

УПРУГИЕ СВОЙСТВА, ПОВЕРХНОСТЬ НАГРУЖЕНИЯ И КРИТЕРИЙ ТЕЧЕНИЯ НАНОПОРОШКОВЫХ КОМПАКТОВ

Г.Ш. Болгачев*, Е.А. Чингина, Н.Б. Волков, К.Е. Лукьяшин

Институт электрофизики УрО РАН, Амундсена 106, Екатеринбург, Россия

*e-mail: grey@iep.uran.ru

Аннотация. Методом гранулярной динамики исследуются различные процессы компактирования наноразмерной гранулированной системы, которая соответствует нанопорошку на основе оксида алюминия. Для всех процессов: рассчитаны кривые уплотнения «плотность – давление» порошкового компакта, из суммарной деформации выделены упругий и пластичный вклады, в приближении изотропного материала определены упругие модули тела. Установлена недостаточность приближения изотропности. В пространстве инвариантов тензора напряжений построена поверхность нагружения наноразмерного порошка. Выявлена неприменимость традиционного ассоциированного закона к описанию процессов деформирования оксидных нанопорошков, и предложено альтернативное правило пластического течения.

Ключевые слова: нанопорошок, поверхность нагружения, ассоциированный закон

1. Введение

В сфере производства новых материалов с уникальными свойствами заманчивыми перспективами обладают оксидные керамические материалы на основе таких соединений, как оксид алюминия [1-8], оксид иттрия [7,9,10], и т.д. Оксид алюминия, в частности, обладает высокой теплопроводностью и прозрачностью, что делает его перспективным кандидатом в качестве рабочей среды для твердотельных лазеров [4], высокими прочностными характеристиками, химической и жаропрочностью, что обуславливает его востребованность как конструкционного материала [1,2]. Повышение прочностных свойств, как и улучшение прозрачности, требует уменьшения среднего размера зерен в изготавливаемой керамике вплоть до величин порядка 10 нм [3,6]. В связи с этим в последнее время большие усилия направлены на развитие нанотехнологий, и в частности, производство наноструктурированных керамик методами порошковой металлургии [6-15]. Одним из часто используемых этапов данных методов является холодное прессование наноразмерных порошков. В отличие от порошков микронного и более крупных размеров нанопорошки обладают рядом неожиданных свойств [11,16-18], влияющих на их прессование и последующее спекание. В первую очередь, это ярко выраженный размерный эффект: чем меньше размер частиц порошка, тем труднее его прессовать. Достижение необходимых плотностей оксидного нанопорошка на стадии холодного прессования подчас требует давлений в несколько ГПа [11,15-18]. Помимо этого, как было недавно обнаружено [16-18], нанопорошки оксидных материалов слабо чувствительны к схеме прессования – различия по плотности в процессах всестороннего сжатия и одноосного компактирования не превышают 1%. Таким образом, наноразмерные порошки по своим механическим свойствам принципиально отличаются от обычных порошковых тел.

http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4412020_9

© 2020, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

© 2020, Institute of Problems of Mechanical Engineering RAS

Бурное развитие экспериментальных методик и дальнейший успех в производстве наноструктурированной оксидной керамики требуют соответствующего развития теоретических представлений о механических свойствах нанопорошкового компакта. В пространстве инвариантов тензора напряжений поверхность нагружения нанопорошков имеет выпуклую форму эллиптического типа [12-19], что предполагает в качестве континуального подхода для описания свойств нанопорошка использование модифицированных вариантов теории пластичности [12-15,19,20]. При этом, конечно, ряд положений и терминология теории приобретают довольно условный характер: в частности, пластичность порошкового тела связана не с деформацией отдельных частиц, а с процессами взаимного проскальзывания, переупаковкой. Особенности нанопорошкового тела требуют серьезной ревизии основных положений теории и верификации ее результатов относительно свойств описываемого объекта. Натурный эксперимент не может дать всестороннюю информацию о характеристиках порошковой системы и изменении ее свойств в процессах компактирования. Гораздо более подробную информацию можно получить в рамках реализованного в данном исследовании микроскопического рассмотрения, т.е. компьютерного моделирования порошка методом гранулярной динамики [16-18,21-25].

В качестве объекта исследования выступает монодисперсная (диаметр частиц $d_g = 10$ нм) модельная система, соответствующая нанопорошку оксида алюминия с сильной склонностью к агломерированию. Реальные порошки такого типа производятся в ИЭФ УрО РАН (Екатеринбург) методами электрического взрыва проводников [26] и лазерного испарения мишеней [9,27]. Отдельные частицы характеризуются сферической формой и высокими прочностными характеристиками. Сферичность частиц и их высокая прочность, неподверженность пластическому смятию, делают метод гранулярной динамики особенно перспективным и адекватным инструментом теоретического анализа.

2. Описание численных экспериментов

Модельная ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда с размерами x_{cell} , y_{cell} и z_{cell} . Для генерации начальных засыпок используется алгоритм, описанный в [16], который позволяет создавать изотропные и однородные структуры в виде связанного 3D-периодического кластера. Количество частиц $N_p = 4000$, начальная плотность $\rho_0 = 0.24$. Под плотностью ρ подразумевается относительный объем твердой фазы, т.е. $\rho = (\pi/6)N_p d_g^3 / V_{cell}$, где d_g – диаметр частиц, V_{cell} – объем модельной ячейки. На всех сторонах ячейки используются периодические граничные условия. Деформирование системы осуществляется одновременным изменением выбранных размеров модельной ячейки и пропорциональным перемасштабированием соответствующих координат всех частиц. После каждого акта деформирования определяется новое равновесное положение частиц. Данная процедура соответствует воздействию на порошок в квазистатических условиях. Тензор полных деформаций модельной системы в декартовых координатах диагонален. Приращение его компонент на каждом шаге деформирования были связаны друг с другом соотношениями: $\Delta \varepsilon_{xx} = \kappa_x \Delta \varepsilon_{zz}$, $\Delta \varepsilon_{yy} = \kappa_y \Delta \varepsilon_{zz}$. Вертикальная ось Oz всегда соответствовала максимальному сжатию. Шаг деформации вдоль данной оси для всех процессов был установлен равным $\Delta \varepsilon_{zz} = \Delta z_{cell} / z_{cell} = -0.0005$, а различия между процессами, т.е. специфика уплотнения, определялись значениями коэффициентов κ_x и κ_y .

Усредненный по модельной ячейке тензор напряжений σ_{ij} рассчитывался по известной формуле Лава [21-23,28]

$$\sigma_{ij} = \frac{-1}{V_{cell}} \sum_{k < l} f_i^{(k,l)} r_j^{(k,l)}, \quad (1)$$

где суммирование проводится по всем парам взаимодействующих частиц k и l ; $f^{(k,l)}$ – полная сила, воздействующая на частицу k со стороны частицы l ; $r^{(k,l)}$ – вектор, соединяющий центры рассматриваемых частиц. Как правило, предполагается [12-15], что напряженное состояние пластично деформируемого тела, достаточно характеризовать первыми двумя инвариантами тензора напряжений, или однозначно связанными с этими инвариантами средним (гидростатическим) напряжением p и интенсивностью τ девиатора напряжений ($\tau_{ij} = \sigma_{ij} - p\delta_{ij}$, где δ_{ij} – единичный тензор):

$$p = \frac{-1}{3} \text{Sp}(\sigma_{ij}), \quad \tau^2 = \sum_{i,j=1}^3 \tau_{ij} \tau_{ji}. \quad (2)$$

В дальнейшем также введем обозначения для осевых давлений: $p_x = -\sigma_{xx}$, $p_y = -\sigma_{yy}$ и $p_z = -\sigma_{zz}$. Силовые характеристики межчастичных взаимодействий описывались соотношениями [16-18]:

$$f_a(r) = \frac{\pi^2}{3} \frac{(nd_0^3)\varepsilon d_g^6}{(r + \alpha d_0)^3 [(r + \alpha d_0)^2 - d_g^2]^2}, \quad (3)$$

$$\frac{f_e(r)}{Ed_g^2} = \frac{(h/d_g)^{3/2}}{3(1-\nu)^2} - \frac{\pi}{4} \frac{(1-\nu)}{(1-2\nu)(1+\nu)} \left[\frac{h}{d_g} + \ln \left(1 - \frac{h}{d_g} \right) \right], \quad h = d_g - r, \quad (4)$$

$$f_t(\delta) = \min \left\{ \frac{4Ea\delta}{(2-\nu)(1+\nu)}; \mu f_e; \pi a^2 \sigma_b \right\}, \quad a = \sqrt{hd_g} / 2, \quad (5)$$

$$M_p(\theta_p) = \min \left\{ \frac{8Ea^3\theta_p}{3(1+\nu)}; \mu M(a); \frac{\pi}{2} a^3 \sigma_b \right\}, \quad M(a) = -2\pi \int_0^a \sigma_n(r) r^2 dr, \quad (6)$$

$$M_r(\theta_r) = \min \left\{ \frac{4}{3} \frac{Ea^3\theta_r}{1-\nu^2}; \frac{1}{3} a f_e \right\}. \quad (7)$$

Здесь: модифицированная формула Гамакера (3) определяет силу дисперсионных притяжений f_a [29,30]; модифицированный закон Герца (4) – силу f_e упругого отталкивания частиц [31]; линеаризованный закон Катанео-Миндлина (5) – тангенциальное взаимодействие прижатых частиц (силы «трения») [32-34]; линеаризованный закон Егера (6) (или закон Рейснера-Сагоси [35,36]) – момент M_p поверхностных сил, возникающий при взаимном вращении прижатых частиц вокруг контактной оси на угол θ_p ; закон Лурье (7) – момент M_r поверхностных сил, возникающий при изгибе контактной оси на угол θ_r (при появлении прочного сцепления между частицами; см. [37], стр. 272, ур. (4.5)). В представленных соотношениях: r – расстояние между центрами взаимодействующих частиц, ε и d_0 – энергетический и размерный параметры межмолекулярных сил; α – коэффициент, определяющий минимальный зазор между соприкасающимися частицами ($r = d_g$), и устанавливающий максимальную силу адгезионного сцепления ($f_{a,\max} = f_a(d_g)$); E и ν – модуль Юнга и коэффициент Пуассона частиц; δ – тангенциальное смещение контактной площадки; a – радиус контактной площадки; μ – коэффициент трения; σ_b – критическое напряжение сдвига, которое характеризует сдвиговую прочность материала; σ_n – нормальные напряжения на контактной поверхности.

Появление/разрушение прочной связи между частицами описывается с помощью параметра Δr_{ch} , который характеризует необходимое прижатие частиц [16]. Принимается, что уменьшение расстояния r между центрами частиц до значения $r_{min} \leq \Delta r_{ch}$ инициирует образование прочного сцепления. После образования прочной связи между частицами дальнейшее сжатие (при уменьшении r) продолжает соответствовать упругому взаимодействию (4), а при растяжении (увеличение r) имеем линейную взаимосвязь силы f_e и расстояния r вплоть до значения $r' = r_{min} + \Delta r_{ch}$. При $r > r'$ вводится частичное разрушение контакта, которое описывается увеличением параметра r_{min} , так чтобы разность $r - r_{min}$ оставалась равна своему максимальному значению Δr_{ch} . Полное разрушение контакта между частицами происходит при растяжении до значения $r = d_g$. С появлением прочного сцепления между частицами ограничения в соотношениях (5) и (6), связанные с коэффициентом трения μ , снимаются.

В качестве материала частиц подразумевается оксид алюминия в α -фазе, для которого принято [16]: $E = 382$ ГПа, $\nu = 0.25$, $nd_0^3 = \sqrt{2}$, $\alpha d_0 = 0.1$ нм; $\varepsilon = 1224k_B$, $\sigma_b = 0.02E$. Размер частиц $d_g = 10$ нм, коэффициент межчастичного трения $\mu = 0.1$, параметр $\Delta r_{ch} = 0.01d_g$. Таким образом моделируемая система близка по своим параметрам к модельной системе II работы [16], т.е. соответствует сильно агломерированному нанопорошку оксида алюминия работы [38].

Для идентификации различных промоделированных процессов уплотнения в дальнейшем используются значения коэффициентов κ_x и κ_y , и процесс обозначается парой « $\kappa_x; \kappa_y$ ». Компьютерные эксперименты были выполнены для следующих процессов:

1. «1;1» – всестороннее однородное сжатие. Тензоры приращения деформаций $\Delta \varepsilon_{ij}$ и напряжений σ_{ij} являются шаровыми, т.е. $\Delta \varepsilon_{ij} = (\varepsilon/3)\delta_{ij}$, $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$, где $\varepsilon = \text{Sp}(\Delta \varepsilon_{ij})$.
2. «0.9;1»: интенсивность девиатора тензора приращений деформаций $\gamma_{ij} = \Delta \varepsilon_{ij} - (\varepsilon/3)\delta_{ij}$ равна $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{6}/87$.
3. «0.75;1»: $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{6}/33$.
4. «0.5;1»: $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{6}/15$.
5. «0.25;1»: $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{6}/9$.
6. «0;1» – сжатие вдоль осей Oy и Oz : $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{1/6}$.
7. «0;0.5»: $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{2}/3$.
8. «0;0» – одноосное сжатие вдоль оси Oz : $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{2/3}$.
9. «0;-0.1», т.е. сжатие по оси Oz с одновременным незначительным растяжением по оси Oy : $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{74}/9$.
10. «0;-0.2»: $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{31/24}$.
11. «0;-0.3»: $\gamma = |\varepsilon| \sqrt{278/147}$.

В дополнение были промоделированы три процесса вида « κ_n, κ_n » со значениями

$$\kappa_1 = \frac{1}{4}; \quad \kappa_2 = \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{3}+2} \cong 0.196; \quad \kappa_3 = \frac{-1\sqrt{31}-4}{2\sqrt{31}+2} \cong -0.103, \quad (8)$$

которые по величине отношения γ/ε являются аналогами, соответственно, процессов «0;1», «0;0.5» и «0;-0.2».

3. Кривые уплотнения

Во всех перечисленных в предыдущем разделе процессах уплотнение модельной ячейки проводилось до заданного уровня $p_{\max} = 5$ ГПа внешней нагрузки вдоль оси Oz , т.е. до выполнения условия $p_z = p_{\max}$. Затем осуществлялась разгрузка модельной ячейки, в ходе которой ячейка деформировалась по всем направлениям с такими же относительными скоростями, что и при уплотнении, но противоположного знака. Кривые уплотнения и разгрузки $p_z(\rho)$ пяти процессов показаны на Рис. 1. Отметим, что для построения каждой кривой проводилось несколько (от 6 до 10) статистически независимых расчетов, после чего проводилось усреднение расчетных данных. Стадия разгрузки, или «упругой» разгрузки [17,19,24], характеризуется изменением плотности $\Delta\rho_u$. Однако сброс давления помимо чисто упругой разгрузки межчастичных контактов сопровождается также необратимыми процессами относительного перемещения частиц. Поэтому название этих стадий «упругими» достаточно условно, и предполагает лишь то, что упругие процессы здесь, скорее всего, преобладают.

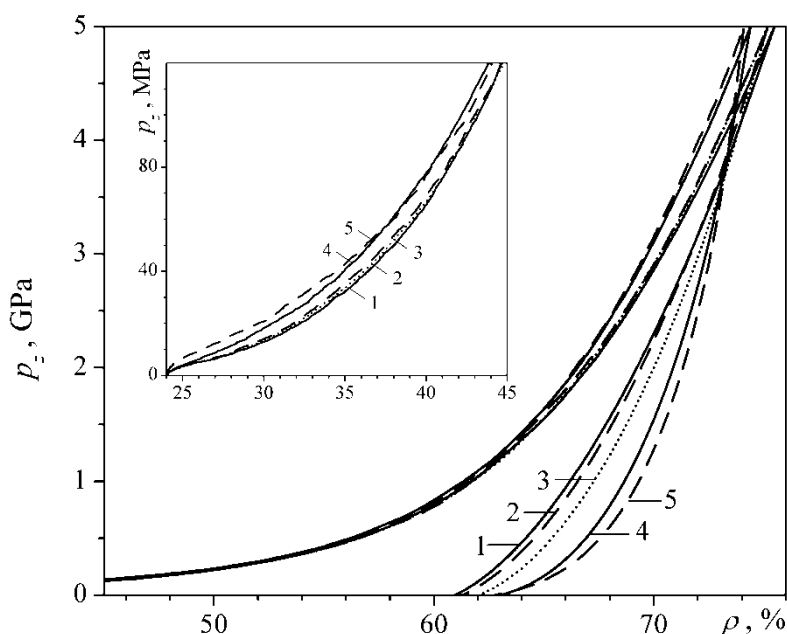


Рис. 1. Кривые уплотнения в координатах «плотность – давление p_z » для процессов «1;1» (сплошная линия 1), «0.5;1» (штриховая линия 2), «0;1» (пунктирная линия 3), «0;0» (сплошная линия 4) и «0;–0.3» (штриховая линия 5). На вставке в увеличенном масштабе показан начальный участок уплотнения

Рисунок 1 показывает, что на стадии нагружения кривые уплотнения нанопорошка «плотность – максимальное давление» очень близки друг к другу. Процессы «1;1», «0.5;1» и «0;1» совпадают в пределах погрешности расчета (порядка 0.3%), а отклонение от них процесса «0;0» (одноосное сжатие) по плотности составляет около 1%. Нечувствительность уплотняемости нанопорошка к схеме нагружения отмечалась ранее в работах [16-18]. Причина такой нечувствительности, по-видимому, состоит во взаимной компенсации двух противоположных эффектов. С одной стороны, переход к несимметричному нагружению (от всестороннего сжатия «1;1» к двухосному «0;1» и далее к одноосному «0;0») приводит при заданном уровне внешнего (максимального) давления (p_z) к снижению среднего давления в порошке, что должно снижать плотность компакта. Так, для одноосного процесса «0;0» при $p_z = 5$ ГПа расчетное гидростатическое давление составляет всего $p = 3.9$ ГПа. С другой стороны,

рост сдвиговых деформаций и напряжений, характеризуемых интенсивностями девиаторов деформаций (γ) и напряжений (τ), способствует достижению более высоких плотностей. Если для всестороннего сжатия $\gamma, \tau \equiv 0$, то для одноосного процесса $\gamma = 0.816$, а величина τ при максимальном давлении, как показывают численные оценки, достигает 1.3 ГПа.

На стадиях «упругой» разгрузки различие по плотности между промоделированными процессами становится более заметным, и составляет при полном сбросе внешнего давления около 2% между одноосным и всесторонним процессами. Причем, если при нагружении одноосный процесс характеризовался меньшими значениями плотности, то после «упругой» разгрузки меньшая плотность соответствует уже процессу всестороннего сжатия-растяжения. Изменения плотности на стадиях разгрузки $\Delta\rho_u$ для процессов «1;1» и «0;0» составляют, соответственно, 14.5% и 11.3%.

Отдельно был исследован вопрос о значимости третьих инвариантов тензоров деформаций и напряжений для описания порошкового тела. Как отмечается в [12], для широкого класса изотропных материалов, например, классические упругие и вязкие тела, скалярные механические свойства определяются лишь первыми двумя инвариантами этих тензоров. Данное приближение вполне оправдывает себя и при описании порошков микронного и более крупных размеров [12,19,20]. Однако для наноразмерных порошков данное приближение до сих пор не проверялось. С целью выполнения такой проверки нами были проанализированы процессы «0;1», «0;0.5» и «0;-0.2» в сравнении с их аналогами – процессами « κ_n, κ_n » (8), см. Рис. 2. Несмотря на равенство отношений γ/ε , анализируемые пары процессов характеризуются различными значениями третьего инварианта тензора деформаций.

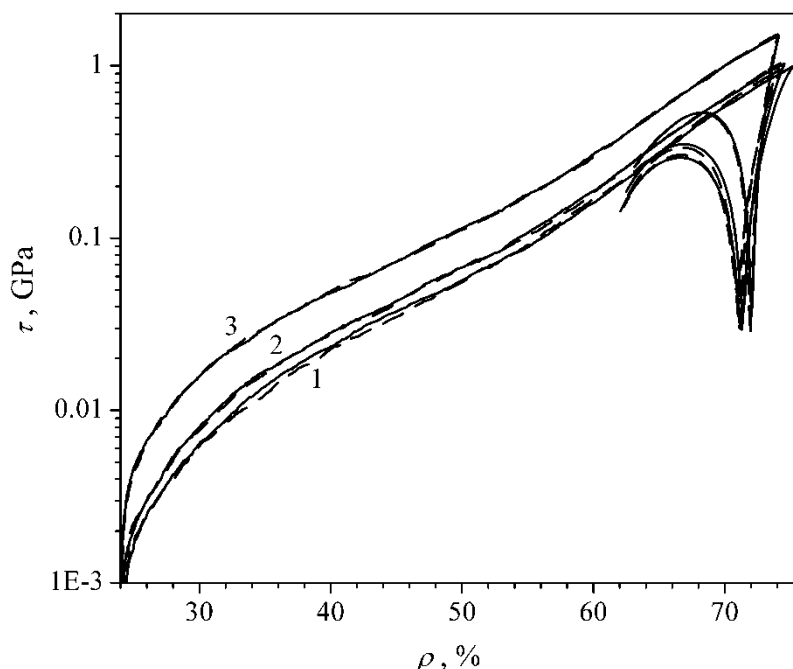


Рис. 2. Интенсивность девиатора напряжений в зависимости от плотности компакта для процессов: «0;1», «0;0.5» и «0;-0.2» (сплошные линии 1, 2 и 3, соответственно); « κ_1, κ_1 », « κ_2, κ_2 » и « κ_3, κ_3 » (штриховые линии 1, 2 и 3, соответственно)

Если в качестве дополнительной характеристики использовать величину $I_3 = \|\gamma_{ij}\|^{1/3} / \varepsilon$ (где $\|\gamma_{ij}\| = \gamma_{xx}\gamma_{yy}\gamma_{zz}$ – определитель девиатора деформаций), то для пары процессов «0;1» и « κ_1, κ_1 » имеем $I_3 = -0.21$ и $+0.21$, соответственно; для пары «0;0.5» и « κ_2, κ_2 » – 0 и 0.24; для пары «0;-0.2» и « κ_3, κ_3 » – 0.56 и 0.58. Как следствие, данные пары характеризуются различными значениями отдельных компонент тензора напряжений и аналогичного третьего инварианта девиатора напряжений. Так, для пары «0;0.5» – « κ_2, κ_2 » при давлении $p_z = 5$ ГПа плотность компакта достигает $\rho \cong 74.5\%$, и «боковые» давления в процессе «0;0.5» составляют $p_x \cong 3.6$ ГПа и $p_y \cong 4.3$ ГПа, а в процессе « κ_2, κ_2 » – $p_x \cong p_y \cong 3.8$ ГПа. Тем не менее, несмотря на явное различие в напряженном состоянии, реализуемом в данных процессах, кривые их уплотнения в инвариантных переменных $p(\rho)$ и $\tau(\rho)$ совпадают в пределах погрешности расчета. Зависимости интенсивности девиатора напряжений от плотности компакта всех шести анализируемых процессов представлены на Рис. 2. Видно, что кривые $\tau(\rho)$ каждой пары удовлетворительно согласуются как на стадии нагружения, так и на стадиях разгрузки. Аналогичное согласие демонстрируют и кривые $p(\rho)$. Таким образом, совпадение кривых $p(\rho)$ и $\tau(\rho)$ для процессов с различными значениями третьих инвариантов тензоров деформаций и напряжений подтверждает традиционно используемую в теории пластичности гипотезу о достаточности первых двух инвариантов данных тензоров для описания наноразмерных порошковых систем.

4. Выделение «упруго-обратимого» вклада

В работах [17,18] упругий вклад $\Delta\rho_e$ в суммарном изменении плотности компакта на стадии уплотнения был отождествлен со значением $\Delta\rho_u$ – изменением плотности, фиксируемым на стадии сброса внешнего давления. Однако такое отождествление не является строгим, поскольку на стадии сброса давления в порошковой системе одновременно с процессами упругой разгрузки межчастичных контактов неизбежно происходят процессы относительного (тангенциального) проскальзывания частиц, соответствующие с макроскопической точки зрения процессу пластического течения материала. По этой же причине оценку модуля всестороннего сжатия

$$K_p = \rho \left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{ela}, \quad (9)$$

произведенную в работе [39] по наклону кривой $p_z(\rho)$ на начальном участке сброса давления, можно считать лишь «оценкой снизу». Стоит также отметить высокую трудозатратность такой оценки упругих свойств. Анализ их изменения с ростом плотности компакта требует моделирования большого количества ветвей упругой разгрузки [17,39].

В связи со сказанным в настоящей работе был реализован принципиально иной способ оценки упругих свойств компакта. Упругое приращение напряжений $\Delta\sigma_{ij}$ в моделируемой системе, соответствующее малому приращению плотности $\Delta\rho$, «замерялось» на каждом шаге деформации модельной ячейки сразу же после изменения ее размеров и пропорционального приращения соответствующих координат всех частиц. Только после этого измерения «включался» механизм релаксации, т.е. начиналось перемещение частиц к новым положениям равновесия. Таким образом, процессы взаимного проскальзывания оказываются отделены от чисто упругой деформации. Стоит отметить, что относительные перемещения частиц,

пропорциональные деформированию модельной ячейки, соответствуют известному приближению Фойгта для поля деформаций в сплошной среде [28].

Принимая в качестве предположения изотропность порошкового компакта, можем использовать для описания его упругих свойств закон Гука в виде [40,41]

$$\Delta\sigma_{ij} = K_p \varepsilon + 2\mu_e \left(\Delta\varepsilon_{ij} - \frac{\varepsilon}{3} \delta_{ij} \right), \quad 2\mu_e = 3K_p \frac{1-2\nu_p}{1+\nu_p}, \quad (10)$$

что позволяет определить упругие модули порошкового тела K_p и ν_p . Выражение для модуля всестороннего сжатия записано выше, см. ур. (9), а коэффициент Пуассона ν_p для моделируемых процессов может быть определен по отношению приращений различных компонент тензора напряжений, например,

$$\langle\langle 0.5;1 \rangle\rangle: \left. \frac{\Delta p_x}{\Delta p_z} \right|_{ela} = \frac{1+3\nu_p}{2+\nu_p}; \quad \langle\langle 0;1 \rangle\rangle: \left. \frac{\Delta p_x}{\Delta p_z} \right|_{ela} = 2\nu_p; \quad \langle\langle 0;0 \rangle\rangle: \left. \frac{\Delta p_x}{\Delta p_z} \right|_{ela} = \frac{\nu_p}{1-\nu_p}. \quad (11-a)$$

Отметим, что для процесса «1;1» (всестороннее однородное сжатие) коэффициент Пуассона определить невозможно, а для процессов с тремя различными диагональными компонентами тензора деформаций, например, процесс «0;0.5», коэффициент Пуассона можно определить, используя различные пары компонент тензора напряжений:

$$\langle\langle 0;0.5 \rangle\rangle: \left. \frac{\Delta p_x}{\Delta p_z} \right|_{ela} = \frac{3\nu_{p,x}}{2-\nu_{p,x}}; \quad \left. \frac{\Delta p_y}{\Delta p_z} \right|_{ela} = \frac{1+\nu_{p,y}}{2-\nu_{p,y}}. \quad (11-b)$$

В случае справедливости приближения изотропности значения $\nu_{p,x}$ и $\nu_{p,y}$, конечно же, должны совпадать. Полученные с использованием выражений (9)–(11) упругие модули представлены на Рис. 3 и 4.

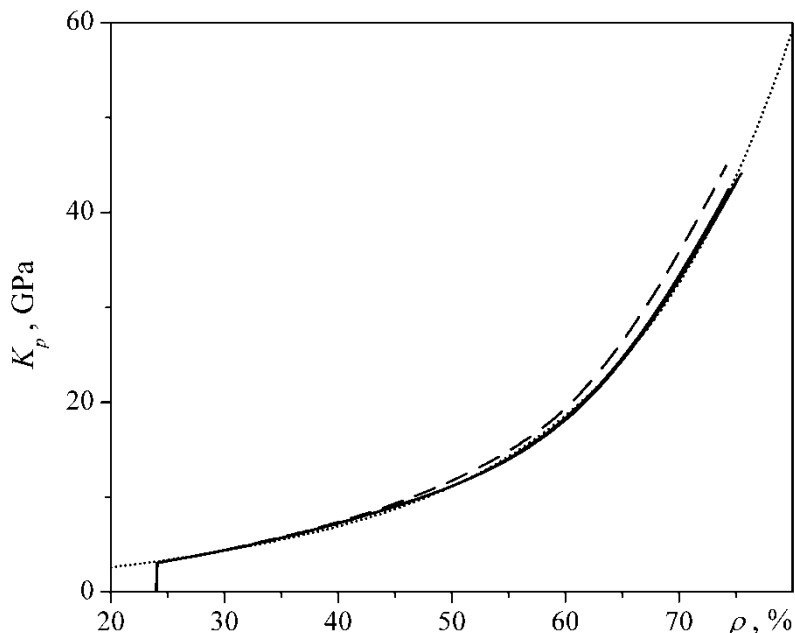


Рис. 3. Модуль всестороннего сжатия, рассчитанный по ур. (9), для процессов «1;1», «0;1», «0;0» (сплошные линии снизу вверх, почти неразрешимы) и «0;–0.3» (штриховая линия). Пунктирная линия – аппроксимация по ур. (12)

Рисунок 4 показывает, что коэффициент Пуассона не может рассматриваться как однозначная функция плотности компакта - мы наблюдаем различные зависимости $\nu_p(\rho)$ для различных процессов, а также несовпадение значений $\nu_{p,x}$ и $\nu_{p,y}$ для

процесса «0;0.5». Это свидетельствует о том, что упругие свойства моделируемой системы не могут описываться законом (10) с двумя упругими модулями, т.е. приближение изотропности материала для уплотняемого порошка не выполняется. Расчетные данные показывают, что распределение направлений межчастичных контактов в порошковой системе изотропно в пределах погрешности расчета во всех промоделированных процессах, однако распределение контактных сил имеет заметную угловую зависимость (см., например, Рис. 14 в [16]). Последнее, видимо, в совокупности с нелинейным законом упругого взаимодействия частиц (4) приводит к существенной анизотропии упругих свойств компакта, наведенной условиями внешнего нагружения.

Несмотря на отмеченную выше наведенную анизотропию определяемый первыми инвариантами тензоров деформации и напряжений модуль всестороннего сжатия K_p , представленный на Рис. 3, определяется для большинства промоделированных процессов вполне однозначно, и удовлетворительно аппроксимируется общим выражением

$$K(\rho) = k_1\rho + k_2\rho \exp(k_3\rho), \quad (12)$$

с коэффициентами $k_1 = 10.987$ ГПа, $k_2 = 0.638$ ГПа, $k_3 = 5.744$. Исключение составляют лишь процессы с растяжением вдоль оси Oy . Здесь, по-видимому, проявляется близость к поверхности разрушения порошкового тела, которая согласно исследованиям [17,25] располагается на плоскости « p - τ » несколько левее кривой $\tau(p)$ процесса одноосного сжатия «0;0».

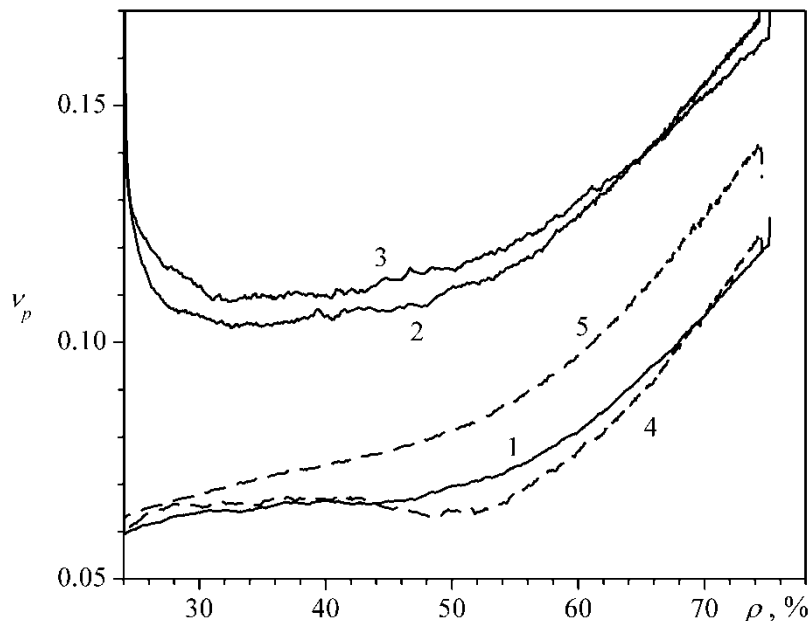


Рис. 4. Коэффициент Пуассона, рассчитанный по ур. (11), для процессов «0.5;1», «0;1» и «0;0» (сплошные линии 1, 2 и 3, соответственно), а также коэффициенты $v_{p,x}$ (штриховая линия 4) и $v_{p,y}$ (штриховая линия 5) для процесса «0;0.5»

При известной зависимости $K_p(\rho)$ упругую составляющую приращения плотности $\Delta\rho_{ela}$, накапливаемую в процессе нагружения, можно рассчитать по уравнению:

$$\Delta\rho_{ela} = \int_0^p \frac{\rho}{K_p(\rho)} dp. \quad (13)$$

Вычисляя численно записанный интеграл вдоль кривой нагружения $p(\rho)$, получаем взаимосвязь $\Delta\rho_{ela}$ с параметрами, которые определяют состояние порошкового компакта (ρ , p , p_{max} и др.). Полученные таким образом зависимости $\Delta\rho_{ela}(p)$ представлены на Рис. 5. Заметное различие в кривых $\Delta\rho_{ela}(p)$ для процессов с практически совпадающими зависимостями $K_p(\rho)$ обусловлено различием в кривых уплотнения $p(\rho)$, которые неявно входят в подинтегральное выражение ур. (13).

Кривые $\Delta\rho_{ela}(p_{max})$ имеют такой же нелинейный характер, что и кривые на Рис. 5, и качественно соответствуют аналогичным зависимостям, представленным в работе [17]. В количественном плане, полученные значения упругой деформации $\Delta\rho_{ela}$ несколько ниже значений, соответствующих близкой по параметрам модельной системе II в работе [17], где упругая часть приращения плотности отождествлялась с величиной $\Delta\rho_u$. Так, при давлении $p_{max} = 5$ ГПа для процесса всестороннего сжатия системы II в [17] получено $\Delta\rho_{ela} = 14.65\%$, в то время как сейчас для процесса «1;1» мы имеем $\Delta\rho_{ela} = 12.68\%$. Снижение расчетных значений упругой деформации связано с исключением в алгоритме расчета упругих свойств, используемым в настоящей работе, вклада процессов пластического характера (взаимное проскальзывание частиц).

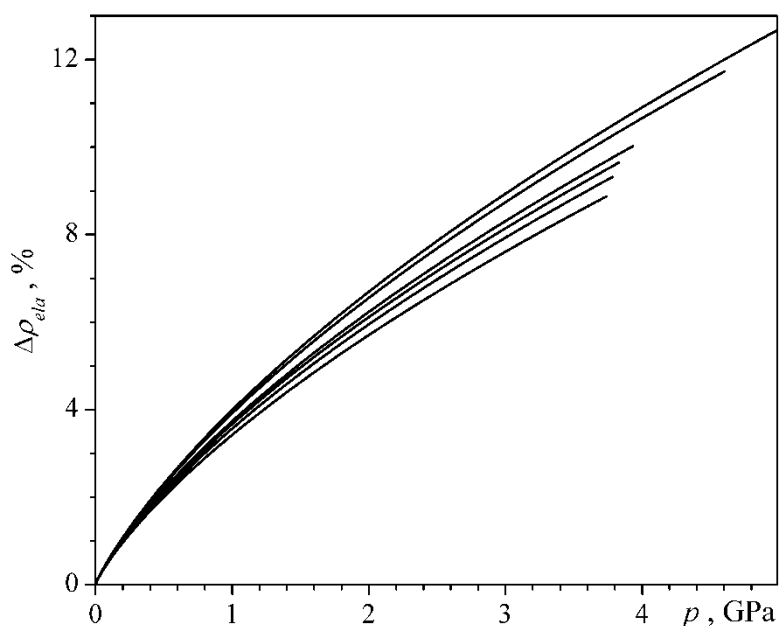


Рис. 5. Упругая часть приращения плотности компакта, вычисленная по расчетным кривым уплотнения и ур. (9), (13), в зависимости от гидростатического давления p для процессов (линии сверху вниз): «1;1», «0;1», «0;0», «0;-0.1», «0;-0.2» и «0;-0.3»

Полученные зависимости $\Delta\rho_{ela}(p)$ позволяют выделить из общей деформации модельной ячейки $\rho(p)$ необратимую (пластическую) составляющую $\rho_{plast} = \rho - \Delta\rho_{ela}$. Зависимость величины ρ_{plast} от внешнего давления представлена на Рис. 6. Там же для сравнения представлены исходные кривые уплотнения $\rho(p_{max})$, содержащие упругий вклад $\Delta\rho_{ela}$. Зависимости $\rho_{plast}(p_{max})$, также как и исходные зависимости, соответствующие различным процессам, достаточно близки друг к другу. Интересно отметить, что при относительно низких давлениях ($p_{max} \leq 100$ МПа) наибольшие

значения достигаемой плотности (как ρ , так и ρ_{plast}) реализуются в процессе всестороннего сжатия «1;1», а в области высоких давлений ($p_{max} > 1$ ГПа) ввиду высоких значений упругого вклада $\Delta\rho_{ela}$ этот процесс характеризуется уже наименьшими значениями пластической составляющей ρ_{plast} . Различие значений ρ_{plast} между процессами одноосного и всестороннего сжатия достигает 1.5% при $p_{max} = 5$ ГПа. В гипотетическом пределе неограниченно высоких давлений ($p_{max} \rightarrow \infty$) зависимости $\rho_{plast}(p_{max})$ близки к степенному виду $\rho_{plast} = \rho_{\infty} - k_p / p_{max}^{1/2}$, что позволяет оценить максимально возможную плотность компактов ρ_{∞} . Для исследованных процессов, как показывает вставка на Рис. 6, она лежит в диапазоне от 67% (всестороннее сжатие «1;1») до 72% (процесс «0;-0.3»).

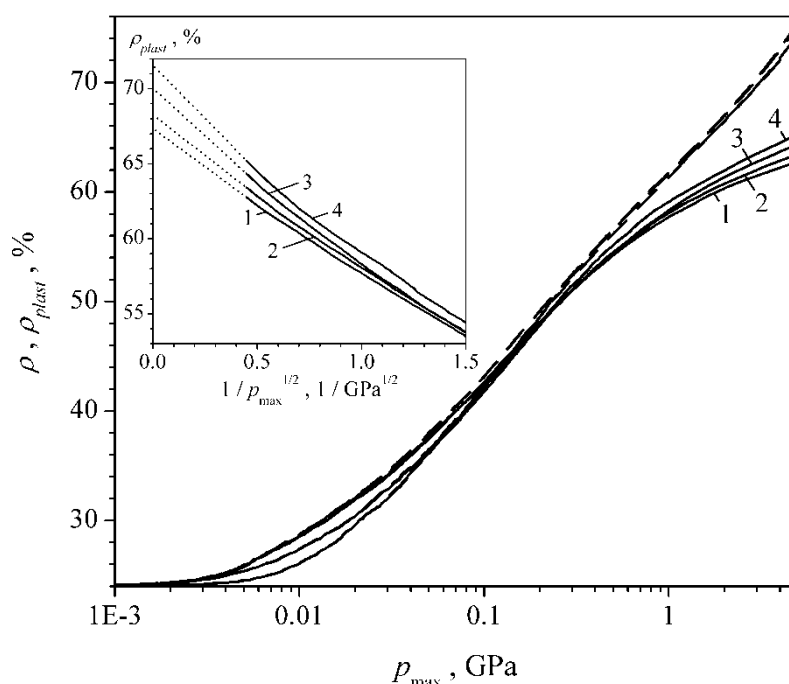


Рис. 6. Плотность компакта ρ (штриховые линии) и пластично-необратимый вклад ρ_{plast} (сплошные линии) в зависимости от максимального внешнего давления (p_{z_0} вдоль оси Oz) для процессов «1;1», «0;1», «0;0» и «0;-0.3» (линии 1, 2, 3 и 4, соответственно). На вставке: величины ρ_{plast} в области высоких давлений и аппроксимация к пределу $p_{max} \rightarrow \infty$ (пунктирные линии)

5. Поверхность нагружения

Ключевым параметром деформируемого тела при описании его механических свойств в рамках феноменологии теорий пластичности [12-15,19,20] является поверхность нагружения, которая в пространстве компонент тензора напряжений определяет границу между областью упругих деформаций и областью пластичного течения. В отличие от пластически несжимаемых материалов, в частности, компактных металлов, поверхность нагружения порошка должна зависеть не только от интенсивности девиатора напряжений (τ), но и от значения первого инварианта тензора напряжений (p), а также в качестве параметра - от текущей плотности, переходя в пределе беспористого состояния в условие текучести сплошного материала. Под плотностью при этом в соответствии с принятой аналогией необходимо понимать величину ρ_{plast} , т.е. накопленные «пластические» деформации без учета упругого вклада.

Для описания поведения пористых тел, реакцией которых на изменение знака нагрузки можно пренебречь, многие исследователи используют аппроксимацию уравнения поверхности нагружения в виде эллипса в координатах « $p - \tau$ » [12-15,19]. К нанопорошковым компактам, как отмечено в предшествующих работах [17,18], эллиптическая поверхность неприменима. Если спеченное пористое тело характеризуется наличием сформированных контактов между частицами, в силу чего способно практически одинаково сопротивляться растягивающим и сжимающим деформациям, то порошок оказывает относительно слабое сопротивление растягивающим деформациям. Следствием этого является существенное искажение эллипса текучести и заметный общий сдвиг в сторону положительных значений гидростатического давления [17,18].

Другой отмеченной в [17,25] особенностью порошкового тела является наличие поверхности разрушения (fracture surface) в области процессов с растягивающими напряжениями. В пространстве инвариантов « $p - \tau$ » поверхность разрушения располагается несколько левее кривой $\tau(p)$, соответствующей одноосному сжатию «0;0». В связи с этим, в настоящей работе мы использовали процессы лишь с относительно небольшим растяжением («0;-0.1», «0;-0.2» и «0;-0.3»), располагающиеся на плоскости « $p - \tau$ » вблизи кривой одноосного сжатия. При этом, в основном, анализу подвергается область сжимающих деформаций, в диапазоне от одноосного до всестороннего уплотнения, которая отвечает за т.н. «консолидирующую» часть поверхности нагружения (the consolidation locus of yield surface [19]).

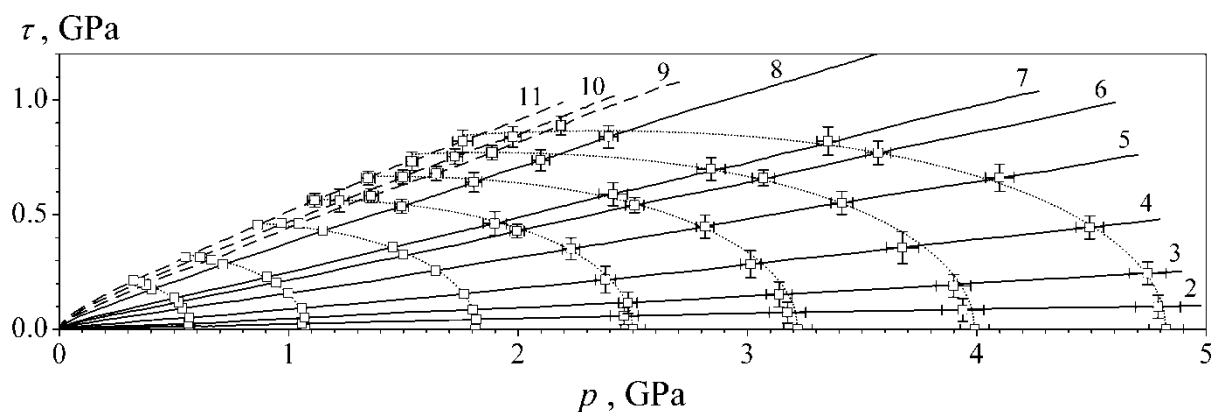


Рис. 7. Зависимости интенсивности девиатора напряжений от гидростатического давления для промоделированных процессов (номера линий соответствуют номерам процессов в разделе 2). Точками отмечены состояния, соответствующие значениям $\rho_{plast} = 0.55, 0.58, 0.60, 0.61, 0.617, 0.622$ и 0.627 . Пунктирные линии показывают положения поверхности нагружения по ур. (14) для этих значений ρ_{plast}

Кривые уплотнения промоделированных процессов в пространстве инвариантов « $p - \tau$ », а также точки (p, τ) на этих кривых, соответствующие заданным значениям плотности ρ_{plast} , представлены на Рис. 7. Для 4-х бóльших значений ρ_{plast} (0.61, 0.617, 0.622 и 0.627) показаны также погрешности статистического усреднения расчетных данных. При меньших плотностях диапазон погрешностей становится сопоставим, или даже меньше, размера точек на рисунке. Кривая всестороннего сжатия «1;1» (линия 1) в этих координатах располагается вдоль оси абсцисс. В пределах статистического разброса все расчетные точки, представленные на Рис. 7, удовлетворительно аппроксимируются общей зависимостью $\tau(p)$ для поверхности нагружения в виде:

$$\frac{\tau}{p_a} = \left[\tau_1 + \tau_2 \left(\frac{p}{p_a} \right) \right] \sqrt{1 - \frac{p}{p_a}}, \quad (14)$$

где p_a – величина p , соответствующая заданному значению плотности ρ_{plast} при всестороннем сжатии (процесс «1;1»), т.е. координата пересечения поверхности нагружения с осью гидростатического давления; а коэффициенты τ_1 и τ_2 зависят от плотности следующим образом: $\tau_1 = 2.40 - 3.62 \rho_{plast}$, $\tau_2 = 0.51 - 0.42 \rho_{plast}$. Определяемые ур. (14) изолинии показаны на Рис. 7 пунктиром. Видно, что расположение и форма уровней поверхности нагружения, соответствующих заданным значениям плотности ρ_{plast} , в целом, подтверждает выпуклость и гладкость (без угловых точек) поверхности нагружения порошкового компакта в виде сдвинутого и деформированного эллипса.

6. Критерий течения оксидных нанопорошков

Расчитанные кривые уплотнения и построенное семейство изолиний ($\rho_{plast} = \text{const}$) поверхности нагружения, представленные на Рис. 7, позволяют провести детальный анализ характера течения порошкового тела. В рамках феноменологии пластичного тела широко используется гипотеза «ассоциированного закона» [12-14,19,20], согласно которой приращение деформаций при его течении должно быть ортогонально поверхности нагружения в пространстве компонент тензора напряжений. При этом под деформациями необходимо понимать именно пластические части полных деформаций.

Приращение полных деформаций в промоделированных процессах определяется характером деформирования модельной ячейки. Разбивая их на упругие и пластические деформации, т.е. $\Delta \varepsilon_{ij} = \Delta \varepsilon_{ij}^{(e)} + \Delta \varepsilon_{ij}^{(p)}$, определим упругие части соотношениями:

$$\Delta \varepsilon_{xx}^{(e)} = -\frac{\Delta p_x}{3K_p}, \quad \Delta \varepsilon_{yy}^{(e)} = -\frac{\Delta p_y}{3K_p}, \quad \Delta \varepsilon_{zz}^{(e)} = -\frac{\Delta p_z}{3K_p}, \quad (15)$$

которые, как нетрудно убедиться, соответствуют выражению (9) для упругого модуля всестороннего сжатия. Вычитая определяемые уравнениями (15) упругие части из полных деформаций получаем пластические деформации $\Delta \varepsilon_{ij}^{(p)}$, которые могут быть использованы для верификации феноменологической теории пластичного тела, и в частности, ассоциированного закона.

Одним из следствий ассоциированного закона является соосность девиаторов тензоров напряжений и приращения деформаций, т.е. $\tau_{ij} \propto \gamma_{ij}^{(p)}$. В случае трехосного нагружения с заданными значениями диагональных компонент тензора приращений деформаций указанная соосность устанавливает соотношение между диагональными значениями тензора напряжений, которую можно использовать для оценки, например, компоненты p_y по известным значениям p_x и p_z :

$$p_y^{(ass)} = \frac{\Delta \varepsilon_{zz}^{(p)} - \Delta \varepsilon_{yy}^{(p)}}{\Delta \varepsilon_{zz}^{(p)} - \Delta \varepsilon_{xx}^{(p)}} p_x + \frac{\Delta \varepsilon_{yy}^{(p)} - \Delta \varepsilon_{xx}^{(p)}}{\Delta \varepsilon_{zz}^{(p)} - \Delta \varepsilon_{xx}^{(p)}} p_z. \quad (16)$$

Как видно из представленного соотношения, при равенстве двух диагональных компонент тензора деформаций, соответствующие диагональные компоненты тензора напряжений также совпадают. Таким образом, для большинства из промоделированных процессов выполнимость соосности гарантирована условиями симметрии: равенство напряжений по направлениям с одинаковой скоростью деформации.

Все три диагональных компонента тензора деформаций различаются в процессах «0;0.5», «0;-0.1», «0;-0.2» и «0;-0.3». Сопоставление расчетных величин давления p_y и величин $p_y^{(ass)}$, определяемых соотношением (16), представлено для этих процессов на

Рис. 8. Рисунок показывает достаточно хорошее совпадение величин p_y и $p_y^{(ass)}$, т.е. в пределах расчетной погрешности можно констатировать выполнение соосности девиаторов деформаций и напряжений.

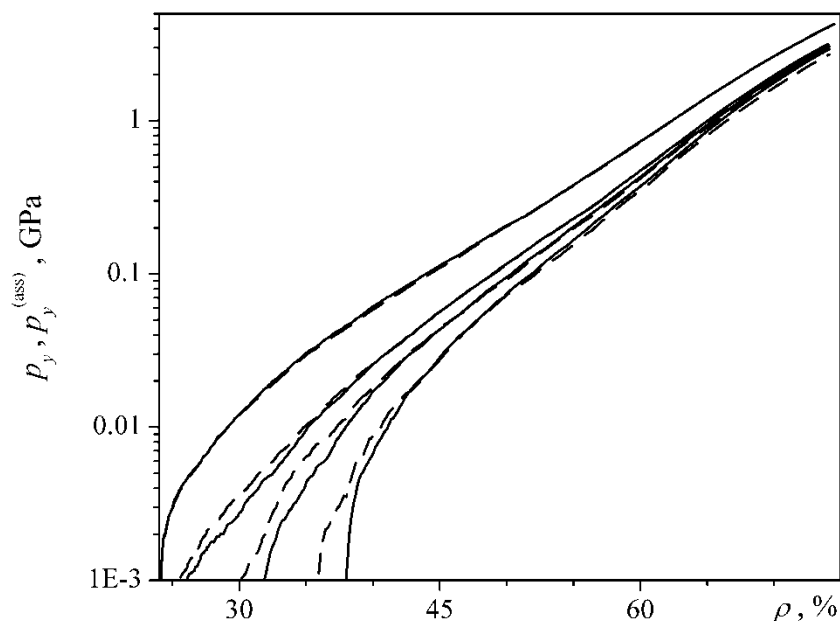


Рис. 8. Зависимость давления по оси Oy от плотности компакта для процессов (сверху вниз) «0;0.5», «0;-0.1», «0;-0.2», «0;-0.3». Сплошные линии – расчетные кривые, штриховые линии – кривые $p_y^{(ass)}$, рассчитанные по ур. (16)

Применительно к инвариантам тензоров деформаций и напряжений другим интересным следствием ассоциированного закона для порошковых тел является соотношение

$$(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)}) = \lambda_1' \nabla \Phi, \quad (17)$$

где в качестве потенциала Φ выступает либо диссипативный потенциал деформируемого тела, либо его функция нагружения, изоуровни которой совпадают с уровнями поверхности нагружения (14), представленными на Рис. 7. Как было показано в [18], выбор в качестве потенциала Φ функции нагружения предпочтителен, поскольку последняя является более наглядной, однозначной и надежной характеристикой порошкового тела. В частности, установлено, что поверхность нагружения практически не зависит от промежуточных разгрузок в процессе уплотнения и, как следствие, - от начального состояния, определяемого начальной плотностью ρ_0 , прессуемого порошка.

Соотношение (17) требует [14], чтобы направление вектора пластических деформаций $(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)})$ было ортогонально изоуровням поверхности нагружения, показанным на Рис. 7. На Рис. 9 представлены направления векторов $(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)})$ и векторов $\nabla \Phi$ для двух изолиний, при $\rho_{plast} = 0.60$ и 0.627 . Видим, что выполнение ассоциированного закона (17), т.е. коллинеарность векторов $(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)})$ и $\nabla \Phi$, наблюдается только в тривиальном случае всестороннего сжатия. Малейшее отклонение от всесторонних условий, уже для процесса «0.9;1», демонстрирует заметное нарушение коллинеарности (17). При этом вектор деформирования $(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)})$ для всех процессов отклоняется от $\nabla \Phi$ в сторону кривой уплотнения $\tau(\rho)$, направление которой можно определить вектором $(\Delta \rho, \Delta \tau)$.

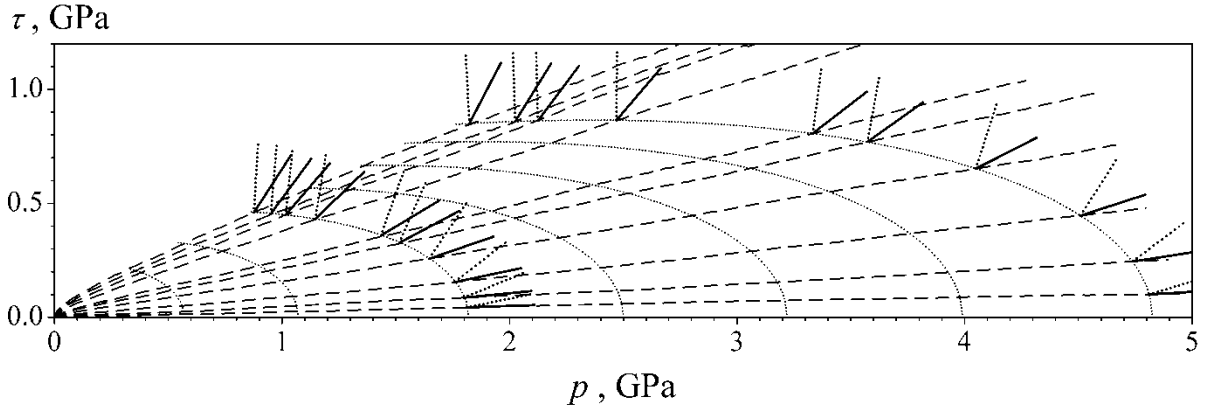


Рис. 9. Кривые уплотнения и изолинии поверхности нагружения (линии те же, что и на Рис. 7). Стрелки на пересечениях кривых уплотнения и изолиний для значений $\rho_{plast} = 0.60$ и 0.627 показывают направление вектора $\nabla\Phi$, т.е. нормали к поверхности нагружения, (верхние пунктирные стрелки) и направление вектора $(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)})$, определяющего характер деформирования, (нижние сплошные стрелки)

Отмеченная особенность позволяет сформулировать альтернативный критерий течения оксидных нанопорошков в виде [18]:

$$(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)}) = (1 - \omega) \lambda_1' \nabla\Phi + \omega \lambda_2 (\Delta p, \Delta \tau), \quad (18)$$

где ω – весовой коэффициент, определяющий влияние осуществляемого процесса на «направление» деформаций, инициируемых в порошковой системе; λ_2 – размерный коэффициент, определяемый следующим образом,

$$\lambda_2 = \lambda_1' \frac{|\nabla\Phi|}{|(\Delta p, \Delta \tau)|} = \lambda_1' \sqrt{\left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial p} \right)_\tau^2 + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial \tau} \right)_p^2 \right]} / \left[\Delta p^2 + \Delta \tau^2 \right]. \quad (19)$$

Переходя от соотношения для инвариантов (18) к тензорам деформаций и напряжений, получим общую форму записи правила течения нанопорошкового тела в виде

$$\Delta \varepsilon_{\alpha\beta} = (1 - \omega) \lambda_1' \cdot \frac{\partial\Phi}{\partial p^{\alpha\beta}} + \omega \lambda_2 \left(\Delta p \frac{\partial p}{\partial p^{\alpha\beta}} + \Delta \tau \frac{\partial \tau}{\partial p^{\alpha\beta}} \right), \quad (20)$$

где

$$\frac{\partial\Phi}{\partial p^{\alpha\beta}} = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial p} \right)_\tau \frac{\partial p}{\partial p^{\alpha\beta}} + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial \tau} \right)_p \frac{\partial \tau}{\partial p^{\alpha\beta}}, \quad \frac{\partial p}{\partial p^{\alpha\beta}} = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3}, \quad \frac{\partial \tau}{\partial p^{\alpha\beta}} = \frac{1}{\tau} (p_{\alpha\beta} - p \cdot \delta_{\alpha\beta}),$$

$\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера. Первое слагаемое справа в соотношении (20) соответствует ассоциированному закону, а второе слагаемое определяет влияние осуществляемого процесса. Рис. 9 показывает, что весовой коэффициент этого влияния ω не является постоянным. С приближением к процессу всестороннего сжатия вектор деформирования $(\varepsilon^{(p)}, \gamma^{(p)})$ становится гораздо ближе к вектору $(\Delta p, \Delta \tau)$, т.е. весовой коэффициент становится близок к единице.

Можно предположить, что величина ω является функцией производной $\tau_p = d\tau / dp$ вдоль кривой $\tau(p)$, определяющей процесс компактирования. Вводя единичные векторы

$$v = \frac{(e, \gamma)}{|(e, \gamma)|}, \quad n = \frac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|}, \quad t = \frac{(1, \tau_p)}{|(1, \tau_p)|},$$

и требуя обращения в ноль векторного произведения векторов v и $(1 - \omega)n + \omega t$, получим для расчета величины ω соотношение:

$$\omega = \frac{v_1 n_2 - v_2 n_1}{v_1(n_2 - t_2) - v_2(n_1 - t_1)}. \quad (21)$$

Значения коэффициента ω в зависимости от отношения τ_p , рассчитанные по этому соотношению, для пересечений кривых уплотнения всех исследованных процессов с 7-ю изолиниями, показанными на Рис. 7 и 9, представлены на Рис. 10. Анализ полученных данных показывает, что функция $\omega(\tau_p)$ не зависит от величины ρ_{plast} , т.е. является общей для всех изолиний, и удовлетворительно аппроксимируется выражением:

$$\omega = \omega_1 - \omega_2 \tau_p, \quad (22)$$

с коэффициентами $\omega_1 = 0.9$ и $\omega_2 = 1.0$. Полученное выражение (22) замыкает систему предшествующих соотношений, определяющих изменение компонент тензора деформаций порошкового компакта при заданном внешнем воздействии, т.е. при заданном приращении компонент тензора напряжений.

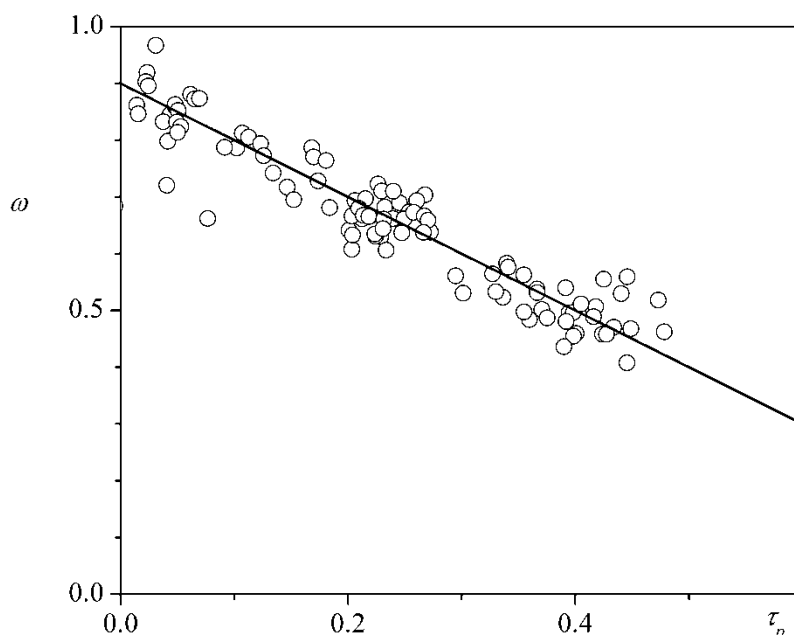


Рис. 10. Параметр ω , определяющий в соответствии с ур. (18)–(20) направление вектора пластических деформации, в зависимости от отношения скорости изменения инвариантов тензора напряжений

7. Заключение

Для модельной системы, которая соответствует наноразмерному порошку оксида алюминия, рассчитаны кривые уплотнения при компактировании в различных условиях. Рассмотрены процессы всестороннего однородного сжатия, двух- и одноосного прессования, а также ряд процессов всестороннего неоднородного сжатия, т.е. с различной скоростью сжатия вдоль различных направлений. Исследованы упругие свойства порошковых компактов. Обнаружена инвариантность модуля всестороннего сжатия и непостоянство коэффициента Пуассона, что говорит о неприменимости приближения изотропного тела к порошковому компакту и, как следствие, недостаточности двух упругих модулей для описания его упругих свойств. Тем не менее, надежно устанавливаемое значение модуля всестороннего сжатия

позволяет определить упругие и пластические части приращения плотности и тензора деформаций.

Выполнена верификация теории пластично уплотняемого пористого тела [12-15], традиционно применяемой для описания порошковых компактов. Установлена нечувствительность механических свойств порошкового тела от значений третьих инвариантов тензоров деформаций и напряжений, а также соосность девиаторов деформаций и напряжений, что полностью согласуется с традиционными теоретическими представлениями. Однако, в целом, следует признать, что известное ассоциированное правило пластического течения неприменимо к наноразмерным оксидным порошкам, поскольку в пространстве инвариантов тензора напряжений вектор инвариантов тензора приращений пластических деформаций оказывается неортогонален изоуровням поверхности нагружения. Вместо традиционного ассоциированного закона предложен другой критерий, который позволяет предсказать характер деформационных процессов в системе. Согласно предложенному критерию, вид тензора приращений деформаций определяется не только направлением вектора-градиента функции нагружения (ассоциированный закон), но и направлением «вектора», который определяет изменение компонент тензора напряжений при реализуемом процессе компактирования. Соотношение вкладов от этих двух векторов задается весовым коэффициентом ω . Сформулирована полная система соотношений, однозначно определяющая изменение компонент тензора деформаций в исследуемых системах при заданном внешнем воздействии. Помимо критерия течения данная система содержит аппроксимацию изоуровней поверхности нагружения и зависимость весового коэффициента ω от инвариантов тензора напряжений.

Благодарности. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект 16-08-00277).

Литература

- [1] Pickens JR. Review: Aluminium powder metallurgy technology for high-strength applications. *J. Mater. Sci.* 1981;16(6): 1437-1457.
- [2] Bengisu M, Inal OT. Densification and mechanical properties of shock-treated alumina and its composites. *J. Mater. Sci.* 1994;29(18): 4824-4833.
- [3] Pecharroman C, Mata-Osoro G, Diaz LA, Torrecillas R, Moya JS. On the transparency of nanostructured alumina: Rayleigh-Gans model for anisotropic spheres. *Opt. Express.* 2009;17(8): 6899-6912.
- [4] Roussel N, Lallemand L, Chane-Ching JY, Guillemet-Fristch S, Durand B, Garnier V, Bonnefont G, Fantozzi G, Bonneau L, Trombert S, Garcia-Gutierrez D. Highly Dense, Transparent α -Al₂O₃ Ceramics From Ultrafine Nanoparticles Via a Standard SPS Sintering. *J. Am. Ceram. Soc.* 2013;96(4): 1039-1042.
- [5] Shen L, Hu C, Zhou S, Mukherjee A, Huang Q. Phase-dependent photoluminescence behavior of Cr-doped alumina phosphors. *Opt. Mater.* 2013;35(6): 1268-1272.
- [6] Penilla EH, Kodaera Y, Garay JE. Blue-Green Emission in Terbium-Doped Alumina (Tb:Al₂O₃) Transparent Ceramics. *Adv. Funct. Mater.* 2013;23(48): 6036-6043.
- [7] Luo J, Xu J. Y₂O₃-doped Al₂O₃ transparent ceramics prepared by low temperature microwave sintering. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Advanced Design and Manufacturing Engineering (ICADME 2015)*. Shenzhen: Atlantis Press; 2015. p.99-103.
- [8] Zhou C, Jiang B, Fan J, Mao X, Pan L, Jiang Y, Zhang L, Fang Y. Translucent Al₂O₃ ceramics produced by anaqueous tape casting method. *Ceram. Int.* 2016;42(1): 1648-1652.
- [9] Kaygorodov AS, Ivanov VV, Khrustov VR, Kotov YA, Medvedev AI, Osipov VV, Ivanov MG, Orlov AN, Murzakaev AM. Fabrication of Nd:Y₂O₃ transparent ceramics by

pulsed compaction and sintering of weakly agglomerated nanopowders. *J. Eur. Ceram. Soc.* 2007;27(2-3): 1165-1169.

[10] Bagayev SN, Osipov VV, Shitov VA, Pestryakov EV, Kijko VS, Maksimov RN, Lukyashin KE, Orlov AN, Polyakov KV, Petrov VV. Fabrication and optical properties of Y_2O_3 -based ceramics with broad emission bandwidth. *J. Eur. Ceram. Soc.* 2012;32(16): 4257-4262.

[11] Филоненко ВП, Хвостанцев ЛГ, Баграмов РХ, Трусов ЛИ, Новиков ВИ. Компактирование порошков вольфрама различной дисперсности гидростатическим давлением до 5 ГПа. *Порошковая металлургия.* 1992;4: 16-20.

[12] Штерн МБ, Сердюк ГГ, Максименко ЛА, Трухан ЮВ, Шуляков ЮМ. *Феноменологические теории прессования порошков.* Киев: Наук. думка; 1982.

[13] Олевский ЕА, Штерн МБ. Реологические основы процессов консолидации порошков и концепция «среднеквадратичных». *Порошковая металлургия.* 2004;7-8: 35-45.

[14] Maximenko AL, Olevsky EA, Shtern MB. Plastic behavior of agglomerated powder. *Comput. Mater. Sci.* 2008;43(4): 704-709.

[15] Boltachev GS, Nagayev KA, Paranin SN, Spirin AV, Volkov NB. Theory of the magnetic pulsed compaction of nanosized powders. In: Cabral V, Silva R. (eds.) *Nanomaterials: Properties, Preparation and Processes.* New York: Nova Science Publishers, Inc.; 2010. p.1-58.

[16] Boltachev GS, Lukyashin KE, Shitov VA, Volkov NB. Three-dimensional simulations of nanopowder compaction processes by granular dynamics method. *Phys. Rev. E.* 2013;88(1): 012209.

[17] Boltachev GS, Volkov NB, Kochurin EA, Maximenko AL, Shtern MB, Kirkova EG. Simulation of the macromechanical behavior of oxide nanopowders during compaction processes. *Granul. Mater.* 2015;17(3): 345-358.

[18] Boltachev GS, Lukyashin KE, Maximenko AL, Maksimov RN, Shitov VA, Shtern MB. Compaction and flow rule of oxide nanopowders. *Optical materials.* 2017;71: 145-150.

[19] Schwedes J. Cohesive Granular Materials. *Powder Technology.* 1975;11(1): 59-67.

[20] Nott PR. Classical and Cosserat plasticity and viscoplasticity models for slow granular flow. *Acta Mechanica.* 2009;205(1-4): 151-160.

[21] Agnolin I, Roux JN. Internal states of model isotropic granular packings. I. Assembling process, geometry, and contact networks. *Phys. Rev. E.* 2007;76(6): 061302.

[22] Gilabert FA, Roux JN, Castellanos A. Computer simulation of model cohesive powders: Influence of assembling procedure and contact laws on low consolidation states. *Phys. Rev. E.* 2007;75(1): 011303.

[23] Gilabert FA, Roux JN, Castellanos A. Computer simulation of model cohesive powders: Plastic consolidation, structural changes, and elasticity under isotropic loads. *Phys. Rev. E.* 2008;78(3): 031305.

[24] Salot C, Gotteland P, Villard P. Influence of relative density on granular materials behavior: DEM simulations of triaxial tests. *Granular Matter.* 2009;11(4): 221-236.

[25] Pizette P, Martin CL, Delette G, Sornay P, Sans F. Compaction of aggregated ceramic powders: From contact laws to fracture and yield surfaces. *Powder Technology.* 2010;198(2): 240-250.

[26] Kotov YA. Electric Explosion of Wires as a Method for Preparation of Nanopowders. *J. Nanopart. Res.* 2003;5(5-6): 539-550.

[27] Котов ЮА, Осипов ВВ, Иванов МГ, Саматов ОМ, Платонов ВВ, Азаркевич ЕИ, Мурзакаев АМ, Медведев АИ. Исследование характеристик оксидных нанопорошков, получаемых при испарении мишени импульсно-периодическим CO_2 лазером. *ЖТФ.* 2002;72(11): 76-82.

- [28] Nicot F, Darve F. A multi-scale approach to granular materials. *Mechanics of Materials*. 2005;37(9): 980-1006.
- [29] Hamaker HC. The London – van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*. 1937;4(10): 1058-1072.
- [30] Болтачев ГШ, Волков НБ. Моделирование процесса компактирования нанопорошков в рамках гранулярной динамики. *ЖТФ*. 2011;81(7): 18-29.
- [31] Boltachev GS, Volkov NB, Zubarev NM. Tangential interaction of elastic spherical particles in contact. *Int. J. Solids Struct*. 2012;49(15-16): 2107-2114.
- [32] Cattaneo C. Sul contatto di due Corpi Elastici. *Accademia dei Lincei, Rendiconti, Series 6*. 1938;27: 342-478.
- [33] Mindlin RD. Compliance of Elastic Bodies in Contact. *J. Appl. Mech. (Trans ASME)*. 1949;16: 259-268.
- [34] Mindlin RD, Deresiewicz H. Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces. *J. Appl. Mech. (Trans ASME)*. 1953;20: 327-344.
- [35] Reissner E, Sagoci HF. Forced Torsional Oscillations of an Elastic Half-Space. *J. Appl. Phys*. 1944;15(9): 652-654.
- [36] Jäger J. Axisymmetric bodies of equal material in contact under torsion or shift. *Archive of Applied Mechanics*. 1995;65(7): 478-487.
- [37] Лурье АИ. *Пространственные задачи теории упругости*. Москва: Государственное издательство технико-теоретической литературы; 1955.
- [38] Болтачев ГШ, Волков НБ, Кайгородов АС, Лознухо ВП. Особенности одноосного квазистатического компактирования оксидных нанопорошков. *Российские нанотехнологии*. 2011;6(9-10): 125-130.
- [39] Болтачев ГШ, Волков НБ, Двилис ЭС, Хасанов ОЛ. Компактирование и упругая разгрузка нанопорошков в рамках метода гранулярной динамики. *ЖТФ*. 2015;85(2): 94-101.
- [40] Ландау ЛД, Лифшиц ЕМ. *Теория упругости*. Москва: Наука; 1987.
- [41] Седов ЛИ. *Механика сплошной среды, т. 2*. Москва: Наука; 1976.

ELASTIC PROPERTIES, YIELD SURFACE AND FLOW RULE OF NANOPOWDER COMPACTS

G.Sh. Boltachev*, E.A. Chingina, N.B. Volkov, K.E. Lukyashin

Institute of Electrophysics, Ural Branch of RAS, Amundsen str. 106, Ekaterinburg, Russia

*e-mail: grey@iep.uran.ru

Abstract. Different compaction processes of the nanosized granular system, which is a prototype of an alumina nanopowder, are studied by the granular dynamics method. For all processes: compaction curves “density vs. pressure” of the powder compact are calculated, the elastic and the plastic parts are extracted from the total deformation, the body elastic moduli are determined within the isotropic solid approximation. The inadequacy of the isotropy approximation is established. The nanopowder yield surface is constructed in the space of stress tensor invariants. The inapplicability of the traditional associated flow rule for description of oxide nanopowders compaction processes is revealed. An alternative flow rule is suggested.

Keywords: nanopowder, yield surface, associated flow rule

Acknowledgements. The work was carried out with partial financial support of the RFBR (project 16-08-00277).

References

- [1] Pickens JR. Review: Aluminium powder metallurgy technology for high-strength applications. *J. Mater. Sci.* 1981;16(6): 1437-1457.
- [2] Bengisu M, Inal OT. Densification and mechanical properties of shock-treated alumina and its composites. *J. Mater. Sci.* 1994;29(18): 4824-4833.
- [3] Pecharroman C, Mata-Osoro G, Diaz LA, Torrecillas R, Moya JS. On the transparency of nanostructured alumina: Rayleigh-Gans model for anisotropic spheres. *Opt. Express.* 2009;17(8): 6899-6912.
- [4] Roussel N, Lallemand L, Chane-Ching JY, Guillemet-Fristch S, Durand B, Garnier V, Bonnefont G, Fantozzi G, Bonneau L, Trombert S, Garcia-Gutierrez D. Highly Dense, Transparent α -Al₂O₃ Ceramics From Ultrafine Nanoparticles Via a Standard SPS Sintering. *J. Am. Ceram. Soc.* 2013;96(4): 1039-1042.
- [5] Shen L, Hu C, Zhou S, Mukherjee A, Huang Q. Phase-dependent photoluminescence behavior of Cr-doped alumina phosphors. *Opt. Mater.* 2013;35(6): 1268-1272.
- [6] Penilla EH, Kodera Y, Garay JE. Blue-Green Emission in Terbium-Doped Alumina (Tb:Al₂O₃) Transparent Ceramics. *Adv. Funct. Mater.* 2013;23(48): 6036-6043.
- [7] Luo J, Xu J. Y₂O₃-doped Al₂O₃ transparent ceramics prepared by low temperature microwave sintering. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Advanced Design and Manufacturing Engineering (ICADME 2015)*. Shenzhen: Atlantis Press; 2015. p.99-103.
- [8] Zhou C, Jiang B, Fan J, Mao X, Pan L, Jiang Y, Zhang L, Fang Y. Translucent Al₂O₃ ceramics produced by anaqueous tape casting method. *Ceram. Int.* 2016;42(1): 1648-1652.
- [9] Kaygorodov AS, Ivanov VV, Khrustov VR, Kotov YA, Medvedev AI, Osipov VV, Ivanov MG, Orlov AN, Murzakaev AM. Fabrication of Nd:Y₂O₃ transparent ceramics by

- pulsed compaction and sintering of weakly agglomerated nanopowders. *J. Eur. Ceram. Soc.* 2007;27(2-3): 1165-1169.
- [10] Bagayev SN, Osipov VV, Shitov VA, Pestryakov EV, Kijko VS, Maksimov RN, Lukyashin KE, Orlov AN, Polyakov KV, Petrov VV. Fabrication and optical properties of Y_2O_3 -based ceramics with broad emission bandwidth. *J. Eur. Ceram. Soc.* 2012;32(16): 4257-4262.
- [11] Filonenko VP, Khvostantsev LG, Bagramov RK, Trusov LI, Novikov VI. Compacting tungsten powders with varying particle size using hydrostatic pressure up to 5 GPa. *Powder Metall. Met. Ceram.* 1992;31(4): 296-299.
- [12] Shtern MB, Serdyuk GG, Maksimenko LA, Truhan YV, Shulyakov YM. *Phenomenological Theories of Powder Pressing*. Kiev: Naukova Dumka; 1982. (In Russian)
- [13] Olevskii EA, Shtern MB. Rheological Foundations of Powder Consolidation Processes and the "Mean-Square" Concept. *Powder Metall. Met. Ceram.* 2004;43(7-8): 355-363.
- [14] Maximenko AL, Olevsky EA, Shtern MB. Plastic behavior of agglomerated powder. *Comput. Mater. Sci.* 2008;43(4): 704-709.
- [15] Boltachev GS, Nagayev KA, Paranin SN, Spirin AV, Volkov NB. Theory of the magnetic pulsed compaction of nanosized powders. In: Cabral V, Silva R. (eds.) *Nanomaterials: Properties, Preparation and Processes*. New York: Nova Science Publishers, Inc.; 2010. p.1-58.
- [16] Boltachev GS, Lukyashin KE, Shitov VA, Volkov NB. Three-dimensional simulations of nanopowder compaction processes by granular dynamics method. *Phys. Rev. E.* 2013;88(1): 012209.
- [17] Boltachev GS, Volkov NB, Kochurin EA, Maximenko AL, Shtern MB, Kirkova EG. Simulation of the macromechanical behavior of oxide nanopowders during compaction processes. *Granul. Mater.* 2015;17(3): 345-358.
- [18] Boltachev GS, Lukyashin KE, Maximenko AL, Maksimov RN, Shitov VA, Shtern MB. Compaction and flow rule of oxide nanopowders. *Optical materials.* 2017;71: 145-150.
- [19] Schwedes J. Cohesive Granular Materials. *Powder Technology.* 1975;11(1): 59-67.
- [20] Nott PR. Classical and Cosserat plasticity and viscoplasticity models for slow granular flow. *Acta Mechanica.* 2009;205(1-4): 151-160.
- [21] Agnolin I, Roux JN. Internal states of model isotropic granular packings. I. Assembling process, geometry, and contact networks. *Phys. Rev. E.* 2007;76(6): 061302.
- [22] Gilabert FA, Roux JN, Castellanos A. Computer simulation of model cohesive powders: Influence of assembling procedure and contact laws on low consolidation states. *Phys. Rev. E.* 2007;75(1): 011303.
- [23] Gilabert FA, Roux JN, Castellanos A. Computer simulation of model cohesive powders: Plastic consolidation, structural changes, and elasticity under isotropic loads. *Phys. Rev. E.* 2008;78(3): 031305.
- [24] Salot C, Gotteland P, Villard P. Influence of relative density on granular materials behavior: DEM simulations of triaxial tests. *Granular Matter.* 2009;11(4): 221-236.
- [25] Pizette P, Martin CL, Delette G, Sornay P, Sans F. Compaction of aggregated ceramic powders: From contact laws to fracture and yield surfaces. *Powder Technology.* 2010;198(2): 240-250.
- [26] Kotov YA. Electric Explosion of Wires as a Method for Preparation of Nanopowders. *J. Nanopart. Res.* 2003;5(5-6): 539-550.
- [27] Kotov YA, Osipov VV, Ivanov MG, Samatov OM, Platonov VV, Azarkevich EI, Murzakaev AM, Medvedev AI. Properties of Oxide Nanopowders Prepared by Target Evaporation with a Pulse-Periodic CO_2 Laser. *Technical Physics.* 2002;47(11): 1420-1426.

- [28] Nicot F, Darve F. A multi-scale approach to granular materials. *Mechanics of Materials*. 2005;37(9): 980-1006.
- [29] Hamaker HC. The London – van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*. 1937;4(10): 1058-1072.
- [30] Boltachev GS, Volkov NB. Simulation of Nanopowder Compaction in Terms of Granular Dynamics. *Technical Physics*. 2011;56(7): 919-930.
- [31] Boltachev GS, Volkov NB, Zubarev NM. Tangential interaction of elastic spherical particles in contact. *Int. J. Solids Struct.* 2012;49(15-16): 2107-2114.
- [32] Cattaneo C. Sul contatto di due Corpi Elastici. *Accademia dei Lincei, Rendiconti, Series 6*. 1938;27: 342-478.
- [33] Mindlin RD. Compliance of Elastic Bodies in Contact. *J. Appl. Mech. (Trans ASME)*. 1949;16: 259-268.
- [34] Mindlin RD, Deresiewicz H. Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces. *J. Appl. Mech. (Trans ASME)*. 1953;20: 327-344.
- [35] Reissner E, Sagoci HF. Forced Torsional Oscillations of an Elastic Half-Space. *J. Appl. Phys.* 1944;15(9): 652-654.
- [36] Jäger J. Axisymmetric bodies of equal material in contact under torsion or shift. *Archive of Applied Mechanics*. 1995;65(7): 478-487.
- [37] Lur'e AI. *Three-Dimensional Problems of the Theory of Elasticity*. NY: Interscience Publishers; 1964.
- [38] Boltachev GS, Volkov NB, Kaygorodov AS, Loznukho VP. The Peculiarities of Uniaxial Quasistatic Compaction of Oxide Nanopowders. *Nanotechnologies in Russia*. 2011;6(9-10): 639-646.
- [39] Boltachev GS, Volkov NB, Dvilis ES, Khasanov OL. Compaction and Elastic Unloading of Nanopowders in Terms of Granular Dynamics. *Technical Physics*. 2015;60(2): 252-259.
- [40] Landau LD, Lifshitz EM. *Theory of Elasticity*. Oxford: Pergamon Press; 1993.
- [41] Sedov LI. *Mechanics of Continuous Media, vol. 2*. Singapore: World Scientific; 1997.