



Národní konference s mezinárodní účastí
INŽENÝRSKÁ MECHANIKA 2002

13. – 16. 5. 2002, Svatka, Česká republika

**KONSTITUTIVNÍ MODELY TRANSFORMAČNĚ ZPEVNĚNÉ A
TVÁRNÝMI ČÁSTICEMI ZPEVNĚNÉ KERAMIKY PŘI VLIVU
MIKROTRHLIN**

Michal Kotoul¹

Keramické materiály mají řadu výborných užitných vlastností jako je vysoká tvrdost a abrazivost, nízká hustota a tepelná vodivost, ale chybí jim vlastnosti typické pro kovy, tj. tvárnost a houževnatost. Zvýšení houževnatosti se docíluje řadou metod. Mezi nimi významné místo jak z hlediska užitného tak i cenového zaujímají metody založené na distribuci tvárných kovových částic nebo částic stabilizovaného tetragonálního ZrO_2 , kdy se využívá napěťově indukované transformace martenzitického typu. Problematika adekvátního konstitutivního modelování těchto kompozitů je v současné době vysoce aktuální. V referátu je na základě mikromechanického přístupu provedeno srovnání formulace konstitutivního modelu vhodného pro keramické materiály zpevněné tvárnými částicemi a konstitutivního modelu pro transformačně zpevněné keramiky. Dále je diskutován vliv mikrotrhlin na mechanismus zpevnění a výslednou odezvu materiálu.

Konstitutivní modely, mikromechanika, homogenizace, keramika

1 Úvod

Problematika formulování konstitutivních vztahů pro kompozity s keramickou maticí zpevněnou tvárnými částicemi byla námětem autorova referátu (Kotoul, 2000) a později byla podrobně rozvedena v pracích (Kotoul, 2001) a (Kotoul, 2002). Přitom se uvažovaly podmínky cyklického tlakového zatěžování vzhledem k tomu, že zmíněné křehké materiály se přednostně využívají v takových průmyslových aplikacích, kde převážně působí proměnlivá tlaková napětí. Model umožnil vyšetřovat vliv mikrotrhlin iniciovaných v okolí heterogenit, kde mohou vznikat koncentrace tahových napětí i při všestranném tlaku. Ukázalo se, že mikrotrhliny rozhodujícím způsobem ovlivňují kumulaci nepružné deformace při cyklickém zatěžování.

¹Doc. RNDr. Michal Kotoul, DrSc.: Ústav mechaniky těles, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2, 602 00 Brno; tel: +420 5 41142889, fax: +420 5 41142876; E-mail: kotoul@umtn.fme.vutbr.cz

Pro formulaci konstitutivních vztahů byla použita klasická technika vlastních (vnitřních) parametrů vycházející z určité modifikace původního Mori-Tanakova (1973) modelu navržené Tandonem et al. (1986).

Tento příspěvek si klade za cíl využít některých předchozích výsledků pro konstitutivní modelování dvofázové keramiky $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$. Metastabilní tetragonální (t) částice ZrO_2 jsou uloženy v matici Al_2O_3 a vlivem působícího napětí mohou prodělat atermální fázovou transformaci do nízkoteplotní monoklinické (m) fáze. Přitom dochází asi k 4% dilataci a smykovým deformacím, které jsou však vlivem dvojčatění značně menší než v případě transformace volné (tj. nestísňené okolní maticí) částice. Řada experimentálních studií dokládá, že při fázové transformaci současně vznikají mikrotrhliny, které vycházejí z monoklinických částic ZrO_2 do okolní matrice Al_2O_3 . Podle dostupných informací zatím nebyl navržen model fázové transformace v keramikách $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$ při současném vzniku mikrotrhlin. V příspěvku budou mikrotrhliny popsány pomocí techniky vlastních deformací a prozkoumán jejich vliv na fázovou transformaci. Rovněž budou ilustrovány podobnosti, ale také rozdíly, mezi konstitutivním modelováním keramických materiálů zpevněných tvárnými částicemi a transformačně zpevněných keramických materiálů.

2 Přehled základních vztahů

Uvažujme statisticky homogenní, reprezentativní objemový element (ROE) materiálu. Na hranici ROE je předepsáno silové zatížení, které vede ke vzniku průměrného homogenního napětí $\bar{\sigma}_{ij}$. Dále uvažujme pomocný problém, kdy ROE stejného tvaru a velikosti je vyplněn srovnávacím materiálem s elastickými koeficienty matrice zkoumaného kompozitu a podroben stejnému zatížení. Napětí a deformace ve srovnávacím materiálu jsou $\bar{\sigma}_{ij}$ a ϵ_{ij}^0 a jsou vázány vztahem

$$\bar{\sigma}_{ij} = L_{ijkl}^0 \epsilon_{kl}^0, \quad (1)$$

kde $L_{ijkl}^0 = (\kappa^0 - \frac{2}{3}\mu_0) \delta_{kl} \delta_{ij} + \mu_0 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il})$, kde μ^0 , κ^0 označují smykový a objemový modul pružnosti matrice. Napětí a deformace v rovnici (1) odpovídají napětí a deformaci v matici, pokud obsahuje pouze jedinou částici. Při konečné koncentraci částic se průměrné napětí a deformace v matici liší o $\tilde{\sigma}_{ij}$ resp. $\tilde{\epsilon}_{ij}$, přičemž platí vztah

$$\bar{\sigma}_{ij} + \tilde{\sigma}_{ij} = L_{ijkl}^0 (\epsilon_{kl}^0 + \tilde{\epsilon}_{kl}). \quad (2)$$

Průměrné napětí v částici $\sigma_{ij}^{(in)}$ se dále liší od střední hodnoty napětí v matici o hodnotu $\sigma_{ij}^{(pt)}$. Průměrná deformace částice se liší od střední hodnoty deformace v matici o hodnotu $\epsilon_{ij}^{(pt)}$. Část $\epsilon_{ij}^{(pt)}$ je způsobena skutečnou nepružnou deformací částice ϵ_{ij}^p , zbývající část pak souvisí s vlastní deformací ϵ_{ij}^* , která se zavádí za účelem homogenizace prostředí. Z Eshelbyho podmínky konzistence plyne

$$\sigma_{ij}^{(in)} = \bar{\sigma}_{ij} + \tilde{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij}^{(pt)} = L_{ijkl}^1 (\epsilon_{kl}^0 + \tilde{\epsilon}_{kl} + \epsilon_{kl}^{(pt)} - \epsilon_{kl}^p) = L_{ijkl}^0 (\epsilon_{kl}^0 + \tilde{\epsilon}_{kl} + \epsilon_{kl}^{(pt)} - \epsilon_{kl}^p - \epsilon_{kl}^*), \quad (3)$$

kde $L_{ijkl}^1 = (\kappa^1 - \frac{2}{3}\mu^1) \delta_{kl} \delta_{ij} + \mu^1 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il})$, kde μ^1 , κ^1 označují smykový a objemový modul pružnosti částic. Eshelbyho řešení pro $\epsilon_{ij}^{(pt)}$ je dáno vztahem

$$\epsilon_{ij}^{(pt)} = S_{ijkl} (\epsilon_{kl}^p + \epsilon_{kl}^*), \quad (4)$$

kde S_{ijkl} je Eshelbyho tenzor, který v řešeném případě sférických částic závisí pouze na Poissonově konstantě ν_0 matrice. Protože objemový průměr středního napětí v matrici a v částicích musí být v rovnováze s $\bar{\sigma}$, máme

$$\tilde{\sigma}_{ij} = -c \sigma_{ij}^{(pt)}, \quad (5)$$

kde c je objemový podíl částic. Vzhledem k (2) plyne z (3) vztah

$$\sigma_{ij}^{(pt)} = L_{ijkl}^0 \left(\epsilon_{kl}^{(pt)} - \epsilon_{kl}^p - \epsilon_{kl}^* \right). \quad (6)$$

Ježto $\tilde{\sigma}_{ij} = L_{ijkl}^0 \tilde{\epsilon}_{kl}$, dostáváme z (4),(5),(6)

$$\tilde{\epsilon}_{ij} = -c (S_{ijkl} - I_{ijkl}) (\epsilon_{kl}^p + \epsilon_{kl}^*), \quad (7)$$

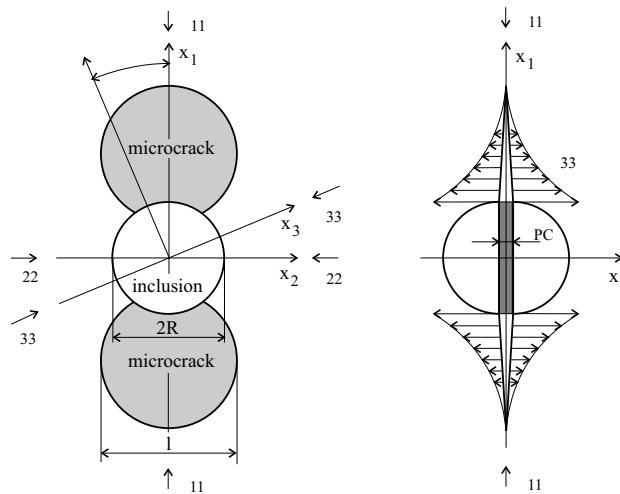
kde I_{ijkl} je jednotkový tenzor 4 řádu. Dosazením (4) a (7) do (3) obdržíme rovnici

$$\begin{aligned} & L_{ijkl}^1 \left[\epsilon_{kl}^0 + (1-c) S_{klmn} (\epsilon_{mn}^* + \epsilon_{mn}^p) + c (\epsilon_{kl}^* + \epsilon_{kl}^p) - \epsilon_{kl}^p \right] \\ &= L_{ijkl}^0 \left(\epsilon_{kl}^0 + (1-c) (S_{klmn} - I_{klmn}) (\epsilon_{mn}^* + \epsilon_{mn}^p) \right), \end{aligned} \quad (8)$$

kterou lze řešit pro ϵ_{kl}^* .

Nechť osa x_1 splývá s hlavním směrem největšího aplikovaného tlakového napětí (ve smyslu absolutní hodnoty) $\bar{\sigma}_{11}$. Osa x_1 definuje polární osu sférických částic. Uvažme, že částice jsou elasticky měkčí než matrice a deformují se pružně-plasticky. Jako příklad lze uvést systémy WC/Co nebo $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}$. Při víceosém tlakovém zatížení jsou pak koncentrovaná obvodová napětí v okolí pólů částice tahová. Předpokládejme, že dochází k nukleaci mikrotrhlin z rozhraní matrice-částice v místech pólů částic a že každá částice dává vznik dvojici mikrotrhlin, viz. obr. 1. Dodatečná průměrná deformace matrice způsobená přítomností mikrotrhlin $\tilde{\epsilon}_{ij}^{MC}$ je dána vztahem

$$\tilde{\epsilon}_{ij}^{MC} = \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega^+} \frac{1}{2} (n_i [u_j] + [u_i] n_j) dS = H_{ijkl} \bar{\sigma}_{kl}, \quad (9)$$



Obr.1 Tahová napětí a iniciace mikrotrhlin v pólech částice

kde konstatní tenzor H_{ijkl} definovaný vztahem (15) popisuje změnu poddajnosti ROE indukovanou souborem mikrotrhlin, n_i je jednotkový vektor vnější normály plochy $\partial\Omega^+$, která označuje sjednocení všech "horních" povrchů mikrotrhlin, $[u_j]$ označuje rozevření mikrotrhlin a V je objem ROE. Pokud aplikovaná příčná hlavní napětí $\bar{\sigma}_{22}$ a $\bar{\sigma}_{33}$ mají stejnou velikost, potom je rozdělení směrů normálních vektorů n_i náhodné v rovině x_2, x_3 a v důsledku symetrie v rovině x_2, x_3 je výsledná odezva ROE příčně izotropní s osou x_1 . Předpokládejme, že mikrotrhliny lze aproximovat jako kruhové o stejném poloměru $\frac{l}{2}$. Necht' $(x_1^\alpha, x_2^\alpha, x_3^\alpha)$ označuje lokální systém souřadnic, jehož osa x_1^α je totožná s osou x_1 globálního systému souřadnic, viz obr.1. Jednotkové bázové vektory jsou \vec{e}_i^α ($i = 1, 2, 3$) a počátek O_α leží ve středu částice. Dvojice mikrotrhlin Ω_α leží v rovině x_1^α, x_2^α s vektorem normály \vec{n}^α ($\equiv \vec{e}_3^\alpha$) ve směru osy x_3^α . Příspěvek k dodatečné průměrné deformaci od této dvojice mikrotrhlin $\bar{\epsilon}^\alpha$ je definován následovně

$$\bar{\epsilon}_{ij}^\alpha = \frac{1}{\left(\frac{l}{2}\right)^3} \int_{\partial\Omega_\alpha^+} (n_i [u_j] + [u_i] n_j) dS = H_{ijkl}^\alpha \bar{\sigma}_{kl}, \quad (10)$$

kde složky tenzoru H_{ijkl}^α jsou vyjádřeny v lokálních souřadnicích x_i^α . Dodatečná průměrná deformace matrice $\bar{\epsilon}_{ij}^{MC}$ může být vyjádřena pomocí vztahu

$$\bar{\epsilon}_{ij}^{MC} = \frac{f}{2\pi} \int_0^{2\pi} c_{ik} c_{jl} \bar{\epsilon}_{kl}^\alpha d\theta, \quad (11)$$

kde f je parametr popisující hustotu mikrotrhlin $f = N \left(\frac{l}{2}\right)^3$, kde N je celkový počet mikrotrhlin v jednotce objemu a c_{ij} jsou složky matice ortogonální transformace z lokálních do globálních souřadnic. Poznamenejme, že N souvisí s koncentrací částic c a s poloměrem částic R

$$N = \frac{3c}{4\pi R^3}.$$

Řešení systému - matrice s mikrotrhlinami + částice - je dáno superpozicí dvou dílčích problémů: i) matrice s dodatečnou deformací $\bar{\epsilon}_{ij}^{MC}$, ii) matrice+částice s vlastní deformací ϵ_{ij}^* , která se zavádí za účelem homogenizace materiálového prostředí a s vlastní deformací $\epsilon_{ij}^p - \bar{\epsilon}_{ij}^\alpha$, kde ϵ_{ij}^p je plastická deformace definované prostřednictvím specifikovaného zákona plastického tečení. Sledujme řešení problému ii). Eshelbyho podmínka konzistence (3) nabývá tvar

$$\sigma_{ij}^{(in)} = \bar{\sigma}_{ij} + \tilde{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij}^{(pt)} = L_{ijkl}^1 \left(\epsilon_{kl}^0 + \tilde{\epsilon}_{kl} + \epsilon_{kl}^{(pt)} - \left(\epsilon_{kl}^p - \bar{\epsilon}_{kl}^\alpha \right) \right) = L_{ijkl}^0 \left(\epsilon_{kl}^0 + \tilde{\epsilon}_{kl} + \epsilon_{kl}^{(pt)} - \epsilon_{kl}^* - \left(\epsilon_{kl}^p - \bar{\epsilon}_{kl}^\alpha \right) \right), \quad (12)$$

Modifikace Eshelbyho řešení (4) vede ke vztahu

$$\epsilon_{ij}^{(pt)} = S_{ijkl} \left(\epsilon_{kl}^p + \epsilon_{kl}^* - \bar{\epsilon}_{kl}^\alpha \right), \quad (13)$$

a podobně modifikace rovnice (7)

$$\tilde{\epsilon}_{ij} = -c (S_{ijkl} - I_{ijkl}) \left(\epsilon_{kl}^p + \epsilon_{kl}^* - \bar{\epsilon}_{kl}^\alpha \right), \quad (14)$$

Předchozí rovnice lze po jistých úpravách vyřešit pro ϵ_{ij}^* .

Poznámka: pokud nebude uvedeno jinak, všechny tenzorové veličiny jsou vyjádřeny v lokálním systému souřadnic.

Kvůli zjednodušení dalšího postupu je výhodné rozložit napětí a deformaci na hydrostatickou a deviátorovou složku podle

$$\begin{aligned}\sigma_{kk}, \sigma'_{ij} &= \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{kk}, \\ \epsilon_{kk}, e_{ij} &= \epsilon_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\epsilon_{kk}.\end{aligned}$$

Také isotropní tenzory 4. řádu L^1_{ijkl} , L^0_{ijkl} a S_{ijkl} je možné zapsat jednoduše pomocí jejich hydrostatické a deviátorové části jako

$$L^1 = (3\kappa_1, 2\mu_1), L^0 = (3\kappa_0, 2\mu_0), S = (\alpha_0, \beta_0), \quad (15)$$

kde $\alpha_0 = \frac{1}{3}\frac{1+\nu_0}{1-\nu_0}$, $\beta_0 = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu_0}{1-\nu_0}$. Jestliže ve stejném duchu se rozloží rovnice (12), obdržíme pro hydrostatickou složku vlastní deformace $\epsilon_{kk}^* + \epsilon_{kk}^p$

$$\epsilon_{kk}^* + \epsilon_{kk}^p = \frac{\epsilon_{kk}^0 + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}\epsilon_{kk}^p + (1-c)(1-\alpha_0)\bar{\epsilon}_{kk}^\alpha}{(1-c)(1-\alpha_0) + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}} \quad (16)$$

(v případě plastické deformace je $\epsilon_{kk}^p = 0$, pro fázovou transformaci je $\epsilon_{kk}^p \neq 0$) a pro deviátorovou složku $e_{ij}^* + e_{ij}^p$

$$e_{ij}^* + e_{ij}^p = \frac{e_{ij}^0 + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}e_{ij}^p + (1-c)(1-\beta_0)\bar{e}_{ij}^\alpha}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}}. \quad (17)$$

Hydrostatická složka rychlosti napětí v částici je pak dána vztahem

$$\sigma_{kk}^{(in)} = \bar{\sigma}_{kk} \left[1 - \frac{(1-c)(1-\alpha_0)}{(1-c)(1-\alpha_0) + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}} \right] - \frac{\frac{3\kappa_0\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}(1-c)(1-\alpha_0)(\epsilon_{kk}^p - \bar{\epsilon}_{kk}^\alpha)}{(1-c)(1-\alpha_0) + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}} \quad (18)$$

a deviátorová složka rychlosti napětí vztahem

$$\sigma_{ij}^{(in)} = \bar{\sigma}'_{ij} \left[1 - \frac{(1-c)(1-\beta_0)}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}} \right] - \frac{\frac{2\mu_1\mu_0}{\mu_0 - \mu_1}(1-c)(1-\beta_0)(e_{ij}^p - \bar{e}_{ij}^\alpha)}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}}. \quad (19)$$

Misesův plastický potenciál pro asociované plastické tečení s izotropním zpevněním v částicích se definuje obvyklým způsobem $f = \frac{3}{2}\sigma_{ij}^{(in)}\sigma_{ij}^{(in)} - k^2(\gamma)$, $k(\gamma)$ udává poloměr mezní plochy plasticity a charakterizuje izotropní zpevnění částic a $\gamma = \sqrt{\frac{3}{2}e_{ij}^p e_{ij}^p}$ je efektivní plastická deformace. Sytící charakter cyklického isotropního zpevnění kobaltové fáze dobře popisuje rovnice $\frac{dk}{d\gamma} = b(Q - k)$, viz Lemaitre et al. (1990), kde parametr b charakterizuje rychlost stabilizace a Q je asymptotická hodnota odpovídající režimu stabilizovaných cyklických smyček. Podle pravidla normality je rychlost plastické deformace definována rovnicí

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \lambda \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}^{(in)}} = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{3}{2} \frac{\sigma_{ij}^{(in)} \sigma_{kl}^{(in)} \dot{\sigma}_{kl}^{(in)}}{k^2 h}, & \text{pro } f = 0 \text{ a } \sigma_{kl}^{(in)} \dot{\sigma}_{kl}^{(in)} \geq 0 \\ 0, & \text{pro } f < 0 \text{ nebo } \sigma_{kl}^{(in)} \dot{\sigma}_{kl}^{(in)} < 0 \end{array} \right\} \quad (20)$$

kde $h = \frac{dk}{d\gamma}$. **Poznámka:** pro numerické výpočty je nezbytné psát všechny předchozí rovnice v rychlostní formulaci.

Globální deformace $\bar{\epsilon}_{ij}$ v ROE je dána váhovým objemovým průměrem deformací matrice a částic doplněným o zprůměrování přes všechny orientace lokálního souřadného systému a

superpozici problému i) a ii); v globálních souřadnicích obdržíme

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}_{kk} &= \epsilon_{kk}^0 + \bar{\epsilon}_{kk}^{MC} + c \frac{\epsilon_{kk}^0 + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1} (\epsilon_{kk}^p - \bar{\epsilon}_{kk}^\alpha)}{(1-c)(1-\alpha_0) + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}}, \\ \bar{\epsilon}_{ij} &= \epsilon_{ij}^0 + \bar{\epsilon}_{ij}^{MC} + c \frac{\epsilon_{ij}^0}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}} + c \frac{\frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} c_{ik} c_{jl} (\epsilon_{kl}^p - \bar{\epsilon}_{kl}^\alpha) d\theta}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}}.\end{aligned}\quad (21)$$

Předcházející systém rovnic není stále ještě úplný pro výpočet odezvy kompozitu. Na uzavřený systém rovnic jej doplníme vztahem svazujícím průměrnou deformaci od dvojice mikrotrhlin $\bar{\epsilon}_{ij}^\alpha$ s vlastní deformací ϵ_{ij}^* , nepružnou deformací částic ϵ_{ij}^p a s aplikovaným zatížením $\bar{\sigma}_{ij}$. Odvození tohoto vztahu je založeno na aproximativním výpočtu součinitele intenzity napětí ve vrcholech mikrotrhlin dvěma různými způsoby: (1) pomocí výpočtu lokálního koncentrovaného pole napětí v okolí částice a Greenovy funkce pro trhlinu, která je umístěna v tomto poli a (2) pomocí výpočtu součinitele intenzity napětí pro dané rozevření mikrotrhliny v místě rozhraní částice-matrice Δ_{PC} , viz obr. 1. Detaily tohoto odvození je možné najít v práci (Kotoul, 2002), zde uvedeme jen výsledky. Pro podmínky jednoosého tlakového zatěžování $\bar{\sigma}_{11}$ je součinitel intenzity napětí K_I vypočtený prvním způsobem

$$K_I = \sqrt{\frac{R}{\pi L}} \int_{-L}^L L_{33ij}^0 S_{ijkl}^\infty(\vec{r}^\dagger; \Omega) (\epsilon_{kl}^* + \epsilon_{kl}^p - \delta_{k3} \delta_{l3} \bar{\epsilon}_{33}^\alpha) \left(\frac{L+X}{L-X}\right)^{1/2} dX, \quad (22)$$

kde $S_{ijkl}^\infty(\vec{r}^\dagger; \Omega)$ je Eshelbyho tenzorové pole v okolí částice Ω a $L = \frac{l}{R}$. Aproximace součinitele intenzity napětí K_I' podle druhého způsobu vyjádření je (Tada, 1973)

$$K_I'(\Delta_{PC}) = \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{1-\nu_0} \frac{\Delta_{PC}}{\sqrt{\pi l}}, \quad (23)$$

kde Δ_{PC} souvisí s dodatečnou deformací částic generovanou rozevřením mikrotrhlin $\Delta\epsilon_{33}^{PC}$

$$\Delta\epsilon_{33}^{PC} = \epsilon_{33}^{PC}(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha \neq 0) - \epsilon_{33}^{PC}(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha = 0), \quad (24)$$

kde

$$\epsilon_{33}^{PC} = \epsilon_{33}^0 + \tilde{\epsilon}_{33} + \epsilon_{33}^{(pt)} + \bar{\epsilon}_{33}^\alpha \quad (25)$$

je složka celkové deformace částic ve směru x_3^α . Z rovnic (14), (16), (17), (24) a (25) plyne

$$\begin{aligned}\Delta\epsilon_{33}^{PC} &= \bar{\epsilon}_{33}^\alpha + \frac{1}{3} [\alpha_0(1-c) + c] \frac{\frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1} [\epsilon_{kk}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha \neq 0) - \epsilon_{kk}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha = 0) - \bar{\epsilon}_{33}^\alpha]}{(1-c)(1-\alpha_0) + \frac{\kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1}} + \\ &+ [\beta_0(1-c) + c] \frac{\frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1} [e_{33}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha \neq 0) - e_{33}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha = 0) - \frac{2}{3}\bar{\epsilon}_{33}^\alpha]}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}}.\end{aligned}\quad (26)$$

V případě klasické plasticity částic platí $\epsilon_{kk}^p \equiv 0$ a v aproximaci řádu $O(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha)$ dostaneme

$$e_{33}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha \neq 0) - e_{33}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha = 0) - \frac{2}{3}\bar{\epsilon}_{33}^\alpha \approx 0.$$

Při popisu atermální fázové transformace částic je obecně $\epsilon_{kk}^p \neq 0$, ale za předpokladu, že iniciace mikrotrhlin nastává současně s fázovou transformací, máme $\epsilon_{ij}^p(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha = 0) = 0$.

Dodatečnou deformaci částic $\Delta\epsilon_{33}^{PC}$ a rozevření trhliny na rozhraní matrice-částice Δ_{PC} lze svázat pomocí modifikace rovnice (10) a pro Δ_{PC} přibližně konstatní uvnitř částice obdržíme

$$\Delta\epsilon_{33}^{PC} = \frac{1}{R^3} \int_S \Delta_{PC} dS = \frac{\pi}{R} \Delta_{PC}, \quad (27)$$

kde R je poloměr částic a S označuje průřez částic. Vztah mezi $\bar{\epsilon}_{33}^\alpha$ na straně jedné a ϵ_{ij}^* , ϵ_{ij}^p (nenulové jsou pouze diagonální složky obou tenzorů) a $\bar{\sigma}_{11}$ na straně druhé dostaneme z podmínky self-konzistence

$$K_I = K'_I. \quad (28)$$

Získaný vztah lze formálně psát ve tvaru

$$\bar{\epsilon}_{33}^\alpha = d_1 e_{11}^p + d_2 e_{33}^p + d_3 \epsilon_{kk}^p + d_4 \bar{\sigma}_{11}, \quad (29)$$

kde

$$\begin{aligned} d_1 &= d_1(\kappa_0, \mu_0, c, L), & d_2 &= d_2(\kappa_0, \mu_0, c, L), \\ d_3 &= d_3(\kappa_0, \mu_0, c, L), & d_4 &= d_4(\kappa_0, \mu_0, c, L) \end{aligned}$$

jsou složité funkce elastických konstant matrice, objemového podílu částic c a relativní velikosti trhlín $L = \frac{l}{R}$.

Jedním z pozoruhodných rysů modelu je to, že model umožňuje popisovat cyklický creep, přestože plasticita částic byla modelována pouze na základě teorie plasticity s izotropním zpevněním. Připomeňme nejprve matematickou strukturu klasického modelu plastického tečení s nelineárním kinematickým zpevněním popisovaným podle Armstronga a Fredericka (1966) vztahem

$$\dot{R}_{ij} = K \dot{\epsilon}_{ij} - K_e R_{ij} \dot{\gamma},$$

kde druhý člen, tzv. dynamické zotavení, modeluje zeslabení vlivu historie deformace. Pomocí Misesova kritéria plyne pro rychlost plastické deformace:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \lambda \frac{\partial f}{\partial \sigma'_{ij}} = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{(\sigma'_{ij} - R_{ij})(\sigma'_{kl} - R_{kl}) \dot{\sigma}'_{kl}}{k^2 h_{ef}}, & \text{pro } f = 0 \text{ a } (\sigma'_{kl} - R_{kl}) \dot{\sigma}'_{kl} \geq 0 \\ 0, & \text{pro } f < 0 \text{ nebo } (\sigma'_{kl} - R_{kl}) \dot{\sigma}'_{kl} < 0 \end{cases}$$

kde modul zpevnění h_{ef} závisí nyní na kinematickém zpevnění vztahem

$$h_{ef} = \left[K + \frac{dk}{d\gamma} - \frac{3}{2} K_e \frac{(\sigma'_{ij}^{(in)} - R_{ij}) R_{ij}}{k^2} \right], \quad (30)$$

kde K a K_e jsou materiálové parametry. Je zřejmé, že růst kinematického zpevnění (reprezentovaného napětím R_{ij}) vede k poklesu modulu zpevnění. Ukážeme nyní, že matematická struktura navrženého konstitutivního modelu je obdobná. Omezíme se na jednoosé zatěžování a dosadíme rov. (19) a (29) do (20) a řešíme pro $\dot{\epsilon}_{11}^p$, $\dot{\epsilon}_{22}^p$ a $\dot{\epsilon}_{33}^p$. Dostaneme

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{11}^p &= \frac{3 \sigma_{11}^{(in)} \dot{\bar{\sigma}}_{11} \left(A \sigma_{11}^{(in)} + B \frac{d_3}{d_4} \sigma_{33}^{(in)} \right)}{2 k^2 h_{ef}}, \\ \dot{\epsilon}_{22}^p &= \frac{3 \sigma_{22}^{(in)} \dot{\bar{\sigma}}_{11} \left(A \sigma_{11}^{(in)} + B \frac{d_3}{d_4} \sigma_{33}^{(in)} \right)}{2 k^2 h_{ef}}, \\ \dot{\epsilon}_{33}^p &= \frac{3 \sigma_{33}^{(in)} \dot{\bar{\sigma}}_{11} \left(A \sigma_{11}^{(in)} + B \frac{d_3}{d_4} \sigma_{33}^{(in)} \right)}{2 k^2 h_{ef}}, \end{aligned} \quad (31)$$

kde

$$h_{ef} = \frac{dk}{d\gamma} + B - \frac{3}{2} \frac{B}{k^2} \left(d_1 \sigma_{11}^{(in)} \sigma_{33}^{(in)} + d_2 \left(\sigma_{33}^{(in)} \right)^2 \right) \quad (32)$$

je výsledný modul zpevnění, $A = 1 - \frac{(1-c)(1-\beta_0)}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}}$ a $B = \frac{\frac{2\mu_1\mu_0}{\mu_0 - \mu_1}(1-c)(1-\beta_0)}{(1-c)(1-\beta_0) + \frac{\mu_1}{\mu_0 - \mu_1}}$. Protože hodnoty $\sigma_{11}^{(in)}$ a $\sigma_{33}^{(in)}$ jsou stejného řádu a protože $d_2 \gg d_1$, má složka $\sigma_{33}^{(in)}$ dominantní vliv. Pokud tedy absolutní hodnota deviatorové složky napětí $|\sigma_{33}^{(in)}|$ je v zatěžující fázi $\langle k_1, \bar{\sigma}_{11m} \rangle$ ($\bar{\sigma}_{11m}$ označuje maximální zatížení) větší než v odlehčující fázi $\langle k_2, 0 \rangle$, potom modul zpevnění h_{ef} je menší pro stavy napětí ležící na zatěžující větvi cyklické křivky než pro stavy napětí ležící na odlehčující větvi cyklické křivky. Cyklické křivky pak nejsou uzavřené a posouvají se ve směru osy rostoucí deformace. Numerické výsledky prokázaly takové chování.

3 Konstitutivní modelování dvoufázové keramiky $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$

Jeden z podstatných rozdílů mezi konstitutivním popisem kompozitu s tvárnými částicemi a transformačně zpevněné dvoufázové keramiky spočívá v kritériu pro vznik nepružných deformací. Klasickou podmínku plasticity nahrazuje u transformačně zpevněných keramik termodynamická podmínka pro fázový přechod. Změna chemického Gibbsova potenciálu definovaná jako rozdíl chemického Gibbsova potenciálu monoklinické fáze a tetragonální fáze ΔG_{CH} musí krýt přírůstek energie rozhraní ΔG_S spojený s fázovou transformací a přírůstek potenciální energie ΔG_M zbytkových napětí generovaných v průběhu transformace. Pro průběh transformace musí platit

$$\Delta G = \Delta G_M + \Delta G_{CH} + \Delta G_S = \Delta G_{CR} \leq 0, \quad (33)$$

kde ΔG_{CR} je kritická hodnota, kterou musí dosáhnout celková změna Gibbsova potenciálu mezi počátečním netransformovaným tetragonálním stavem a transformovaným monoklinickým stavem částic ZrO_2 . Změna chemického Gibbsova potenciálu vztahovaná na jednotku objemu částic $\Delta G_{CH}/V_P$ závisí na teplotě a koncentraci příměsí a nezávisí na velikosti částic. Podobně nezávisí na velikosti částic změna potenciální energie zbytkových napětí vztahovaná na jednotku objemu částic $\Delta G_M/V_P$, zatímco změna energie rozhraní vztahovaná na jednotku objemu částic na velikosti závisí. Budeme-li uvažovat všechny částice kulové o poloměru R , pak $\Delta G_S/V_P$ lze aproximovat výrazem (Garvie a Swain, 1985)

$$\frac{\Delta G_S}{V_P} = \frac{a_1}{R} \left(+a_2 \frac{n^2 - 1}{n} \right), \quad (34)$$

kde $a_1, a_2 > 0$ jsou materiálové konstanty a n je počet dvojčat v částici. Pro $\Delta G_M/V_P$ lze odvodit v případě jednoosého tlakového zatížení $\bar{\sigma}_{11}$ vztah

$$\begin{aligned} \frac{\Delta G_M}{V_P} = & -\frac{2(1-c)(1-\beta_0)(\mu_0 - \mu_1) + \mu_1 \bar{\sigma}_{11} e_{11}^p}{(1-c)(1-\beta_0)(\mu_0 - \mu_1) + \mu_1} - \frac{1}{3} \frac{2(1-c)(1-\alpha_0)(\kappa_0 - \kappa_1) + \kappa_1 \bar{\sigma}_{11} \epsilon_{kk}^p}{(1-c)(1-\alpha_0)(\kappa_0 - \kappa_1) + \kappa_1} \\ & + 2 \frac{(1-c)(1-\beta_0)\mu_0\mu_1}{(1-c)(1-\beta_0)(\mu_0 - \mu_1) + \mu_1} e_{ij}^p e_{ij}^p + \frac{1}{2} \frac{(1-c)(1-\alpha_0)\kappa_0\kappa_1}{(1-c)(1-\alpha_0)(\kappa_0 - \kappa_1) + \kappa_1} (\epsilon_{kk}^p)^2, \end{aligned} \quad (35)$$

kde e_{ij}^p označuje tenzor deformace, který převedl mřížku t do m . Podle Lama a Zhanga (1992) existují pro transformaci krystalů zirkonia z tetragonální do monoklinické symetrie pouze 4

varianty tenzoru deformace ϵ_{ijN}^p , $N = 1, \dots, 4$:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij1}^p &= \begin{bmatrix} 0.0137 & 0.0 & 0.0839 \\ 0.0 & 0.0259 & 0.0 \\ 0.0841 & 0.0 & 0.0297 \end{bmatrix}, \epsilon_{ij2}^p = \begin{bmatrix} 0.0137 & 0.0 & -0.0839 \\ 0.0 & 0.0259 & 0.0 \\ -0.0841 & 0.0 & 0.0297 \end{bmatrix}, \\ \epsilon_{ij3}^p &= \begin{bmatrix} 0.0259 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0136 & 0.0839 \\ 0.0 & 0.0839 & 0.0297 \end{bmatrix}, \epsilon_{ij4}^p = \begin{bmatrix} 0.0253 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0136 & -0.0839 \\ 0.0 & -0.0839 & 0.0297 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (36)$$

Z rovnic (36) je vidět, že všechny varianty tenzoru deformace ϵ_{ijN}^p mají stejnou volumetrickou složku, mění se jen deviátorová část. Deviátorovou složku tenzoru deformace, který převede tetragonální částici do monoklinické fáze, pak hledáme jako objemový průměr jednotlivých variant

$$e_{ij}^p = \sum_{N=1}^4 \lambda_N \epsilon_{ijN}^p, \quad (37)$$

kde λ_N jsou jejich objemové podíly. Množina hodnot objemových podílů ($\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$) popisuje různé kombinace dvojčatění v částici. Z předchozích vztahů je zřejmé, že na parametrech λ_N závisí pouze potenciální energie zbytkových napětí. Z termodynamického hlediska by se měla realizovat pouze taková kombinace hodnot λ_N , při které dosáhne minima Gibbsův potenciál soustavy matrice+částice. Předpokládejme, že známe $\Delta G_{CH}/V_P$ a $\Delta G_S/V_P$. $\Delta G_{CR}/V_P$ se obvykle klade rovné nule. Pak z rovnice (33) můžeme vyjádřit kritickou hodnotu potenciální energie zbytkových napětí, při které ještě nastane fázová transformace

$$\frac{\Delta G_{M_{crit}}}{V_P} = \frac{1}{V_P} (\Delta G_{CR} - \Delta G_S - \Delta G_{CH}). \quad (38)$$

Tuto hodnotu dosadíme do (35), e_{ij}^p nahradíme pomocí (37), $\epsilon_{kk}^p = 0.0693$, viz (36) a vyjádříme z takto upravené rovnice (35) napětí $\bar{\sigma}_{11}$ jako funkci parametrů λ_N . Minimalizací této funkce při vedlejších podmínkách

$$0 \leq \lambda_N \leq 1, \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4 = 1$$

dostaneme kritickou hodnotu aplikovaného napětí $\bar{\sigma}_{11c}$, při které dochází k transformaci. Postup je možné také obrátit - z experimentálního zjištění $\bar{\sigma}_{11c}$ stanovit $\Delta G_{M_{crit}}/V_P$ a z rovnice (38) pak vypočítat např. $\Delta G_S/V_P$ při znalosti ostatních termodynamických veličin. Pro systém $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$ jsou hodnoty konstant v rovnici (35) následující: $\kappa_0 = 194$ GPa, $\kappa_1 = 133$ GPa, $\mu_0 = 146$ GPa, $\mu_1 = 80$ GPa, $\alpha_0 = 0,5$, $\beta_0 = 0,5$. Koncentraci částic ZrO_2 uvažujeme $c = 0,3$. Kritická hodnota $\Delta G_{M_{crit}}/V_P = 0,062$ GPa byla převzata z literatury (Garvie a Swain, 1985), odpovídající změně chemického Gibbsova potenciálu $\Delta G_{CH}/V_P = -0.283$ GPa a změně povrchové energie rozhraní $\Delta G_S/V_P = 5,41/R$ Jm⁻² kde poloměr částic $R = 25$ nm. Vypočtená hodnota kritického tlakového zatížení, kdy dochází k fázové transformaci, pak vychází $\bar{\sigma}_{11c} = 2,94$ GPa při kombinaci dvojčatění $\lambda_1 = 0,06$, $\lambda_2 = 0,03$, $\lambda_3 = 0,46$ a $\lambda_4 = 0,45$.

Položme si nyní otázku, jak by probíhala fázová transformace, pokud by ji doprovázela iniciace mikrotrhlin v místech lokálních tahových napětí, tj. v okolí pólů částic. Z jednotlivých členů v energetické bilanci transformace, viz rov. (33), budou mikrotrhliny ovlivňovat pouze potenciální energii zbytkových napětí. Kromě toho však bude nutné doplnit do celkové energetické bilance ještě člen, který popisuje povrchovou energii mikrotrhlin vztahenou na jednotku objemu částic $\Delta G_{fr}/V_P$. Rovnice(38) se pak změní na

$$\frac{\Delta G_{M_{crit}}}{V_P} = \frac{1}{V_P} (\Delta G_{CR} - \Delta G_S - \Delta G_{fr} - \Delta G_{CH}). \quad (39)$$

Pro stanovení potenciální energie zbytkových napětí lze využít vztahy z části 2. Obdržíme

$$\begin{aligned} \frac{\Delta G_M}{V_p} = & -\frac{1}{3} (1 + A_2) \bar{\sigma}_{11} \left(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha + 3 e_{11}^p \right) + \frac{1}{3} (A_1 + 1) \bar{\sigma}_{11} \left(\bar{\epsilon}_{33}^\alpha - e_{kk}^p \right) \\ & + A_2 \frac{\mu_0 \mu_1}{\mu_0 - \mu_1} \left(\frac{2}{3} \bar{\epsilon}_{33}^{\alpha^2} - 2 \bar{\epsilon}_{33}^\alpha e_{33}^p + 2 e_{ij}^p e_{ij}^p \right) + \frac{1}{2} A_1 \frac{\kappa_0 \kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1} \left(\bar{\epsilon}_{33}^{\alpha^2} - 2 \bar{\epsilon}_{33}^\alpha e_{kk}^p + e_{kk}^{p^2} \right) \\ & - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{3} \bar{\sigma}_{11} (A_2 - A_1) - 3 A_1 \frac{\kappa_0 \kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1} (e_{kk}^p - \bar{\epsilon}_{33}^\alpha) - 2 A_2 \frac{\mu_0 \mu_1}{\mu_0 - \mu_1} \left(e_{33}^p - \frac{2}{3} \bar{\epsilon}_{33}^\alpha \right) \right) \bar{\epsilon}_{33}^\alpha, \end{aligned} \quad (40)$$

kde $A_1 = \frac{(1-c)(1-\alpha_0)(\kappa_0-\kappa_1)}{(1-c)(1-\alpha_0)(\kappa_0-\kappa_1)+\kappa_1}$, $A_2 = \frac{(1-c)(1-\beta_0)(\mu_0-\mu_1)}{(1-c)(1-\beta_0)(\mu_0-\mu_1)+\mu_1}$ a $\bar{\epsilon}_{33}^\alpha$ se vyjádří pomocí (29). Povrchová energie mikrotrhlin vztažená na jednotku objemu částic $\Delta G_{fr}/V_P$ činí asi 0.03 GPa pro částice o poloměru $R = 25$ nm a při velikosti mikrotrhlin $l/2 \approx R$, tedy kritická hodnota $\Delta G_{M_{crit}}/V_P \approx 0,032$ GPa. Tuto hodnotu dosadíme do levé strany rovnice (40) a řešíme pro $\bar{\sigma}_{11}$. Pro stejnou kombinaci objemových podílů λ_N jako v předchozím případě fázové transformace bez mikroporušení obdržíme kritickou hodnotu napětí $\bar{\sigma}_{11c} = 2,96$ GPa, která se překvapivě téměř neliší od predikce kritického napětí, když se neuvažuje iniciace mikrotrhlin. Pokud budeme uvažovat v případě bez mikrotrhlin stejnou výslednou hodnotu $-\Delta G_S - \Delta G_{CH} = 0,062$ GPa, ale při velikosti částic $R = 0,1$ μm , což je obvyklá velikost částic ZrO_2 ve sledovaném typu keramiky (pro změnu energie rozhraní pak máme $\Delta G_S/V_P = 0,054$ GPa), hodnota kritického tlakového zatížení, kdy dochází k fázové transformaci, zůstává nezměněna $\bar{\sigma}_{11c} = 2,94$ GPa. Uvažujeme-li v daném případě současný vznik mikrotrhlin, pak povrchová energie mikrotrhlin vztažená na jednotku objemu částic klesne na $\Delta G_{fr}/V_P \approx 0,0075$ GPa a $\bar{\sigma}_{11c} = 2,2$ GPa. Vznik mikrotrhlin doprovázejících fázovou transformaci bude tedy termodynamicky výhodný.

4 Závěr

i) Byl demonstrován jednotný přístup ke konstitutivnímu modelování kermických kompozitů zpevněných tvárnými částicemi nebo využívajících transformačního zpevnění; ii) byl navržen model fázové transformace v keramikách $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$ při současném vzniku mikrotrhlin.

5 Literatura

- Eshelby, J.D.(1957) The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proc. of the Royal Society, Series A* 241, 376-396.
- Kotoul, M. (2000) Micromechanical constitutive model of metal-particulate reinforced ceramic matrix composites, In Proc. of Int. Conf. Engineering Mechanics 2000, (Eds, J. Náprstek and Jiří Minster), Svratka, 15.5.-18.5. 2000, I 187-192.
- Kotoul, M. (2001) Constitutive modelling of ratchetting of metal particulate reinforced ceramic matrix composites. *J. Materials Science & Engineering A* **319**,657-661.
- Kotoul, M. (2002) Constitutive modelling of cyclic plasticity of metal particulate reinforced brittle matrix composites under compression-compression loading. *J. Mech. Phys. Solids* **50**,1099-1124.
- Lemaitre, J.& Chaboche, J.L. (1990) *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge Univ. Press.
- Mori, T. & Tanaka, K. (1973) Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions. *Acta Metallurgica* 21, 571-574.
- Tandon, G.P. , Weng, G.J. (1986) Stress Distribution in and Around Spheroidal Inclusions and Voids at Finite Concentration. *J. Appl. Mechanics* 53, 511-518.

Poděkování. Tato práce vznikla díky podpoře prostřednictvím projektu MSM 262100001 a grantu GAČR č. 101/99/0829.