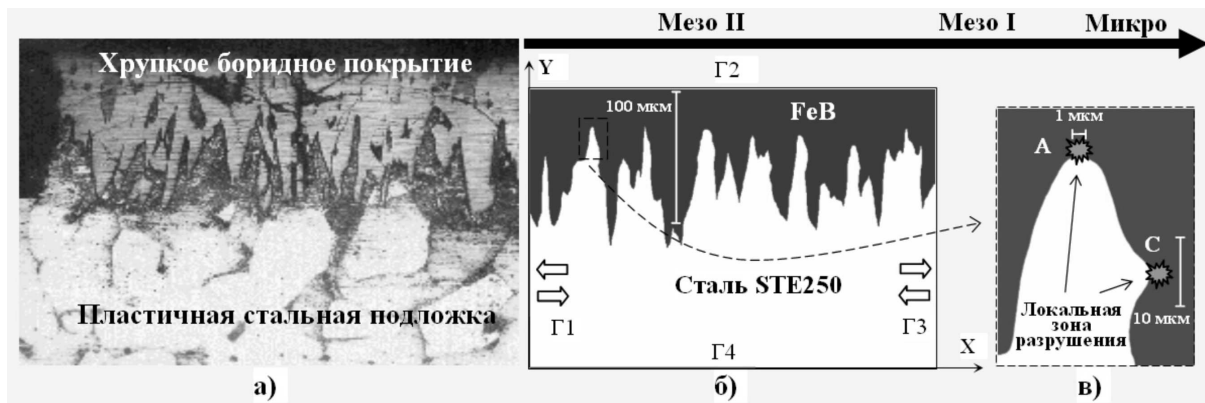


Рис. 1. Микроструктура стали с покрытием и характерные размеры неоднородностей структуры на разных масштабных уровнях: (а) экспериментальная [2] и (б,в) модельная.

Механическая реакция металлов чувствительна к скорости нагружения. Поэтому для описания упруго-пластического поведения стальной основы необходимо применить релаксационное определяющее уравнение. Используя ассоциированный закон течения и термомеханическую модель на основе дислокационных механизмов [3-4] можно получить выражение для скорости пластических сдвигов в виде:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \frac{3}{2} \frac{\dot{\varepsilon}_r^p}{\sigma_u} \exp \left\{ -\frac{G_0}{kT} \left[1 - \left(\frac{\sigma_u - \sigma_a(\varepsilon_u^p)}{\tilde{\sigma}} \right)^d \right]^q \right\} S_{ij}. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\sigma}$ представляет собой напряжение, при котором дислокации преодолевают близкоедействующий барьер без термической активации, G_0 – энергия, достаточная для преодоления барьера только за счет термической активации, $\sigma_a(\varepsilon_u^p)$ – функция изотропного упрочнения стальной основы.

Как будет показано далее, в структурно-неоднородном материале даже в условиях сжатия возникают локальные области, испытывающие растягивающие нагрузки. Именно в данных областях при дальнейшем нагружении происходит разрушение. Для анализа процессов растрескивания покрытия используется энергетический критерий типа Губера. Известно, что этот критерий плохо описывает разрушение хрупких материалов. В настоящей работе показано, что применительно к материалам композиционной структуры, с учетом реальной геометрии границ раздела, когда в материале при любом виде внешней нагрузки явно возникают локальные концентрации растягивающих напряжений, критерий максимальной интенсивности касательных

напряжений может быть применим и правильно описывает разрушение хрупких материалов и композитов. Критерий модифицирован с учетом того, что в опасном состоянии интенсивность касательных напряжений достигает разных предельных значений в зависимости от вида напряженного состояния в данной локальной области (растяжение или сжатие):

$$\sigma_u = \{ C_{ten}, \varepsilon_{kk} > 0; C_{com}, \varepsilon_{kk} < 0. \quad (2)$$

Критерий (2) означает, что находящаяся в условиях объемного растяжения локальная область материала покрытия разрушится (давление и компоненты тензора девиатора напряжений становятся равными нулю), если соответствующее локальное значение интенсивности напряжений достигнет критической прочности на растяжение. Для областей объемного сжатия предельная поверхность разрушения в пространстве напряжений ограничена другой критической величиной, и в данном случае разрушенная область материала не сопротивляется только сдвигу.

Результаты моделирования. В качестве подложки использовалась новая сталь STE250 [4]. Проведены серии численных экспериментов при различных скоростях нагружения однородных образцов. Выбраны параметры модели, которые позволяют хорошо описать экспериментально наблюдаемую реакцию стальной подложки (рис. 2).

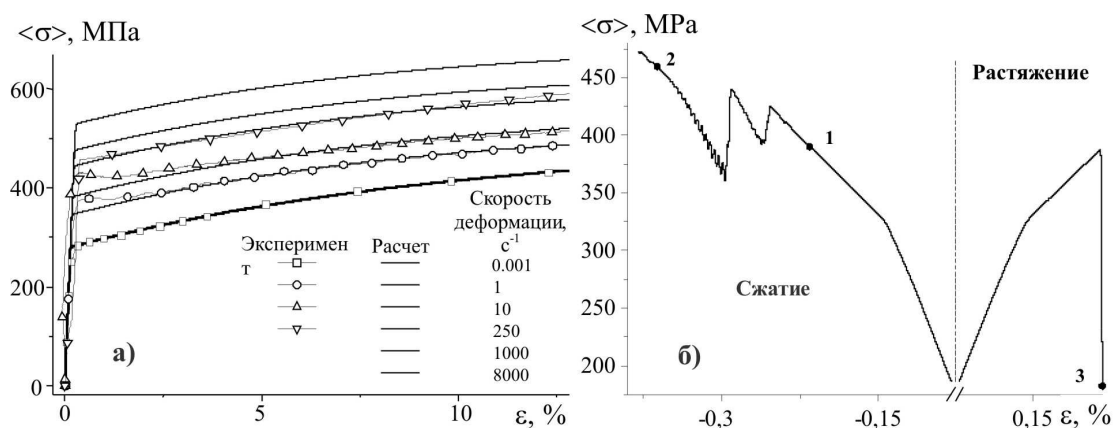


Рис. 2. Кривые течения а) для однородной стальной основы и б) для материала с покрытием при квазистатическом растяжении и сжатии.

На рис. 3 приведены распределения напряжений для случаев игольчатой и плоской границ раздела. Видно, что при сжатии неоднородных материалов возникают локальные области, испытывающие растягивающие нагрузки. Если же материал рассматривается как квазиоднородный с плоской границей, областей растяжения не наблюдается. Формирование областей растяжения связано с кривизной границ раздела, их сложной формой. Именно в таких областях растяжения преимущественно зарождаются трещины при любом виде внешней нагрузки.

Второй важный вывод связан с тем, что области растяжения расположены в разных местах при растяжении и сжатии композита. Если мы изменим направление нагружения и рассмотрим растяжение, то области растяжения и сжатия поменяются местами (+ и -, рис. 3). С этим связан различный характер разрушения покрытия при растяжении и сжатии рис. 4. При внешнем растяжении трещина зарождается вблизи основания зуба бориды в области наиболее мощного концентратора и распространяется

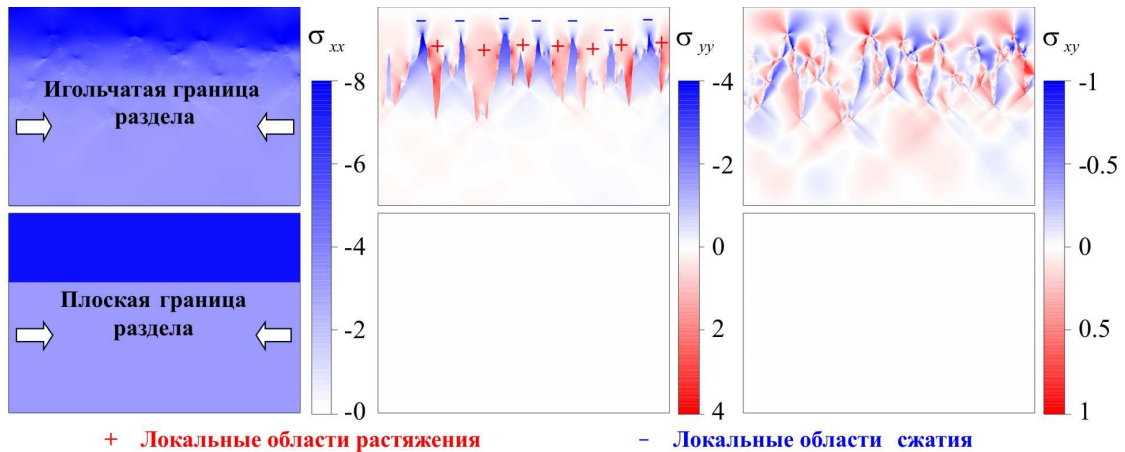


Рис. 3. Распределение компонент тензора напряжений ($\times 10^2$ МПа) при сжатии материала с покрытием (состояние 1, показанное на рис.2б).

в боридном покрытии по направлению к свободной поверхности образца (рис. 4а). Разрушение покрытия по данному сценарию разгружает композицию в направлении приложения нагрузки - на интегральной кривой течения наблюдается ниспадающий участок (рис. 2б).

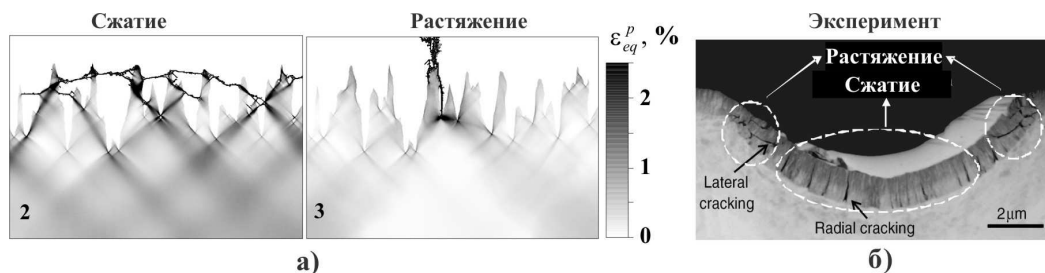


Рис. 4. Характер разрушения при растяжении и сжатии. Эксперимент [5].

Другая картина разрушения наблюдается при внешнем сжатии композиции (рис. 4а). В данном случае растягивающие нагрузки испытывают места, расположенные на боковых гранях зубьев борида (рис. 3). В одной из этих областей, характеризуемой наибольшей кривизной границы раздела, и, соответственно, максимальной концентрацией интенсивности напряжений, возникает первоначальная зона разрушения. Далее трещина распространяется в направлении приложения сжатия, выходит на противоположный участок границы раздела между иглой борида и сталью и останавливается - концентратор напряжений в кончике трещины релаксирует в матрицу в виде полосы локализованного сдвига. При дальнейшем возрастании нагрузки трещины последовательно зарождаются на гранях иголок борида и распространяются в продольном направлении - вдоль оси сжатия. Однако образования магистральной продольной трещины не происходит. Верхний слой покрытия продолжает оставаться в напряженном состоянии и выдерживает нагрузку, в то время как множественное растрескивание иголок борида разгружает композицию в промежуточном подслое. Таким образом, наличие игольчатой структуры, прорастенной в стальную подложку, предотвращает отслоение покрытия. На кривой течения наблюдаются локальные спады усредненного напряжения, общий уровень которого, однако, продолжает расти

и катастрофической потери прочности не происходит (рис. 2). Аналогичный характер растрескивания покрытия наблюдается экспериментально (рис. 4б).

Проведены серии расчетов деформации мезообъема материала с боридным покрытием при растяжении и сжатии в широком диапазоне скоростей нагружения. Установлено, что при сжатии композиции, чем выше скорость деформирования, тем менее интенсивно разрушено покрытие при одной и той же степени полной деформации (рис. 5). Анализ результатов моделирования показал, что такой характер связан с развитым пластическим течением в подложке при сжатии. Момент начала разрушения зависит от величины концентрации напряжений вблизи границы раздела "покрытие-подложка", которая, в свою очередь, определяется разницей механических свойств контактирующих материалов. Чем выше скорость нагружения, тем выше текущее напряжение течения стальной основы, тем меньше разница в механических свойствах между упругим покрытием и пластичной подложкой, тем меньше концентрация напряжений и, соответственно, тем позднее происходит разрушение покрытия. Установлено, что прочность композиции экспоненциально зависит от скорости нагружения (рис. 6а).

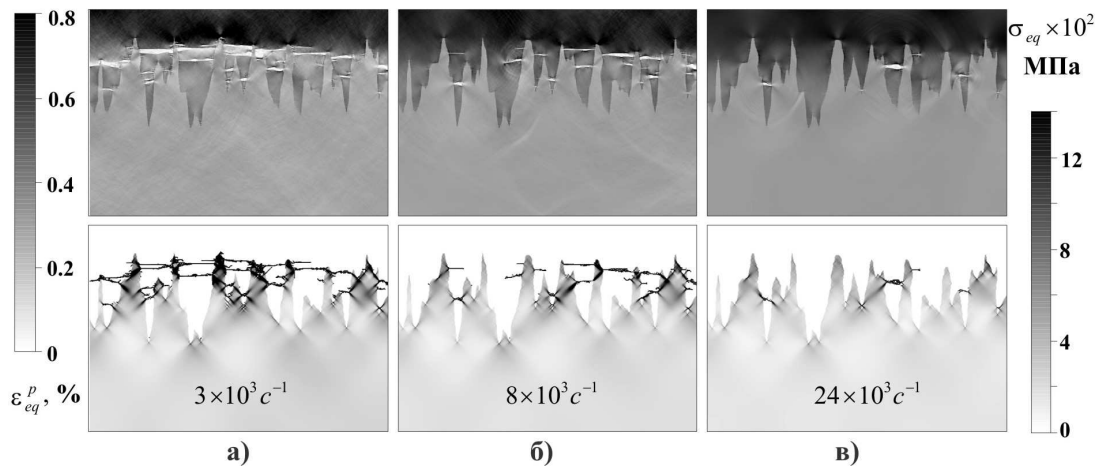


Рис. 5. Разрушение при сжатии с различными скоростями.

Исследовано влияние толщины покрытия на величину концентрации напряжений у границы раздела "покрытие-подложка". Установлено, что с увеличением толщины покрытия прочность композита нелинейно возрастает до некоторого значения, а затем перестает изменяться. Данный эффект наблюдается как на стадии упругого деформирования (0.06%), так и на стадии пластического течения в подложке (рис. 6б).

На рис 6б по оси ординат отложено относительное изменение величины максимальной концентрации напряжений у границы раздела, а по оси абсцисс отношение толщины покрытия к среднему размеру зубьев борида. Данная зависимость инвариантна относительно физических размеров структуры композита, представленного на рис.1 и деформируемого в условиях квазистатического растяжения. Это означает, что для данной структуры и свойств материалов оптимальной является толщина покрытия в $2 \div 2.5$ раза превышающая характерный размер неровности границы раздела "покрытие-подложка". Неровность границы раздела может быть связана с шероховатостью поверхности изделия, на которое наносится покрытие. Этот вывод может быть использован при оптимальном выборе толщины покрытия.

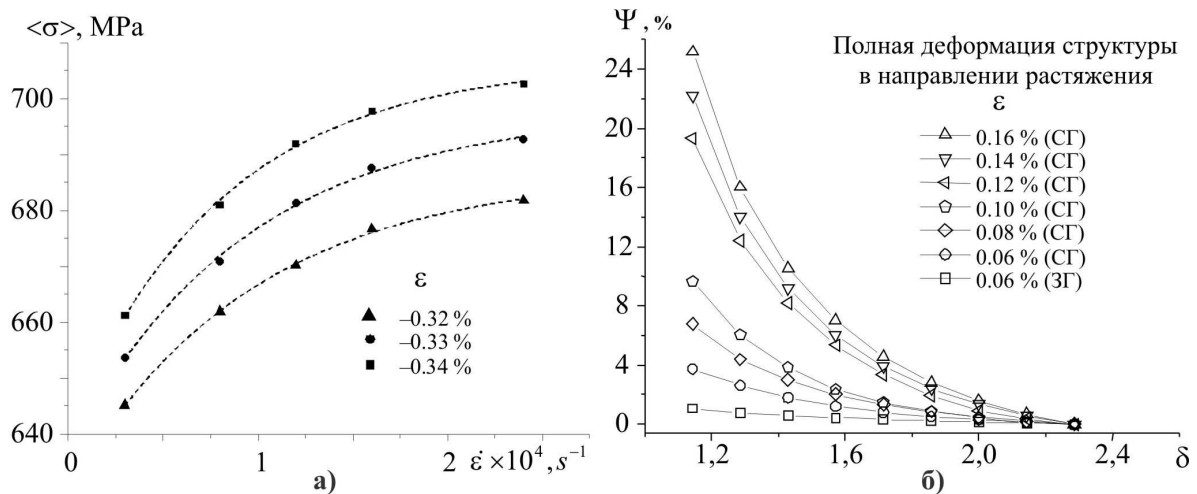


Рис. 6. Прочность композита в зависимости от скорости сжатия (а) и толщины покрытия (б)

Заключение. Результаты моделирования позволяют сделать следующие выводы.

1. При любом виде внешнего нагружения, трещины преимущественно зарождаются в областях растяжения и распространяются под действием растягивающих нагрузок. При растяжении и сжатии трещины зарождаются в различных местах и распространяются в различных направлениях.

2. Прочность композита экспоненциально зависит от скорости нагружения при сжатии, что связано с развитым пластическим течением в стальной подложке, и слабо меняется при растяжении. Чем выше скорость нагружения, тем менее интенсивно разрушено покрытие при сжатии, и тем более интенсивно при растяжении.

3. Для данной структуры и свойств материалов, оптимальной является толщина покрытия в $2 \div 2.5$ раза превышающая характерный размер неровности границы раздела "покрытие-подложка". Неровность границы раздела может быть связана с шероховатостью поверхности изделия, на которое наносится покрытие.

Список литературы

- [1] ПОГРЕВНЯК А.Д., ШПАК А.П., АЗАРЕНКОВ Н.А., БЕРЕСНЕВ В.М. Структура и свойства твердых и сверхтвердых нанокompозитных покрытий // Успехи физических наук. 2009. Т.179, №1. С. 35-64.
- [2] Панин С.В., Коваль А.В., Почивалов Ю.И. Особенности разрушения образцов малоуглеродистой стали с боридными слоями различной толщины при одноосном статическом растяжении // Физическая мезомеханика. 2002. Т.5, №4. С. 85-95.
- [3] Балохонов Р.Р., Романова В.А. Численное моделирование термомеханического поведения сталей с учетом распространения полос Людерса // Прикладная механика и техническая физика. 2007. №5. С. 145-156.
- [4] BALOKHONOV R.R., ROMANOVA V.A., SCHMAUDER S. Finite-element and finite-difference simulations of the mechanical behavior of austenitic steels at different strain rates and temperatures // Mechanics of Materials. 2009. Vol. 41, N 12. P. 1277-1287.
- [5] TILBROOK, M.T., PATON, D.J., XIE, Z., HOFFMAN, M. Microstructural effects on indentation failure mechanisms in TiN coatings: Finite element simulations // Acta Materialia. 2007. Vol. 55, P. 2489-2501.