

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

На правах рукопису

Атомістичне моделювання руху тріщини в шаруватих кераміках на основі карбіду кремнію

Галузь знань: 10 Природничі науки
Спеціальність: 104 Фізика та астрономія
Освітня програма: Фізика наносистем

Кваліфікаційна робота магістра
студента 2 року навчання
Олексія ГРИГОРЕНКО

Науковий керівник:
доцент кафедри фізики металів, кандидат
фізико-математичних наук, доцент
Василь КУРИЛЮК

Робота заслухана на засіданні кафедри фізики металів та рекомендована до захисту на ЕК, протокол №____ від «____» _____ 2026 р.

В.о. завідувача кафедри фізики металів



Михайло СЕМЕНЬКО

Київ – 2026

АНОТАЦІЯ

Олексій ГРИГОРЕНКО. Атомістичне моделювання руху тріщини в шаруватих кераміках на основі карбіду кремнію.

Кваліфікаційна робота магістра за спеціальністю 104 Фізика та астрономія, освітня програма «Фізика наносистем». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра фізики металів. – Київ – 2026.

Науковий керівник: доцент кафедри фізики металів, кандидат фізико-математичних наук, Василь КУРИЛЮК, доцент кафедри фізики металів.

Досліджено атомарні механізми деформації та кінетику поширення тріщин у 3C-SiC та тришарових нанокомпозитах SiC/C методом молекулярної динаміки. Визначено анізотропію пружних модулів і границі міцності. З'ясовано вплив температури та швидкості деформування на характер руйнування. Встановлено, що проміжний шар чистого вуглецю виступає бар'єром, який зумовлює відхилення та розгалуження тріщини, забезпечуючи псевдопластичність матеріалу.

Ключові слова: молекулярна динаміка, карбід кремнію, нанокомпозити, поширення тріщини, анізотропія, міцність.

SUMMARY

Oleksii GRYGORENKO. Atomistic simulation of crack propagation in silicon carbide-based layered ceramics.

Master's qualification in specialty 104 Physics and astronomy, educational program «Physics of nanosystems». – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, Metal Physics Department. – Kyiv. – 2026.

Research supervisor: Associate Professor of the Department of Metal Physics, PhD in Physics and Mathematics, Vasyl KURYLIUK, Associate Professor of the Department of Metal Physics.

Atomic deformation mechanisms and crack propagation kinetics in 3C-SiC and three-layer SiC/C nanocomposites are studied via molecular dynamics. The anisotropy of elastic moduli and ultimate strength is determined. The effects of temperature and strain rate on the fracture behavior are clarified. It is established that a pure carbon interlayer acts as a barrier inducing crack deflection and branching, which provides a pseudoplastic response of the material.

Key words: molecular dynamics, silicon carbide, nanocomposites, crack propagation, anisotropy, strength.

ЗМІСТ

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ.....	1
ВСТУП.....	4
I. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	6
1.1 Вступ до механіки руйнування на нанорівні 1.1	6
1.2 Вплив мікроструктури та меж зерен 1.2.....	8
1.3 Вплив зовнішніх умов 1.3.....	10
1.4 Моделювання тріщин у шаруватих кераміках (SiC) та композитах 1.4.....	13
II. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ	16
2.1 Основи методу молекулярної динаміки (МД) 2.1.....	16
2.2 Вибір міжатомного потенціалу для SiC 2.2	19
2.3 Досліджувані структури 2.3	23
III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	25
3.1. Вплив кристалографічної орієнтації на механічний відгук монокристалічного SiC. 3.1.....	26
3.2. Механічна поведінка монокристалічного SiC при навантаженнях з різними швидкостями деформації. 3.2.....	30
3.3. Температурний вплив на механічну поведінку монокристалічного SiC при навантаженні. 3.3.....	32
3.4. Особливості кінетики тріщини в монокристалі SiC в умовах навантаження. 3.4	34
3.5. Вплив концентрації вуглецевих включень на механічний відгук композитів на основі SiC. 3.5	36
3.6. Вплив температури на механічний відгук композитів на основі SiC з вуглецевими включеннями. 3.6.....	40

ВИСНОВКИ	43
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	44

ВСТУП

Сучасний прогрес у таких сферах як аерокосмічної інженерії, військової справи, ядерної енергетики та мікроелектроніки критично залежить від розробки та впровадження нових конструкційних матеріалів, які будуть здатні функціонувати в екстремальних умовах. Серед таких матеріалів можна зазначити карбід кремнію (SiC), та зокрема його кубічна поліморфна модифікація (3C-SiC). Він поєднує цікаві фізико-хімічні властивості: високу механічну міцність, великий модуль пружності, високій теплопровідності і при цьому низьке термічне розширення, а також гарну радіаційну та хімічну стійкості.

Проте, не дивлячись на цей набір характеристик, широке промислове застосування монокристалічного SiC буде обмежуватись його внутрішньою вадою, а саме високою крихкістю. Для подолання цього обмеження сучасне матеріалознавство розглядає концепцію наноструктурного модифікування на основі системи SiC–вуглець. Введення вуглецевих включень або додавання міжфазних шарів дозволяє змінювати природу розповсюдження тріщин,.

Але разом із цим, експериментальне дослідження кінетики руйнування саме у зоні вершини тріщини на наноскопічному масштабі є надзвичайно складним завданням. Тут на допомогу приходять методи комп'ютерного моделювання, зокрема метод молекулярної динаміки (МД). МД моделювання дозволяє з атомарною роздільною здатністю відстежувати еволюцію міжатомних зв'язків, фіксувати локальні поля деформацій та досліджувати вплив внутрішніх факторів (таких як кристалографічна орієнтація, температура та швидкість деформування) на деформацію матеріалу.

Метою кваліфікаційної роботи є встановлення атомарних механізмів деформації та кінетики поширення тріщин у монокристалічному 3C-SiC та тришарових нанокомпозитах на його основі залежно від кристалографічної орієнтації, термодинамічних умов, швидкісних режимів навантаження та концентрації вуглецевих включень у модифікованій зоні.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити такі завдання:

1. Сформувати атомістичні моделі монокристалічного кубічного карбіду кремнію з початковими крайовими тріщинами, та дослідити залежно від трьох різних кристалографічних площинах: (001), (110) та (111).
2. Розрахувати криві «напруження–деформація» для згенерованих орієнтацій за умов одновісного розтягу.
3. Дослідити вплив швидкості деформації.
4. Оцінити температурну деградацію механічних властивостей.
5. Створити тришарові композитні моделі із модифікованим середнім шаром, що характеризується різною концентрацією вуглецю $x(C) = 75\%, 87.5\%, 100\%$, та проаналізувати зміну їх параметрів.

У роботі на атомарному рівні деталізовано кінетику переходу від ідеально крихкого руйнування до псевдопластичного деформування тришарових композитів SiC/C. Виявлено та фізично обґрунтовано специфічний механізм об'ємного термоактивованого руйнування нестехіометричних вуглецевих шарів у матриці SiC при високих температурах.

Отримані теоретичні дані та встановлені залежності мають безпосереднє значення для розвитку обчислювального матеріалознавства керамічних і нанокомпозитних матеріалів. Результати моделювання щодо впливу кристалографічної орієнтації та концентраційних параметрів модифікованих шарів можуть бути використані як критерії оптимізації при реальному синтезі шаруватих та армованих наноструктур з метою створення конструкційних елементів із підвищеною тріщиностійкістю для потреб новітньої техніки.

I. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Вступ до механіки руйнування на нанорівні 1.1

Руйнування матеріалу -- це багатомасштабним явищем і воно починається на атомному рівні внаслідок розриву міжатомних зв'язків . Поведінка тріщини та особливості її поширення сильно залежать від таких параметрів: локальне атомне середовище, а саме від атомної структури, просторова орієнтація кристалевої ґратки та дискретний розподіл матерії навколо якогось дефекту. Особливості поширення тріщин на нанорівні визначаються за допомогою постійною конкуренцією між двома фундаментальними процесами: крихким розростанням тріщини (тобто через безпосередній розрив міжатомних зв'язків) та зародженням дефектів, наприклад дислокації, безпосередньо біля вістря тріщини. Так як континуальна механіка не може адекватно описати ці дискретні процеси, для дослідження різної механіки руйнування на нанорівні критично важливим є використання методів атомно-масштабного моделювання, зокрема один з таких методів – це молекулярної динаміки (МД). Перехід від крихкого до пластичного руйнування напряму залежить від матеріалу та його здатності до емісії дислокацій з вістря тріщини. [1] Коли зовнішнє навантаження перевищує критичне напруження, яке необхідне для росту тріщини, тоді первинний механізм поширення може змінюватися від повністю крихкого до пластичної поведінки, що і описується зародженням та емісією дислокацій. Цікава особливість ще в тому, що якщо матеріал здатен легко випромінювати дислокації (наприклад, часткові дислокації Шоклі), які потім будуть ковзати вздовж щільноупакованих площин, вістря тріщини буде затуплятися. [2] Цей механізм релаксує локальну концентрацію напружень і буде сприяти в'язкому руйнуванню. [3]

Натомість придушення емісії дислокацій на вістрі тріщини, що може бути викликано різними процесами, наприклад накопиченням домішок,

зниженням температури або наявністю структурних бар'єрів викликає перехід оберненого характеру, а саме від в'язкого до крихкого механізму руйнування. Гарним прикладом того, як різні матеріали з однаковою кристалічною ґраткою, наприклад (ГЦК), можуть демонструвати кардинально різні механізми руйнування (експерименти при порівнянні міді (Cu) та алюмінію (Al)) [1]. Хоч на макрорівні обидва метали зазвичай вважаються доволі пластичними, комп'ютерне атомне моделювання показує, що тріщини в міді (Cu) буде найчастіше поширюються саме крихким шляхом (за винятком дуже коротких початкових тріщин, де емісія дислокацій буде передувати розповсюдженню). У міді після досягнення деякого максимального напруження відбувається швидкий крихкий скол, а концентрація напружень все ж залишається локалізованою поблизу вістря даної тріщини без супутнього утворення значної кількості дислокацій. Але в алюмінії (Al) руйнування буде відбуватися через інший механізм утворення та злиття мікропорожнин, яке буде безпосередньо перед вістрям тріщини. І цей процес буде супроводжуватися формуванням типового зигзагоподібного патерну руйнування (тобто чергування хребтів та западин). Саме такий зигзагоподібний характер руйнування є наслідком конкуренції на локальному рівні площини $\{111\}$ і є найбільш сприятливими для злиття порожнин. Але треба відмітити, що глобальне навантаження змушує тріщину рухатися вздовж початкової площини. Така сильна відмінність між двома механізмами руйнування Cu та Al буде пояснювати сильними відмінностями їх фізичних властивостей на атомному рівні. Зокрема, це буде зумовлено різними значеннями їх енергії утворення вакансій та поверхневої енергії. Мікропорожнини, які утворюються перед нашою тріщиною, можна розглядати як скупчення різних вакансій або ж нову внутрішню вільну поверхню. Тож до цього прикладу, енергія утворення вакансії для міді (1.272 eV) майже вдвічі перевищує цей ж показник для алюмінію (0.68 eV), а поверхнева енергія міді також буде значно вищою для всіх типів її кристалографічних площин. Що говорить про те, що через ці високі

енергетичні бар'єри утворення мікропорожнин у міді є значно складнішим енергетично порівняно з алюмінієм, і це пояснює, чому ці тріщини в Al поширюються шляхом зародження та злиття порожнин, тоді як у Cu демонструє тенденцію до крихкого поширення тріщини.

1.2 Вплив мікроструктури та меж зерен 1.2

У полікристалічних та наноструктурних матеріалах межі зерен (МЗ) відіграють дві різні ролі у процесі руйнування та розповсюдження тріщини. Вони одночасно будуть і ефективними бар'єрами для поширення її, та є потужними джерелами зародження нових дефектів структури [2]. Коли вістря тріщини наближається до межі зерна, тоді поширення тріщини сильно сповільнюється або може навіть повністю блокуватись через переривання кристалічної ґратки. До того ж через невідповідність кристалічних ґраток сусідніх зерен на їх межах утворюється велика кількість дислокацій невідповідності. [4] Ці дислокації починають виступати як емісійні центри, тобто з них під дією напружень будуть масово зароджуватися та поширюватися нові ковзні дислокації, що додатково будуть стимулювати пластичну деформацію навколо МЗ, але також це може призводити до концентрації напружень.

Окремо можна розглянути вплив меж нахилу та кручення. Геометрія межі зерна є важливим критичним фактором, що буде визначати опір матеріалу до руйнування. Дослідження різних бікристалічних структур (зокрема алюмінію та нікелю) показують фундаментальну різницю між межами нахилу та межами кручення. Таким чином, межі з високим кутом кручення чинять значно більший опір поширенню тріщини, якщо порівнювати з межами нахилу. [5] Це можна пояснити тим, що при взаємодії з висококутовою межею кручення тріщина не може далі продовжувати

прямий рух. Тобто значна структурна різниця між сусідніми зернами змушує цю тріщину змінювати свій напрямок, і її шлях часто проходить спочатку вздовж самої межі зерна (в її дефектній зоні), а вже потім може відхилитися в тіло сусіднього зерна (наприклад вздовж новоутворених двійникових меж). У дослідницьких моделях з межею кручення в нікелі також буде спостерігатись, що саме збільшення кута кручення підвищує щільність дислокацій невідповідності на межі і саме які починають блокувати рух ковзних дислокацій в даному прикладі. [4] Через це пластичність у зоні межі зерна різко падає і починають накопичуватись напруження, і тоді тріщина блокується або ж розповсюджується суто міжкристалітним шляхом.

Додатково можна розглянути механізм гальмування тріщин через утворення замків Ломера-Коттрелла. Це описується так: різниця в орієнтації зерен змушує дислокації рухатися в різних напрямках та по різних системах ковзання. [2] Бачимо, що під час розтягу матеріалу, часткові дислокації Шоклі, що емітуються як з вістря тріщини, так і з МЗ, ковзають по щільноупакованих площинах $\{111\}$. Далі, перетинаючись між собою на різних площинах, ці дислокації вступають у реакцію й тоді утворюють так звані замки Ломера-Коттрелла -- малорухомі (або сидячі) дислокаційні конфігурації. Ці замки стають складними перешкодами для руху інших дислокацій, що призводить до їх інтенсивного скупчення безпосередньо перед бар'єром. Такий збір дислокацій викликає екстремальну та локальну концентрацію напружень в матеріалі. Під дією цієї сили кристалічна структура в локальній області руйнується і відбувається в ній аморфізація (тобто поява атомів, що змістились з правильної 3D-структури ґратки) навколо замка Ломера-Коттрелла. Її енергія деформації цієї системи релаксує лише тоді, коли зв'язки між цими аморфізованими атомами остаточно розриваються. Цей процес часто призводить до ініціації нових мікротріщин або ж різкого просування основної тріщини через цю аморфізовану зону.

Ознайомимось з питанням потрібних стиків зерен та зародження порожнин (на прикладі трикристалів). Переходячи від бікристалів до

складніших трикристалічних моделей, ми будемо спостерігати процеси характерні для вже більш реальних полікристалічних матеріалів, де ключову роль зазвичай відіграють потрійні стики зерен в них. У таких трикристалах дислокації генеруються не лише на вістрі тріщини, а й на всіх трьох прилеглих меж зерен одночасно. Через суттєву різницю кристалографічних орієнтацій між трьома зернами, дислокації починають ковзати у складних напрямках, що і перетинаються безпосередньо в зоні потрійного стику. Як наслідок, біля такого потрійного стику масово будуть формуватися перехресні та замкнуті замки Ломера-Коттрелла, які взаємодіють безпосередньо з межами зерен. Така комбінація двох елементів (межа зерна та дислокаційний замок) створює набагато сильнішу концентрацію напружень ніж у монокристалах чи бікристалах. Внаслідок такого інтенсивного локального перенапруження у потрійному стику зерен інтенсивно зароджується мікропорожнина і це відбувається ще до того, як туди дійде основна тріщина. Зі збільшенням деформації структури ця порожнина швидко розростається у своїх розмірах і в певний момент зливається з основним фронтом тріщини. Таке коалесціювання (злиття) порожнини з тріщиною призводить до різкого падіння міцності даного матеріалу та стрибкоподібного прискорення процесу руйнування. Це демонструє, що потрійні стики є одночасно і місцями найбільшого опору пластичній деформації, і найуразливішими зонами, де руйнування і відбувається найшвидше.

1.3 Вплив зовнішніх умов 1.3

Механізми зародження та розвитку тріщин у матеріалі залежать не лише внутрішньої мікроструктури матеріалу, а й сильною мірою також від зовнішніх умов навантаження та середовища в якому відбувається

дослідження. Зазвичай, до ключових факторів, що здатні кардинально змінити шлях руйнування, відносять такі: швидкість деформації, температура та наявність різних хімічних домішок.

Швидкість прикладання навантаження є важливим параметром, який визначається здатністю кристалічної ґратки адаптуватися до характеристик зовнішнього напруження. Моделювання показує, що чим вища швидкість деформації, тим більше підвищується гранична напруга (міцність) матеріалу, але вона не дає атомній структурі достатньо часу на релаксацію. [6] До прикладу, при дослідженні полікристалічного хрому та багатокомпонентних сплавів (NiCoCr) на високих швидкостях деформації ($5 \cdot 10^8$ - $5 \cdot 10^9$ с⁻¹) спостерігається значне зростання межі текучості та максимального напруження. [7] Цей ефект пов'язаний з тим, що при швидкому деформуванні час, який доступний для атомної дифузії та перерозподілу вільного об'єму, різко починає скорочуватись. Тобто, атоми просто не встигають знайти стабільні конфігурації, що може призвести до різких структурних змін і зокрема, до стрімкої трансформації кристалічних ґраток в інші та масової появи смуг ковзання. Окрім цього, надзвичайно швидка деформація призводить до різкого зростання щільності цих дислокацій, оскільки швидкість їх генерації буде значно перевищувати швидкість їх анігіляції. Це впливає в утворення складних дислокаційних мереж та малорухомих замків Ломера-Коттрелла, які й додатково блокують пластичну деформацію, і підвищують міцність матеріалу. Однак, також відіграє неможливість повноцінної релаксації, через неї у матеріалі інтенсифікується пластичне накопичення та ефект концентрації напружень. Це призводить до зародження мікропорожнин в нових та нетипових місцях. Зміна локалізації таких дефектів буде впливати і на зміну напрямку поширення основної тріщини. Тобто, на високих швидкостях деформації основна тріщина може відхилятися від свого початкового шляху, через взаємодію з новими зонами локального скупчення рандомних порожнин, що робить процес руйнування ще більш хаотичним та стрімким після досягнення пікового напруження.

Перейдемо до впливу температури. Термодинамічні умови середовища мають потужний ефект на міцність та механізм руйнування матеріалу. Дослідження відбуваються по чіткій закономірності, що зі зниженням температури міцність матеріалу значно зростає. При криогенних температурах (наприклад, 77 K) кристалічна структура буде демонструвати високу стабільність, важливо, що пластична деформація забезпечується переважно синергетичною взаємодією двійникування та обмеженого дислокаційного ковзання. А з іншої сторони, високі температури посилюють тепловий рух атомів. Це явище можна кількісно описати за допомогою розрахунку таких параметрів як середньоквадратичного зміщення атомів та радіальної функції розподілу. З підвищенням температури піки на графіку радіальної функції розподілу знижуються та розширюються, що говорить про збільшення відстані між найближчими атомами. Атоми займають більший об'єм через інтенсивні вібрації і це послаблює міжатомні зв'язки (через збільшення відстані) та знижує загальну стабільність нашої кристалічної ґратки. Цей ефект послаблення сприяє більш активній міграції дислокацій у матеріалі. Тоді висока температура діє як каталізатор теплової активації, тобто, генерація та рух дислокацій стають більш активними, полегшуються процеси їх перехресного ковзання, рекомбінації та анігіляції. Це призводить до того, що замість накопичення напружень перед вістрям тріщини, матеріал легше буде релаксувати. З одного боку, це підвищує в'язкість руйнування, але з іншого тепер тепловий рух може сприяти утворенню нових вакансійних структур, які будуть порушувати цілісність матеріалу та значно знижують його межу текучості.

Хімічний склад матеріалу та наявність домішок, і зокрема атомів водню, є одним із найнебезпечніших факторів для цілісності конструкцій. Явище впливу водню на механіку руйнування отримало назву водневого крихчення, і воно реалізується через кілька різних паралельних атомістичних механізмів. Перше, впровадження атомів водню в кристалічну ґратку металу (наприклад, α -заліза) викликає локальне спотворення його ґратки ще навіть до

прикладання зовнішнього навантаження. [3] Завдяки цьому водень підвищує локальну пластичність та одночасно з цим знижує напруження, яке необхідне для початку пластичної течії або руйнування у матеріалі. Друге, градієнт напружень, навколо вістря тріщини та площин ковзання, створює рушійну силу, що може змусити атоми водню інтенсивно мігрувати та накопичуватися в цих зонах. Локалізувавшись перед вістрям тріщини, його домішки діють по різному. З одного боку, він посилює локальну емісію дислокацій, і це трішки "розм'якшує" матеріал. Але з іншого боку, атоми водню, адсорбуючись на нових поверхнях або в площинах ковзання, будуть суттєво знижувати поверхневу енергію та енергію когезії між атомами матриці. В результаті, не дивлячись на те, що локальне зростання пластичності з'являється на мікрорівні, все ж макроскопічно водень сприяє більше швидкому розриву міжатомних зв'язків. І це призводить до того, що матеріал, який у чистому вигляді демонстрував би в'язке руйнування, у присутності домішок водню руйнується шляхом крихкого сколу і при значно нижчих напруженнях.

1.4 Моделювання тріщин у шаруватих кераміках (SiC) та композитах 1.4

Хоча ковалентні кристали, такі як карбід кремнію (SiC), мають дуже високу твердість та також і термічну стабільність, але їх головним недоліком стає природна крихкість структури. Щоб подолати таку проблему в сучасному матеріалознавстві доволі широко застосовують створення нанокомпозитів або шаруватих структур типу метал-кераміка. У таких гетерогенних системах їх механічна поведінка й загальна тріщиностійкість сильно залежать від їх атомної структури на межах поділу шарів (або ж

інтерфейсах) та характеру взаємодії між цими різними нашаруваннями. Завдяки методам молекулярної динаміки (далі МД) вдається більш детально дослідити фізичні механізми руйнування на подібних родах інтерфейсів. Це показало, що при моделюванні поширення тріщини в системах метал-кераміка будуть чотири основні типи поведінки тріщини [8]:

1. Крихке поширення тріщини вздовж інтерфейсу шарів, тобто тріщина швидко рухається по межі їх поділу і без значної пластичної деформації прилеглих до цього нашарувань.

2. Закруглення вістря тріщини, яке відбувається безпосередньо на межі поділу нашарувань, це супроводжується інтенсивною пластичною деформацією металевго шару і переходу до зупинки росту тріщини подалі.

3. Поява та злиття дочірніх мікротріщин спереду від основного фронту тріщини.

4. І останній -- закруглення вістря через взаємодію з різними структурними дефектами матеріалу поблизу інтерфейсу.

Те, за яким саме сценарієм буде розвиватися руйнування досліджуємої системи, безпосередньо уде залежати від коефіцієнта адгезійної міцності (λ) між шарами матеріалу. Це коефіцієнт, який визначає енергетику зв'язку між атомами металу та атомами кераміки. Моделювання такої структури показує доволі чітку закономірність у процесі: для ідеально чистих інтерфейсів з високою адгезійною міцністю ($\lambda > 0.9$) найбільш характерними буде перший та другий типи поведінки (тобто крихкий рух або класичне закруглення вістря). Але якщо інтерфейс є сильно грубим або містить якісь дефекти, що знижують його енергію зчеплення (тобто низька адгезія $\lambda < 0.9$), процес руйнування буде переходити до третього або четвертого типів розвитку тріщини, де головну роль будуть відігравати зародження додаткових дочірніх тріщин та локальна взаємодія з дефектами у структурі [9].

Яскравим прикладом такої складної поведінки тріщин на межі поділу можна розглянути систему Cu/SiC (мідь/карбід кремнію). Під час одновісного розтягу цієї структури можна буде спостерігати яскраво

виражене асиметричне поширення тріщини. Така асиметрія з'являється через фундаментальною відмінністю у кристалічних ґратках двох різних матеріалів. Енергія, яка необхідна для зародження дислокацій у структурі, та які сприяють релаксації напружень, на протилежних кінцях тріщини, сильно буде відрізнятись через різну природу дефектів у кераміці та у металі. Схожі закономірності та анізотропія руйнування характерні і для інших, наприклад для більш легких магнієвих нанокомпозитів (SiC/Mg). У цих системах також споглядаються згадані чотири типи поширення тріщин, але при цьому ключову роль відіграє не лише міцність зв'язків, а й кристалографічна орієнтація такого інтерфейсу. Якщо композит має слабкий інтерфейс, тріщина не може проникнути вглиб металу і має поширюватись суто вздовж межі розділу, тобто демонструючи крихке руйнування цього матеріалу. Проте, якщо інтерфейс буде сильним (має високу адгезію), фронт тріщини починає відхилятися від прямолінійної траєкторії в між шарами і переходить у більш пластичну магнієву матрицю й це буде значно підвищувати загальну в'язкість руйнування матеріалу. [10] Крім того, МД моделювання таких гетерогенних систем стає надзвичайно корисним та дешевим інструментом для дослідження параметрів системи з діаграми деформування, яке гарно може показати, наскільки шари розходяться під навантаженням і які сили продовжують тримати їх разом [11].

Окрім адгезійної міцності, також критичним параметром для шаруватих матеріалів є розмірний фактор та структурна узгодженість ґраток. У таких багатошарових нанопокриттях (наприклад Ti/TiN) тріщини зазвичай будуть зароджуватись у крихкому керамічному шарі і далі почнуть рухатись до інтерфейсу. Тоді там їх ріст може бути легко заблокований завдяки пластичній деформації металевому шару та кристалографічній розорієнтації на межі поділу. Однак буде існувати критична межа (наприклад, близько 10 нм для шарів титану), яка описує, що подальше зменшення товщини шарів почне призводити до появи зворотного ефекту Холла-Петча, через якого критичне напруження руйнування системи починає спадати. [12] Структурна

природа самої межі поділу також може впливати на механізм руйнування. Якщо межа між фазами буде когерентною (тобто ґратки ідеально збігаються між собою), то це сприяє крихкому руйнуванню, тому що на такій межі легко утворюються сидячі дислокаційні структури (замки Ломера-Коттрелла), що й блокують подальшу пластичність руйнування і концентрують напруження в їх області. А некогерентні межі розділу вже будуть забезпечувати в'язке руйнування, оскільки вони є гарними джерелами частих дислокацій, які будуть ефективно затуплювати вістря тріщини та розсіюють енергію деформації по структурі. [13] Додатково варто згадати і перспективний напрямок використання інших наноматеріалів типу 2D (наприклад графену) як ультратонких інтерфейсів у наноламінованих композитах. У системах графен/мідь моноатомний прошарок графену діє як надзвичайно ефективний бар'єр для руху дислокацій з металевої матриці. При цьому існує оптимальна (критична) товщина металевого шару (~1.9 нм для Cu), за якої блокування дислокацій є найефективнішим.[14][15]

II. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

2.1 Основи методу молекулярної динаміки (МД) 2.1

Дослідження механізмів руйнування та поширення тріщин на атомарному рівні вимагає використання складних для реалізації обчислювальних методів, й при цьому класична континуальна механіка не здатна адекватно описати дискретні процеси, такі як розрив міжатомних зв'язків чи емісія дислокацій з вістря тріщини вглиб матеріалу. У сучасній обчислювальній фізиці твердого тіла одним із найефективніших підходів для вирішення таких складних задач є метод молекулярної динаміки (МД). Суть цього методу полягає у комп'ютерному моделюванні фізичного руху атомів

або молекул у віртуальному просторі та часі. В основі МД лежить класична ньютонівська механіка. Цей метод базується на чисельному розв'язанні багатьох диференціальних рівнянь руху (другого закону Ньютона) для системи з N взаємодіючих атомів:

$$F_i = m_i a_i,$$

де F_i — рівнодійна сила, що діє на i -тий атом з боку всіх інших атомів системи, m_i — маса цього атома або молекули, a_i — його прискорення. Під час обчислення, сила взаємодії розраховується як негативний градієнт потенціальної енергії досліджуємої системи, яка задається емпіричними або напівемпіричними міжатомними потенціалами. Таким чином задаючи початкові координати та швидкості всіх атомів, алгоритм МД покроково буде розраховувати траєкторію кожного атома в системі з кожним кроком часу, який ми задаємо. З цих мікроскопічних даних (до прикладу, координати та імпульси) за допомогою методів статистичної фізики можна вже обчислити макроскопічні термодинамічні характеристики даної системи, такі як: температура, тиск, напруження та деформація.

Оскільки рівняння руху для системи, що складається з десятків чи сотень тисяч атомів дуже довго розв'язати на звичайних комп'ютерах, у МД застосовують чисельне інтегрування. Безперервний час розбивається на дуже малі дискретні кроки (dt). Найбільш поширеним алгоритмом для інтегрування рівнянь руху є так званий алгоритм Верле. Він дає високу обчислювальну ефективність та гарно забезпечує зберігання повної енергії системи під час доволі тривалих симуляцій. Для того щоб алгоритм розраховував нові координати та швидкості атомів на кожному маленькому часовому кроці, він використовує значення сил, координат і швидкостей з попереднього кроку. Щоб більш коректно описувати теплові коливання атомів і уникати різних розбіжностей, крок інтегрування в таких моделях критично потрібно обирати надзвичайно малим і зазвичай це становить близько 1 фемтосекунди (0,001 пс).

Для реалізації описаних математичних моделей у даній дипломній роботі використовується відкритий програмний пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), розроблений Sandia National Laboratories. Це потужне середовище, яке ідеально підходить для моделювання великих атомних ансамблів для наших експериментів. Спираючись на мій попередній досвід моделювання, робота в середовищі LAMMPS здійснювалась шляхом написання спеціалізованих вхідних скриптів. Налаштування моделі традиційно треба починати зі створення базового «простору» для моделювання за допомогою таких команд:

dimension 3 — задає тривимірний простір для симуляції;

boundary p p p — встановлює періодичні граничні умови за всіма трьома осями (тобто атоми, що виходять за межі комірки з одного боку, будуть повертаються з протилежного, імітуючи нескінченний масив матеріалу, щоб не будувати величезну систему).

units metal — визначає набір одиниць вимірювання, де час вимірюється у пікосекундах (ps), відстань — в ангстремах (Å), енергія — в електрон-вольтах (eV), а температура — в Кельвінах (K).

Керування динамікою атомів реалізується через базові команди пакета, такі як *Velocity* (задає початковий розподіл швидкостей частинок відповідно до температури, яку задаємо при написанні початкових умов системи) та *Fix* (використовується в багатьох випадках, наприклад для застосування термодинамічних ансамблів, прикладання навантажень чи фіксації окремих груп атомів) .

Як було відпрацьовано під час переддипломної практики, для моделювання поведінки карбіду кремнію генерується симуляційна система, що складається з $20 \times 20 \times 20$ елементарних комірок з потрібним нам параметром ґратки $a = 4.35 \text{ Å}$. Така конфігурація забезпечує наявність десятків тисяч атомів, що буде достатнім для коректного опису поширення тріщини в макроматеріалі. Процес підготовки системи до механічних випробувань (розтягу) проходить у кілька етапів:

1. Спочатку релаксація та термостатування: Систему треба витримати при заданій початковій температурі (наприклад, 300 K) з використанням ансамблю NVT (термостат Нозе-Гувера, постійне число частинок, об'єм та температура) протягом деякого часу (500 пс). Це дозволяє системі прийти в стан термодинамічної рівноваги.

2. Далі баростатування: застосовується інший ансамбль NPT для встановлення рівноважного об'єму. При цьому атоми релаксують за нульового тиску.

3. Механічне навантаження: Після досягнення системою стабільного стану до зразка застосовується одновісний розтяг вздовж осі X (з підтримкою постійної температури 300 K). На цьому етапі збираються дані для побудови графіків «напруження-деформація» та відбувається безпосереднє спостереження за атомістичними механізмами розриву зв'язків у вістрі тріщини.

2.2 Вибір міжатомного потенціалу для SiC 2.2

Ключовим етапом у молекулярно-динамічному (МД) моделюванні є правильний вибір міжатомного потенціалу для системи, тобто опису того як будуть взаємодіяти атоми між собою під час експерименту. І наскільки точно математична модель описує сили взаємодії, безпосередньо буде залежати достовірність розрахованих нами механічних та теплофізичних властивостей матеріалу, а також коректність відтворення процесу руйнування (зародження і поширення тріщини).

Також варто зазначити фундаментальну різницю у виборі потенціалів для різних класів матеріалів. Бо як показує аналіз спеціалізованої літератури, для моделювання металів та сплавів (наприклад, Ni, Cu, Al) традиційно використовується метод зануреного атома (EAM). У рамках цієї моделі

загальна потенціальна енергія системи буде розраховуватись як сума енергії «занурення» атома в локальну електронну густину (яку створює електронний газ, що заповнює міжатомний простір металів) та парного потенціалу відштовхування цих ядер атомів. ЕАМ чудово описує ізотропний характер металічного зв'язку, але він не враховує спрямованість зв'язків, що робить його непридатним для аналізу ковалентних кристалів. Натомість карбід кремнію (SiC) — це ковалентна кераміка зі строго спрямованими міжатомними зв'язками (sp^3 -гібридизація). Тому для моделювання таких систем потрібно знайти потенціали, що зможуть врахувати кутову залежність (багаточасткові потенціали) нашої системи.

Для пошуку оптимального опису карбіду кремнію було проведено серію тестових розрахунків у пакеті LAMMPS. Досліджувалися чотири багаточасткові потенціали: Tersoff, Vashishta, EDIP (Environment-Dependent Interatomic Potential) та MEAM (Modified Embedded-Atom Method). Методика тестування включала наступні кроки:

1. Було згенеровано симуляційну комірку SiC та здубльовано її в $20 \times 20 \times 20$ елементарних комірок з параметром ґратки $a=4.35 \text{ \AA}$;
2. Накладено періодичні граничні умови у всіх напрямках;
3. Систему витримували при початковій температурі 300 K в ансамблі NVT (сталий об'єм і температура) протягом 500 пс для досягнення термодинамічної рівноваги;
4. Після цього застосовувався ансамбль NPT для встановлення рівноважного об'єму за нульового тиску (релаксація напружень);
5. На фінальному етапі до зразка застосовувався одновісний розтяг вздовж осі X за сталої температури 300 K. У процесі деформації фіксувалися дані для побудови кривих напруження-деформація;

Математична основа цих потенціалів суттєво відрізняється між собою. Наприклад, потенціал Tersoff базується на концепції порядку зв'язку. Тобто енергія притягання між атомами в ньому модифікується спеціальним коефіцієнтом, який буде підібраний програмою в залежності від локального

оточення атома (координаційного числа та кутів між зв'язками). Потенціал MEAM є модифікацією методу зануреного атома, куди були додані кутові залежності електронної густини, що дозволяє застосовувати його і для металів, і для ковалентних матеріалів.

За результатами одновісного розтягу було отримано графіки залежності напруження від деформації для кожного з чотирьох потенціалів. Аналіз цих кривих (рис. 1) дозволив виділити специфічну поведінку кожної моделі взаємодії:

Tersoff: Графік демонструє найстрімкіший кут нахилу на пружній ділянці, що свідчить про найвищу жорсткість матеріалу. Крім того, крива досягає найвищого пікового значення напруження перед руйнуванням.

Vashishta та EDIP: Криві для цих двох потенціалів проходять значно нижче, демонструючи подібну одна до одної поведінку, з меншою жорсткістю та нижчими показниками граничного напруження .

MEAM: Крива напруження-деформації займає проміжне положення між наджорстким Tersoff та більш «м'якими» Vashishta і EDIP. Цей потенціал дає проміжні значення пружної реакції на навантаження.

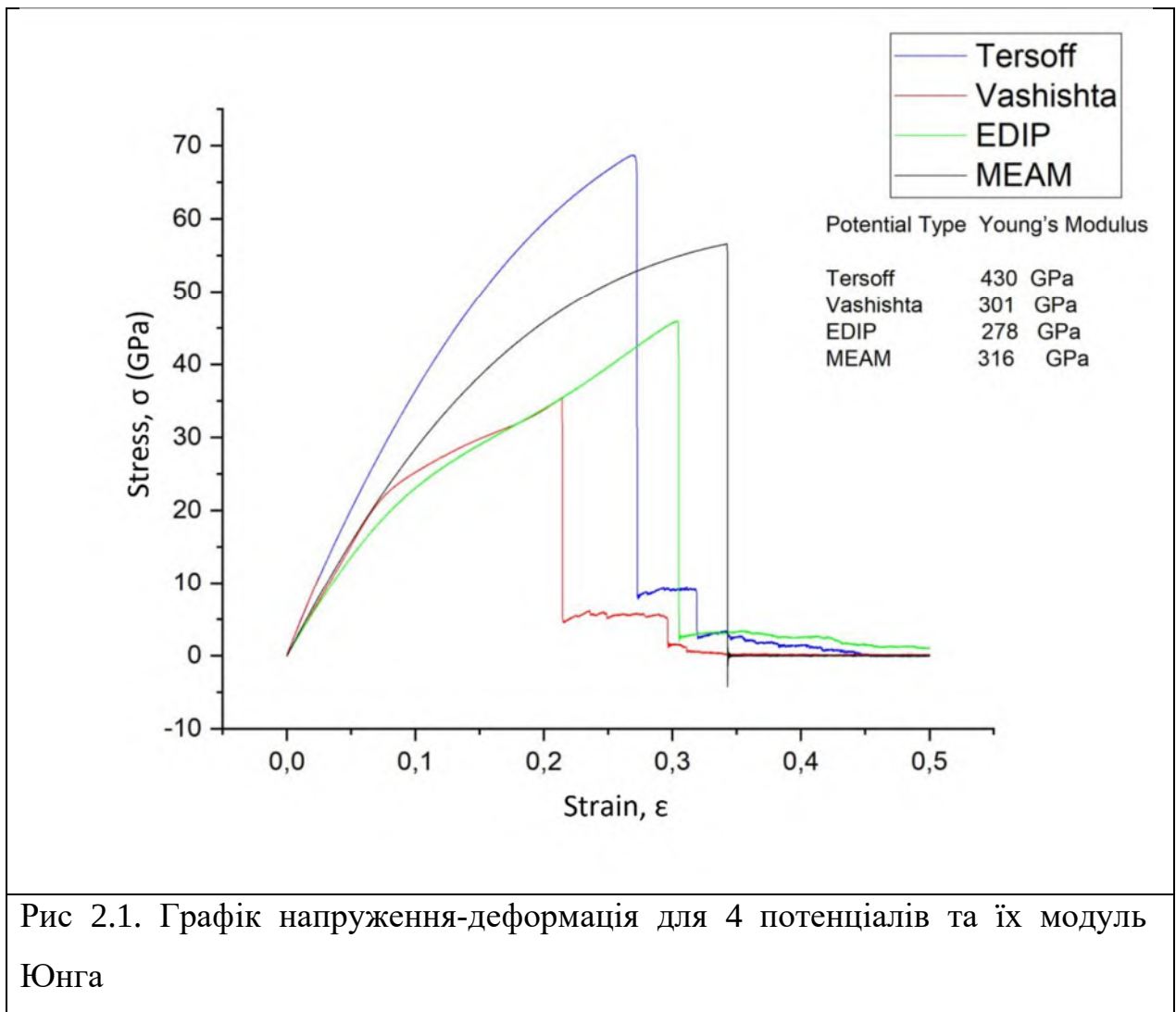


Рис 2.1. Графік напруження-деформація для 4 потенціалів та їх модуль Юнга

Ключовим критерієм вибору міжатомного потенціалу є його здатність показувати ту саму поведінку, що і в експериментально відомих макроскопічних властивостей матеріалу. Для карбіду кремнію експериментальні значення модуля Юнга знаходяться в межах $\sim 320\text{--}440$ ГПа. Модуль Юнга можна розрахувати за кутом нахилу лінійної ділянки графіка і ці дані показали, що потенціал MEAM дає значення, які найкраще узгоджуються з цими експериментальними даними. Тобто він ідеальний кандидат для вивчення пружно-пластичних характеристик та в'язкого руйнування в SiC. Але при цьому потенціал Tersoff, хоч і показує деяке завищення жорсткості, чудово може відтворити фундаментальну ковалентну природу зв'язків SiC, що демонструє чітке крихке руйнування, і це може бути критично важливим для дослідження поведінки розриву зв'язків

безпосередньо у вістрі тріщини. З огляду на ці результати, для подальших досліджень було обрано два потенціали: Tersoff та MEAM . Використання обох потенціалів дозволить оцінити механіку руйнування з різних боків. MEAM забезпечить високу точність термодинамічних констант, а Tersoff дасть змогу чітко змодельовати жорстку атомістичну динаміку сколу в шаруватих структурах карбіду кремнію.

2.3 Досліджувані структури 2.3

Далі для проведення досліджень методом молекулярної динаміки було згенеровано два різних типи структур. Перша, відповідала монокристалічному блоку кубічного карбіду кремнію (3C-SiC), де атоми мали приблизне співвідношення 50-50. Дослідження на цій структурі допоможуть зрозуміти поведінку тріщини у звичайному, немодифікованому зразку для подальшого порівняння його з іншими конфігураціями системи як контрольний зразок.

Інші структури були створені так, щоб по центру знаходився прошарок з збільшеним вмістом карбоном (Рис.2.2). З метою дослідження впливу додаткового прошарку у кераміці було згенеровано три типи структур, де карбон має співвідношення до кремнію 75/25, 87.5/12.5 та 100/0 відсотків. Таким чином можемо спостерігати еволюцію тріщини у різних видах матеріалів з насиченням кремнієм типу твердих розчинів заміщення або імітуючи утворення насичених вуглецевих кластерів, що значно впливає на поведінку руйнування.

В кінці, дослідження були проведені на граничному значенні, де моношар вуглецю був вбудований в кераміку. Це створило чіткий інтерфейс переходу між двома різними матеріалами.

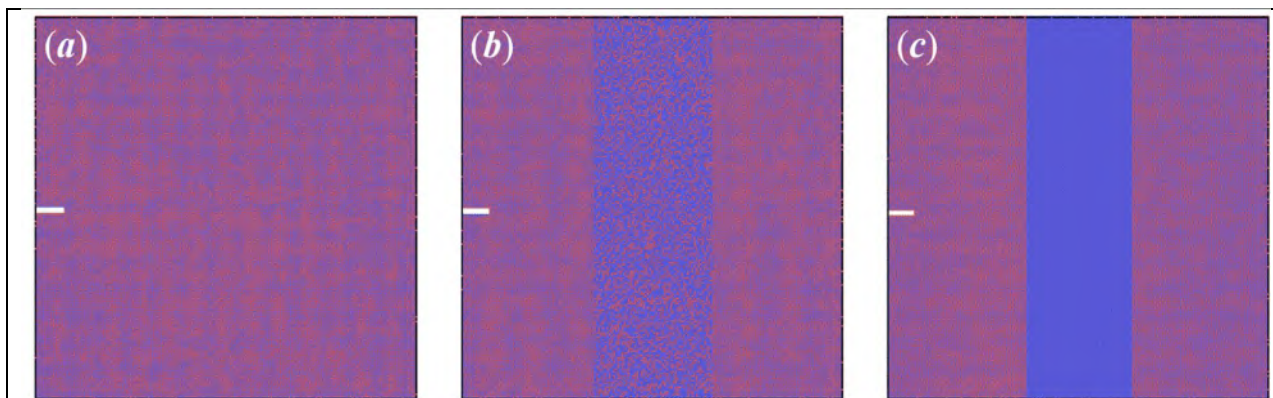


Рис.2.2. Різні типи структури та змодельована тріщина. Зліва направо вміст вуглецю у центральному шарі 50%, 75%, 100%

Далі в зразку, для імітації первинного дефекту, вирізали в площині xy кристалічного моношару область близько 5 нм. Це забезпечує локалізацію напружень в цій області та ініціює процес руйнування звідти. Після чого структура була розтягнута вздовж координаційної вісі z .

Для більш детального та повного дослідження параметри експерименту змінювались таким чином:

1. Спочатку структуру було досліджено в різних площинах конфігурацій для виявлення анізотропії руху тріщини по матеріалу. Для цього площину тріщини змінювали три рази за такими конфігураціями: $xy=(0\ 0\ 1)$; $y=[0\ 1\ 0]$; $xy=(1\ 1\ 0)$; $y=[1\ -1\ 0]$; $xy=(1\ 1\ 1)$; $y=[-1\ 1\ 0]$.
2. Далі контролювалась швидкість розтягу, для розуміння процесу при різних умовах деформації
3. Також важливим дослідженням стало постановка експерименту при різних температурах. Таким чином можна було дослідити поведінку як шару кераміки, так і шару графіту в екстремальних умовах.

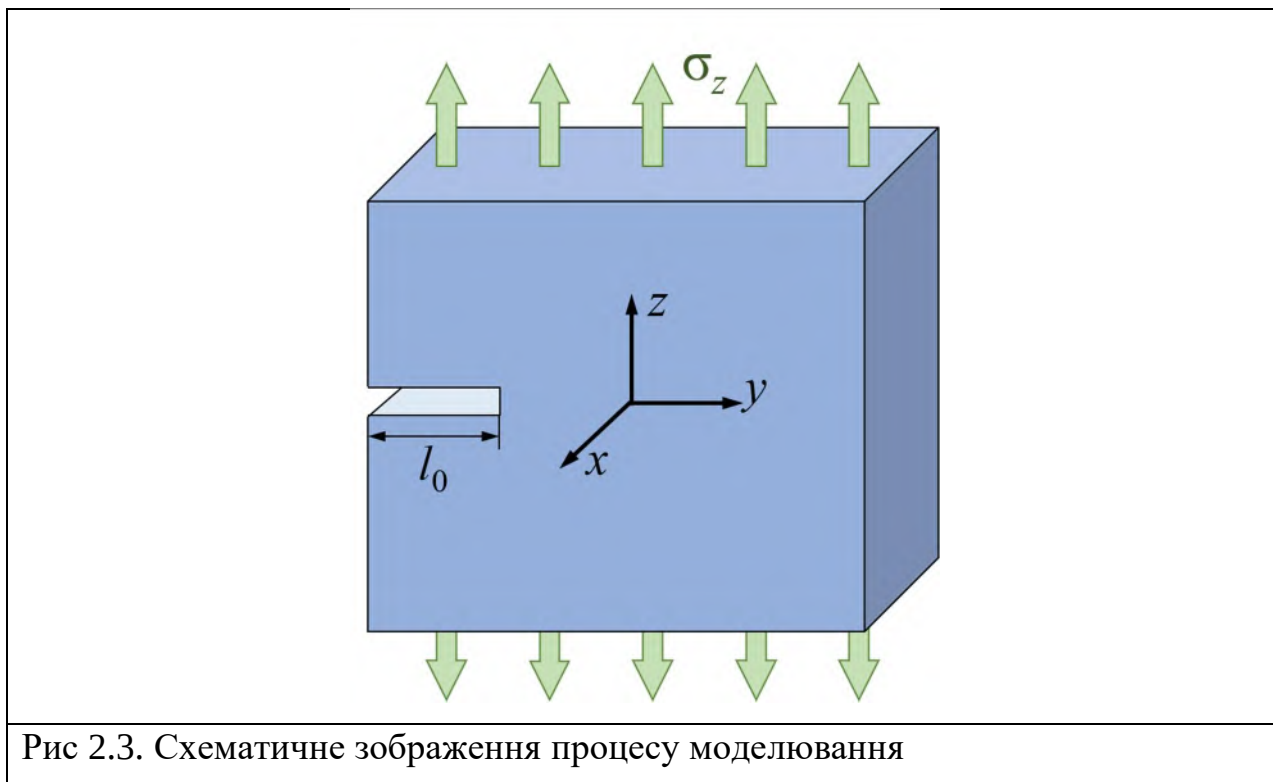


Рис 2.3. Схематичне зображення процесу моделювання

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Сучасні виклики розробки нових композитних матеріалів, побудовані на основі карбиду кремнію та вуглецю вимагають, детального розуміння їх механічної поведінки під дією різних зовнішніх навантажень у різних умовах. Карбід кремнію (а саме його кубічна поліморфна модифікація 3С-SiC) є надважливим компонентом такого роду композитів через свої потужні характеристики: висока міцність і модуль пружності, також термічна стабільність та гарна стійкості до окислення. Але варто зауважити, що як і більшості керамічних матеріалів, SiC притаманна також і висока крихкість, це породжує схильність до раптового руйнування через появу та поширення локальних дефектів.

Методи молекулярної динаміки дають потужний інструментарій для вивчення наноскопічних процесів, на рівні атомів, таких як деформації та руйнування, і головне, дозволяючи відстежувати еволюцію міжатомних

зв'язків у цій системі протягом часу. Важливо, що на механічну поведінку кристалічного SiC впливають в основному такі факторів, які є кристалографічна орієнтація, швидкість деформування структури та температура за якою відбувається експеримент. Спочатку увагу було приділено в цій роботі впливу кристалографічної орієнтації, оскільки анізотропія кристалічної ґратки дає різну щільність упаковки атомів в матеріалі і відмінності у кількості та у кутах спрямування зв'язків, що з'єднують атоми. Й це доволі сильно визначає опір матеріалу поширенню тріщини та його пружні характеристики вздовж різних напрямків її руху.

3.1. Вплив кристалографічної орієнтації на механічний відгук монокристалічного SiC. 3.1

У рамках даної роботи було вивчено механічну поведінку 3C-SiC, для якого генерувалася початкова тріщина у трьох різних кристалографічних площинах: (001), (110) та (111). Отримані під час МД моделювання розтягу криві «напруження–деформація» показані на рисунку 3.1 і чітко демонструють поведінку, характерну для ідеально крихких матеріалів. Для уникнення теплових впливів розрахунки на цьому етапі виконувалися для температури $T=0,1$ К, а швидкість деформації становила 10^{-8} с⁻¹.

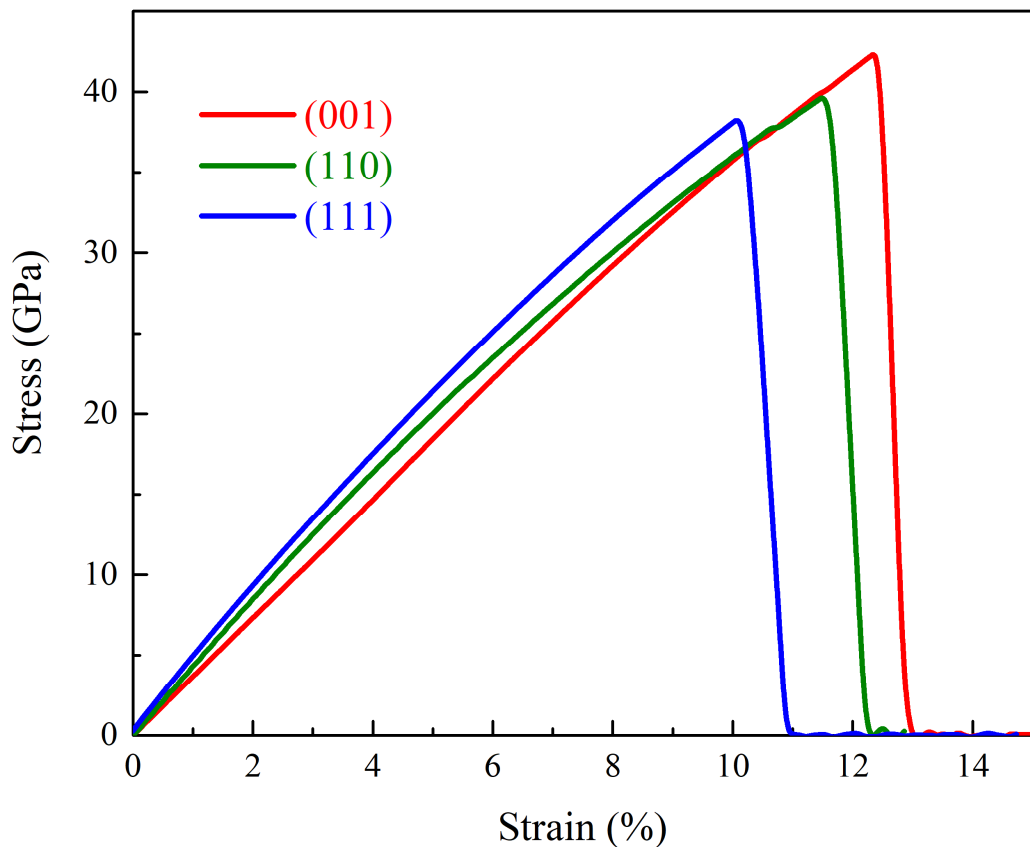


Рис. 3.1. Криві «напруження–деформація» при розтягу для зразків 3C-SiC з початковою тріщиною, сформованою у різних кристалографічних площинах: (001), (110) та (111).

Можна також побачити, що на початковому етапі навантаження для всіх трьох орієнтацій спостерігається яскраво виражена лінійна залежність, це відповідає пружній деформації кристалічної ґратки. Після досягнення свого пікового значення напруження-руйнування, криві різко спадають до нуля без будь-яких ознак пластичної течії, що свідчить про миттєве та доволі нестабільне поширення тріщини через зразок, який було змодульовано, та його повний розрив. Візуально криві також ілюструють відмінності у граничній деформації: зразок з тріщиною в площині (001) витримує найбільшу деформацію до руйнування (близько 13%), тоді як руйнування у площині (111) відбувається при менших значеннях деформації (приблизно 11%).

З розрахованих кривих деформування було кількісно визначено ключові механічні характеристики матеріалу, модуль Юнга та напруження руйнування, які узагальнено на рисунку 3.2. Бачимо, що ці результати підтверджують значну анізотропію механічних властивостей карбїду кремнію.

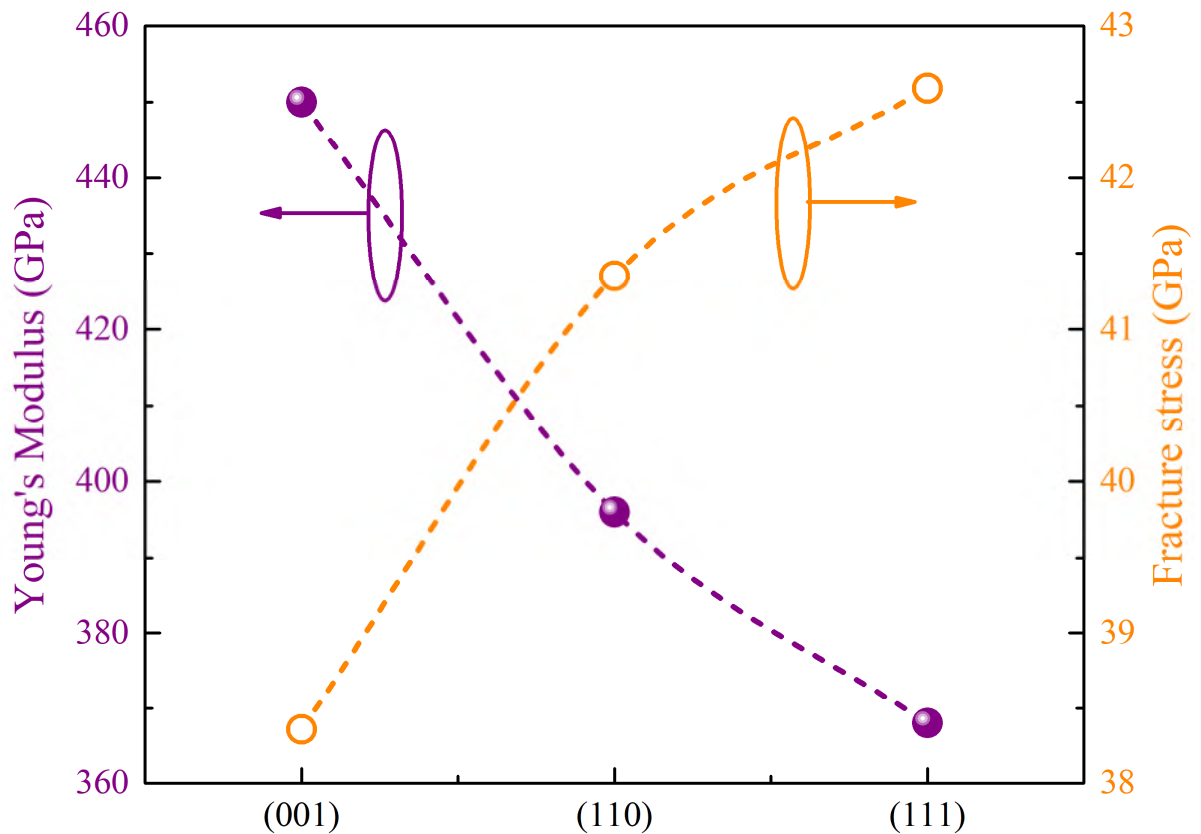


Рис.3.2. Залежність модуля Юнга та напруження руйнування зразків 3C-SiC від кристалграфічної орієнтації площини зародження тріщини.

Як свідчать наведені дані, модуль Юнга досягає свого максимуму (близько 450 ГПа) для зразків з орієнтацією (001) і закономірно знижується, набуваючи проміжних значень для площини (110) та опускаючись до мінімальних (близько 368 ГПа) для площини (111). Водночас напруження руйнування демонструє абсолютно протилежну тенденцію, де видно, що найменша міцність (близько 38,3 ГПа) фіксується для орієнтації (001), тоді як

площина (111) забезпечує найвищий опір руйнуванню з піковим напруженням понад 42,5 ГПа.

Тож детальне пояснення спостережуваних анізотропних ефектів ґрунтується на фундаментальному взаємозв'язку між типом міжатомних зв'язків у кубічній ґратці 3C-SiC та також на термодинамічній стабільності її площин. Високий модуль Юнга для орієнтації (001) говорить про найбільшу пружну жорсткість кристалічної ґратки саме в цьому напрямку, і це зумовлено максимальною силою опору зв'язків Si-C у їх поздовжньому розтягуванню. Але, як можна побачити по результатах моделювання, що висока жорсткість зовсім не гарантує високої міцності на розрив. Головним фактором є енергетичні витрати, які використовуються на формування нових поверхонь тріщини, і цей процес буде описуватися через значення поверхневої енергії. А згідно з отриманими раніше розрахунками, площина (111) характеризується найнижчою поверхневою енергією серед досліджуваних нами орієнтацій. У кристалах зі структурою сфалериту площини {111} є найбільш щільноупакованими, що й має робити їх термодинамічно найстабільнішими. Як ми знаємо, система завжди прагне перебувати у стані з мінімальною вільною енергією, а руйнування вздовж площини (111) вимагає найбільшої роботи зовнішніх сил для подолання потенціального бар'єру та розриву стабільних конфігурацій зв'язків. Це напряду корелює з найвищим значенням напруження руйнування (>42 ГПа), зафіксованим на графіках для цієї орієнтації.

І навпаки, площина (001) має найвищу поверхневу енергію й це вказує на її меншу термодинамічну вигідність та наявність високої щільності некомпенсованих зв'язків на новоутвореній поверхні. Не дивлячись на високий модуль пружності, що має система, низька стабільність цієї площини приводить її до того, що критичне розкриття тріщини відбувається при значно менших рівнях механічного напруження (а це близько 38 ГПа). Таким чином, можна встановити зворотну залежність між стабільністю площини та її схильністю до крихкого руйнування, а саме чим нижчою є

поверхнева енергія кристалографічної площини, тим вищий опір вона чинить руху тріщини. Ці дані необхідно враховувати при проектуванні армуючих елементів у композитах на основі SiC.

3.2. Механічна поведінка монокристалічного SiC при навантаженнях з різними швидкостями деформації. 3.2

Наступним етапом цього дослідження стає аналіз впливу швидкості деформації на механічні властивості та характер руйнування структури на основі 3C-SiC. На рисунку 3.3 представлено отримані криві «напруження–деформація» для зразка з початковою тріщиною у площині (111) при трьох різних швидкостях деформування: 10^{-7} с^{-1} , 10^{-8} с^{-1} та 10^{-9} с^{-1} , вони є типовими значеннями при МД розрахунках. Так як для інших кристалографічних орієнтацій були отримані доволі подібні залежності, детальний розгляд механізмів трансформації кривих проводиться на прикладі даної орієнтації.

Аналіз графічних даних показує, що на ділянці пружного деформування всі три криві практично збігаються, і це свідчить про незалежність модуля Юнга від швидкості прикладеного навантаження в межах цього досліджуваного діапазону. А ось основні відмінності спостерігаються на стадії за критичного деформування (тобто після досягнення межі міцності). При високих швидкостях деформації (10^{-7} с^{-1} та 10^{-8} с^{-1}) руйнування має класичний крихкий характер, де напруження різко падає до нуля, що описується майже моментальному проростанню тріщини крізь увесь досліджуємий блок. Однак при зниженні швидкості до 10^{-9} с^{-1} вигляд кривої суттєво змінюється - з'являється похила низхідна гілка, а повне руйнування зразка розтягується у часі, завершуючись при значно вищих значеннях деформації (близько 17%).

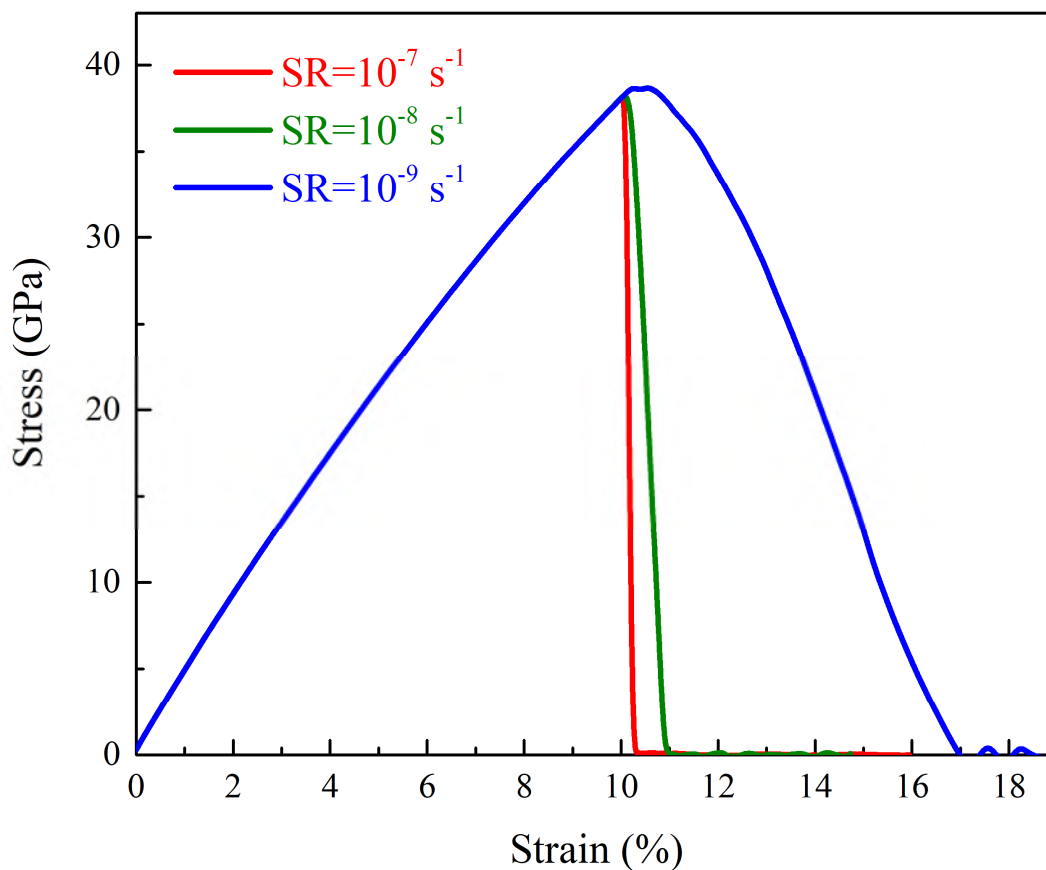


Рис.3.3. Криві «напруження–деформація» для 3C-SiC (площина тріщини (111)) при різних швидкостях деформації.

В основному це можна обґрунтувати, тим що в загальному поведінка залежить від кінетичної природи руйнування та релаксаційними процесами в атомній структурі. При низькій швидкості деформації (10^{-9} s^{-1}) атоми в зоні вершини тріщини матимуть достатньо часу для часткової перебудови та, через це, релаксації локальних напружень. Це сповільнює швидкість розриву міжатомних зв'язків і переводить такий процес із режиму миттєвого крихкого розколу, у режим поступового поширення тріщини. Низхідна ділянка на синій кривій відповідає етапу стабільного росту тріщини, де вивільнення енергії пружної деформації частково компенсується роботою розриву зв'язків, а цей процес не відбувається моментально. У той ж час як при високих швидкостях деформації зовнішнє навантаження зростає на стільки швидше, що система просто не встигає релаксувати, і це призводить до накопичення критичної надлишкової енергії та вибухоподібного,

нестабільного руйнування матеріалу тріщиною. Таким чином, швидкість деформації є визначальним фактором, що контролює динаміку руху тріщини та здатність матеріалу до дисипації енергії перед повним її розривом.

3.3. Температурний вплив на механічну поведінку монокристалічного SiC при навантаженні. 3.3

Завершальним етапом аналізу властивостей монокристалічного SiC стало дослідження впливу температури на його деформаційну поведінку. На рисунку 3.4 представлено криві «напруження–деформація» для зразка з орієнтацією тріщини (111) при температурах 300 K, 900 K та 1800 K.

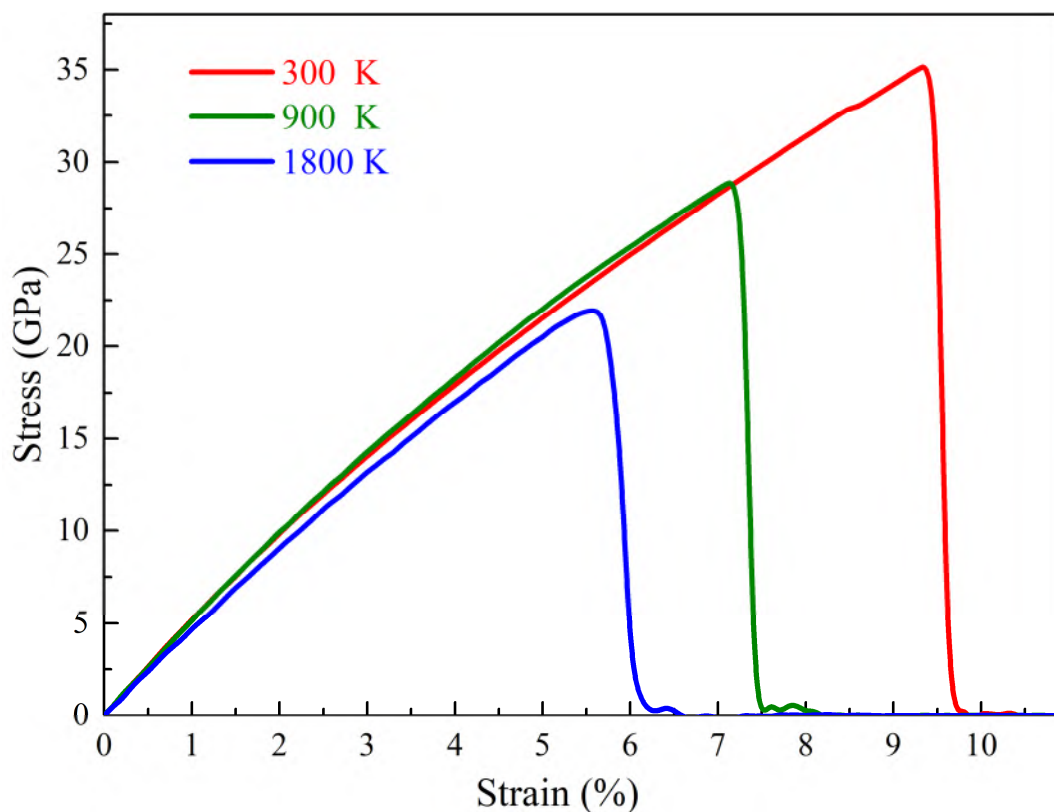


Рис. 3.4. Вплив температури на криві «напруження–деформація» для монокристалічного 3C-SiC (орієнтація тріщини (111)).

Такі отримані результати свідчать про суттєву деградацію механічних характеристик матеріалу при термічному нагріванні системи, що ще має стабільний характер для всіх досліджуваних кристалографічних орієнтацій. З аналізу цих графічних залежностей стає видно, що підвищення температури призводить до одночасного зниження всіх трьох головних параметрів, а саме тангенса кута нахилу пружної ділянки (тобто модуля Юнга), пікового напруження (міцності) та граничної деформації до руйнування. Якщо при близько кімнатній температурі (300 K) матеріал демонструє максимальну міцність близько 35 ГПа, то при екстремальному нагріванні до 1800 K цей показник падає майже на 40%, складаючи приблизно 22 ГПа. Аналогічно, точка руйнування зміщується з 10% деформації до 6%, що вказує на суттєве зниження несучої здатності кристалічної ґратки.

Фізична природа спостережуваного розм'якшення матеріалу можна пояснити інтенсифікацією теплових флуктуацій атомів у вузлах кристалічної ґратки. Тобто при підвищенні температури зростає середня амплітуда коливань атомів, і це призводить до збільшення середньої міжатомної відстані (так зване теплове розширення) і, у наслідку, до ослаблення сил міжатомної взаємодії у структурі. З погляду дослідження енергій, теплової енергія $E=kT$ частково компенсує енергію зв'язків Si-C, тому для їх розриву та подальшого просування тріщини стає достатньо значно меншого зовнішнього механічного розтягнення. Крім того, при високих температурах (1800 K) на кривій спостерігається певне закруглення вершини лінії графіку прямо перед моментом розриву. Це свідчить про те, що матеріал починає втрачати свою ідеальну крихкість, а в зоні перед вершиною тріщини активізуються локальні релаксаційні процеси, які зумовлені підвищеною дифузійною рухливістю атомів при високій температурі. Таким чином, температурний фактор є досить критичним для композитів на основі SiC, оскільки він не лише знижує поріг руйнування системи, але й змінює динаміку розриву міжатомних зв'язків. Це необхідно враховувати при

експлуатації матеріалу в умовах високих температурних градієнтів, на які він має бути розрахований.

3.4. Особливості кінетики тріщини в монокристалі SiC в умовах навантаження. 3.4

Далі для більш глибокого розуміння механізмів руйнування було проведено візуалізацію атомної структури зразків 3C-SiC у процесі деформування. На рисунку 3.5 представлено еволюцію поля об'ємної деформації для двох контрастних орієнтацій: (001) – верхній ряд, та (111) – нижній ряд. Колірна шкала відображає локальну зміну об'єму навколо кожного атома, де червоний колір відповідає зонам максимального розтягування (вершина тріщини), а синій – зонам стиснення або вихідного стану.

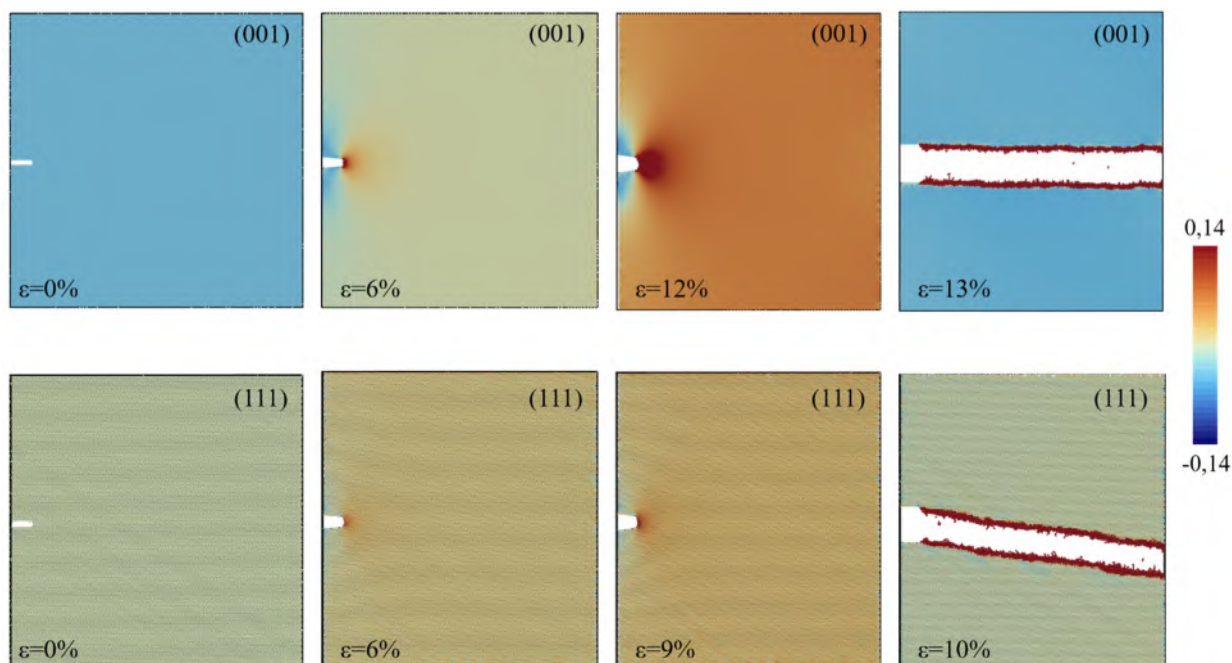


Рис. 3.5. Візуалізація поширення тріщини в 3C-SiC для орієнтацій (001) та (111) у термінах об'ємної деформації при різних рівнях загальної деформації модельованого зразка.

Аналіз процесу для площини (001) показує, що до моменту $\varepsilon=12\%$ у вершині тріщини формується значна зона локальних напружень, яка починає симетрично розширюватися вздовж осі прикладеного навантаження до системи. При досягненні критичної деформації ($\varepsilon=13\%$) починає спостерігатись доволі стрімке проростання тріщини, траєкторія якої є практично ідеально лінійною вздовж осі у. Це говорить про те, що руйнування в площині (001) відбувається шляхом простого прямого розриву міжатомних зв'язків паралельно площині початкового дефекту і без суттєвого відхилення фронту, це гарно підтверджує раніше згадану низьку опірність цієї орієнтації до крихкого сколу.

На відміну від попереднього випадку, руйнування вздовж площини (111) демонструє іншу кінетику. По-перше, критичний стан настає раніше, вже при $\varepsilon=9\%$ можна спостерігати високу концентрацію напружень, а повний розрив вже відбувається при $\varepsilon=10\%$. По-друге, траєкторія руху тріщини в орієнтації (111) має виражений нахил відносно горизонтальної осі, що можна побачити візуально на рис 3.5. Це пояснюється специфікою кристалографічної будови, спочатку тріщина намагається слідувати шляхом найменшого енергетичного опору, це у даному випадку збігається з похилими щільноупакованими площинами {111}. Таке відхилення траєкторії руху є ознакою того, що матеріал чинить більший опір прямолінійному поширенню дефекту, що також сходиться з вищими значеннями напруження руйнування для цієї орієнтації.

Обґрунтування цих розбіжних процесів пов'язане з анізотропією енергії зв'язків та геометрією кристалічної ґратки. В орієнтації (001) фронт тріщини зустрічає сильно рівномірне поле опору, таке сприяє формуванню рівної поверхні розриву. У випадку (111) спостерігаємо виражену невідповідність між макроскопічним напрямком розтягу та мікроскопічним розташуванням слабких місць у ґратці. Наявність нахиленої траєкторії та швидша ініціація розриву (за нижчих значень деформацій системи) при вищому рівні

напружень вказує на те, що руйнування в напрямку [111] контролюється складнішим механізмом перерозподілу пружної енергії, ніж простий скол, який типовий для високоміцних, але анізотропних керамічних структур.

3.5. Вплив концентрації вуглецевих включень на механічний відгук композитів на основі SiC. 3.5

Для наближення моделі до реальних нанокompозитних матеріалів, в роботі також було досліджено механічну поведінку й тришарової структури, в якій середній шар виступав у ролі модифікованої зони з надлишком вуглецю у вмісті. У стехіометричному 3C-SiC співвідношення атомів кремнію та вуглецю становить 50%/50%. У даному дослідженні моделювалися три варіанти середнього шару, де вуглець частково (або повністю) заміщував кремній у вузлах кристалічної ґратки, створюючи локальну концентрацію вуглецю $x(C)$ на рівні 75%, 87,5% та 100% (останнє шар чистого вуглецю). Отримані криві «напруження–деформація» (рис. 3.6) та відповідні візуалізації кінетики поширення тріщини (рис. 3.7) дозволяють комплексно оцінити вплив таких включень на міцність та механізми руйнування композиту, що стає дуже важливим для подальшого планування розробки покращених матеріалів на основі цієї кераміки.

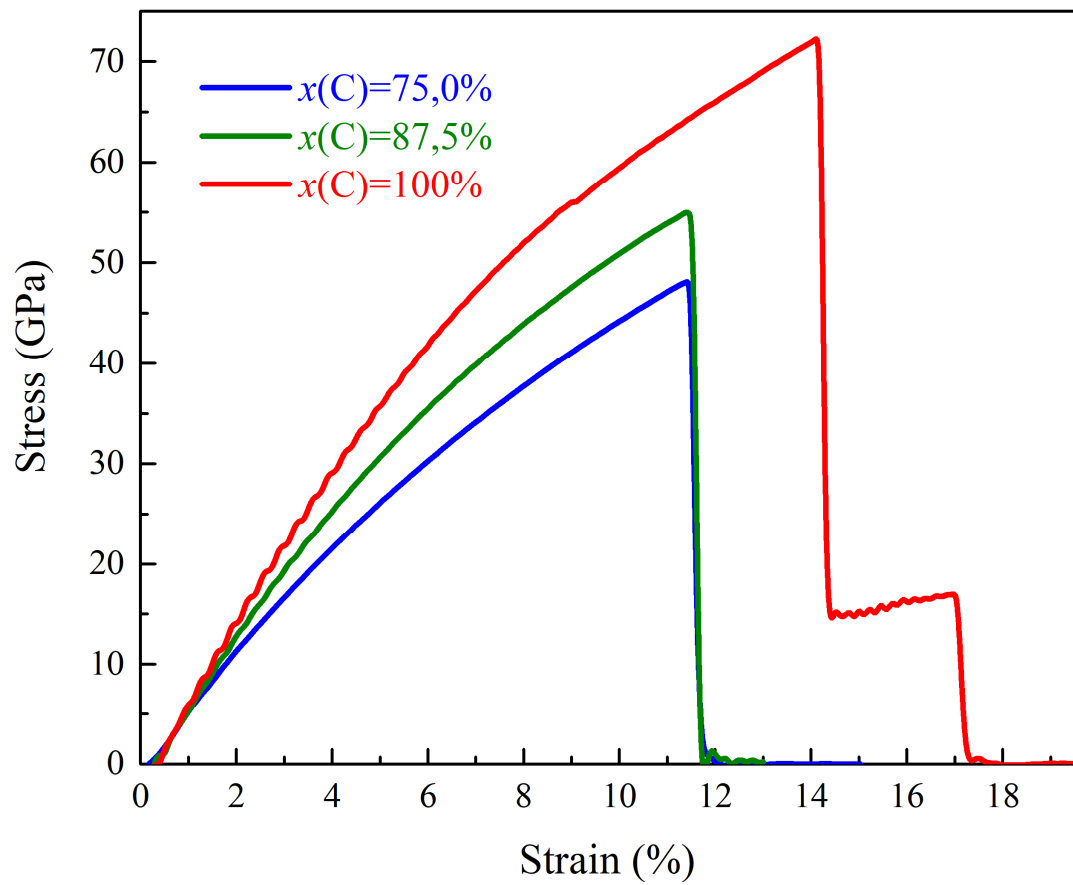


Рис. 3.6. Криві «напруження-деформація» при розтягу для тришарових композитних структур на основі SiC з різною концентрацією вуглецю ($x(C)$) у проміжному модифікованому шарі.

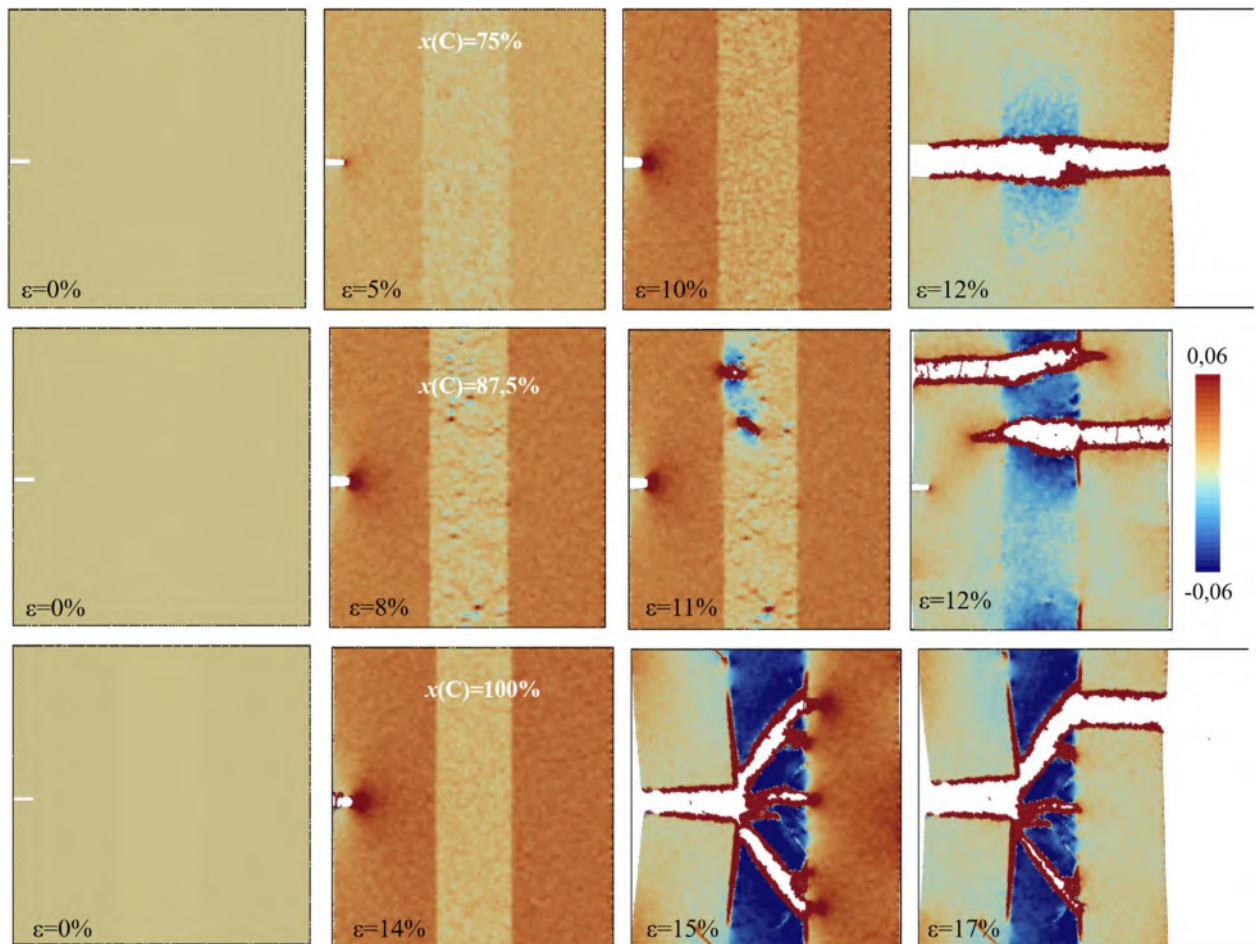


Рис. 3.7. Візуалізація кінетики поширення тріщини (розподіл поля об'ємної деформації) у тришарових композитах на основі SiC залежно від концентрації вуглецю $x(C)$ у проміжному шарі при різних рівнях загальної макродеформації зразка.

Аналіз кривих навантаження (рис. 3.6) демонструє чітку тенденцію, де зі збільшенням частки вуглецю в середньому шарі значно будуть зростати як пружні характеристики (модуль Юнга), так і загальна міцність матеріалу. Для композиту із 75% вуглецю у проміжному шарі максимальне напруження руйнування становить близько 48 ГПа. А подалі, збільшення концентрації до 87,5% підвищує вже цей показник до ~ 55 ГПа, зберігаючи при цьому класичний крихкий характер руйнування для кераміки цього типу, тобто після досягнення піку напруження різко падає до нуля. Але вже принципово інший відгук демонструє структура з шаром чистого вуглецю ($x(C)=100\%$).

Вона не лише досягає найвищої міцності (понад 72 ГПа), але й змінює характер руйнування. Тепер можна бачити, що замість миттєвого розколу на кривій спостерігається ступінчасте падіння напруження до рівня ~ 15 ГПа. При цьому, матеріал зберігає часткову несучу здатність і продовжує деформуватися аж до 17%, демонструючи ефект псевдопластичності та підвищеної в'язкості руйнування.

Візуалізація полів об'ємної деформації (рис. 3.7) дає змогу пояснити ці макроскопічні зміни еволюцією мікроструктури. Спочатку, у випадку $x(C)=75\%$ (це верхній ряд) середня зона не створює суттєвої перешкоди для руху тріщини, тобто фронт руйнування проходить крізь вуглецевмісний шар практично по прямій траєкторії, як і було схоже у монокристалі, що відповідає різкому спаду на кривій навантаження. Для $x(C)=87,5\%$ (середній ряд) картина ускладнюється ще більше, до підходу основної тріщини в середньому шарі ($\epsilon=11\%$) виникають локальні зони перенапружень, які ініціюють зародження вторинних мікротріщин. Тоді основна тріщина взаємодіє з цими дефектами, що призводить до їх локального розгалуження при руйнуванні ($\epsilon=12\%$). Найбільш цікава кінетика буде спостерігатись для $x(C)=100\%$ (нижній ряд у рисунку). Шар чистого вуглецю діє як потужний бар'єр. Коли магістральна тріщина досягає міжфазної межі, вона не може пробити її наскрізь. Натомість відбувається механізм відхилення тріщини і це призводить до масивного розгалуження вздовж інтерфейсу та всередині самого вуглецевого шару ($\epsilon=15\%$).

Фізичне обґрунтування таких результатів також можна описувати, опираючись на відмінностях у міцності міжатомних зв'язків та явищах на міжфазних межах. Зв'язки C–C є значно жорсткішими та міцнішими (енергія розриву вища), ніж зв'язки Si–C. Відповідно, це призведе, що збагачення зони вуглецем підвищує загальний опір структури деформуванню. У випадку шару чистого вуглецю (100%) формується різкий градієнт пружних властивостей між фазами SiC та C. Щоб розірвати надміцні зв'язки C–C, потрібна енергія, яка значно перевищує енергію когезії по межі поділу або

енергію зв'язків Si–C. Через це одній великій тріщині енергетично вигідніше змінити напрямок і почати поширюватися вздовж міжфазної межі, що супроводжується колосальною дисипацією пружної енергії. Саме цей процес відхилення та розгалуження відображається як сходинка на червоній кривій у графіку, забезпечуючи композиту унікальну здатність гасити кінетичну енергію тріщини та запобігати катастрофічному різкому руйнуванню як в попередніх моделюваннях.

3.6. Вплив температури на механічний відгук композитів на основі SiC з вуглецевими включеннями. 3.6

Для кращої оцінки експлуатаційної надійності даних розроблених композитів було проведено порівняльний аналіз їхньої поведінки при кімнатній ($T=300$ K) та високій ($T=1200$ K) температурах. Дослідження фокусувалося на тришаровій структурі з концентрацією вуглецю в середньому шарі $x(C)=87,5\%$, оскільки саме такий тип композитів продемонстрував гарну схильність до розгалуження тріщин.

Аналіз кривих «напруження–деформація» (рис. 3.8) виявляє дуже важливу чутливість нанокompозиту до термічного впливу. При $T=300$ K матеріал демонструє високу міцність (~ 55 ГПа) та пружну стабільність до деформації 11,5%, як і було досліджено вище. Однак збільшення температури експерименту до 1200 K призводить до дуже різкого падіння пікового напруження, і це більш ніж у три рази (до ~ 16 ГПа). Крім того, на кривій при 1200 K спостерігається поява передчасних великих осциляцій напруження вже на рівні деформації 2%, що свідчить про ранню активацію процесів деструкції в зоні включення.

Візуалізація полів об'ємної деформації (рис. 3.9) може показати фізичну причину такої деградації властивостей. При 300 K руйнування ініціюється

початковою тріщиною, яка при взаємодії з вуглецевим шаром стимулює появу вторинних центрів руйнування, що призводить до розгалуження фронту при $\epsilon = 12\%$, як і було описано раніше. При 1200 K картина сильно змінюється. І вже при мінімальних деформаціях ($\epsilon = 2\%$) у середньому шарі починається масовий розрив зв'язків. Замість поступового проростання магістральної тріщини можна спостерігати об'ємне руйнування вуглецевого включення. Через це починають формуватися численні вертикальні мікротріщини, що фактично розшаровують композит зсередини. При $\epsilon = 7\%$ середня зона повністю втрачає цілісність, перетворюючись на слабку структуру, яка не здатна передавати навантаження між шарами SiC.

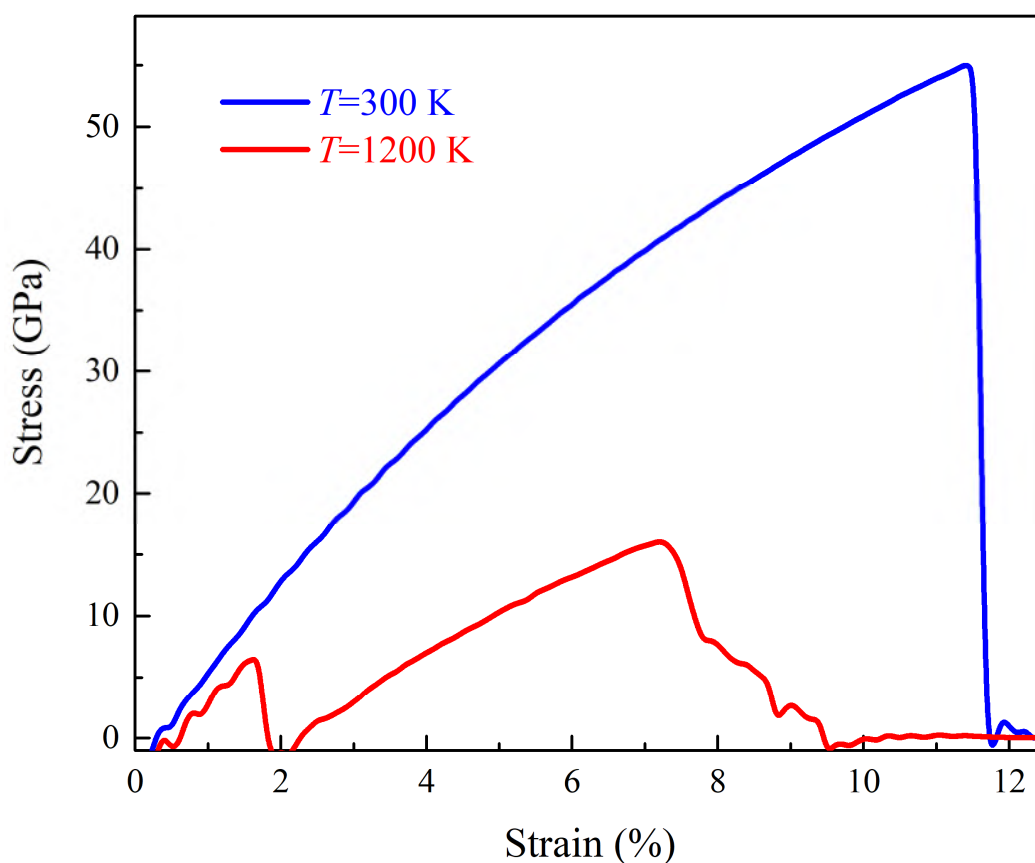


Рис. 3.8. Порівняння кривих «напруження–деформація» для нанокompозиту SiC із $x(C) = 87,5\%$ при температурах 300 K та 1200 K.

Тож інтерпретація спостережуваного ефекту базується на поєднанні високих локальних напружень та ініціалізації теплових флуктуацій. При 1200

К теплова енергія стає рівною з енергією активації розриву зв'язків, які вже перебувають під навантаженням через невідповідність пружних модулів SiC та вуглецевого шару. Так як середній шар є структурно менш однорідним через заміщення атомів, він стає слабкою ланкою, і в ньому тепловий рух атомів найшвидше руйнує кристалічний порядок. Це призводить до переходу від локалізованого крихкого руйнування до дифузного накопичення пошкоджень у всьому об'ємі включення, що дуже сильно буде обмежувати використання таких композитів у високих температурних полях без додаткового легування.

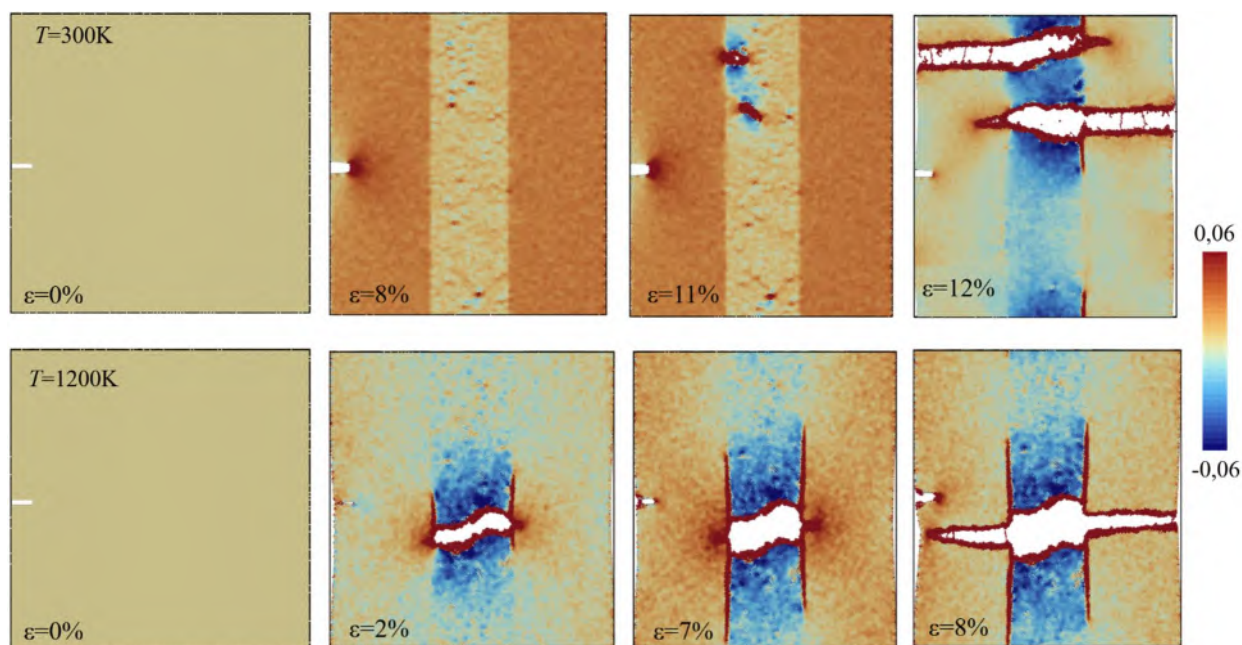


Рис. 3.9. Еволюція процесу руйнування нанокompозиту $\text{SiC}/x(\text{C})=87,5\%$ при різних температурах (300 К та 1200 К) у термінах об'ємної деформації.

ВИСНОВКИ

1. Встановлено, що механічний відгук монокристалічного 3C-SiC визначається поєднанням структурних та зовнішніх чинників: виражена кристалографічна анізотропія зумовлює найвищу міцність площини (111) завдяки її термодинамічній стабільності, тоді як підвищення температури до 1800 K та збільшення швидкості деформації виступають як деструктивні фактори, що призводять до падіння напруження руйнування (до 40%) та зміни характеру розриву міжатомних зв'язків.

2. Доведено, що введення вуглецевих включень у структуру SiC дозволяє радикально підвищити загальну міцність матеріалу (до 72 ГПа при повному заміщенні Si на C у середньому шарі) та трансформувати характер його руйнування з крихкого на в'язке. Основним фізичним механізмом зміцнення є ефект відхилення та розгалуження тріщини на міжфазних межах (crack deflection), що супроводжується значною дисипацією пружної енергії та запобігає моментальному катастрофічному розколу зразка.

3. Показано, що термічна стабільність композитів на основі SiC із вуглецевими включеннями обмежена температурою приблизно 1200 K, при якій спостерігається перехід від локалізованого до об'ємного руйнування. На відміну від кімнатної температури, високий термічний вплив провокує передчасне розшарування та масову деструкцію зв'язків усередині модифікованого шару ще на ранніх стадіях деформування, що призводить до суттєвого зниження опору композиту до зовнішнього навантаження порівняно з нормальними умовами.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1]. Cui, C. B., Beom, H. G. Molecular dynamics simulations of edge cracks in copper and aluminum single crystals. *Computational Materials Science*. 2014. Vol. 95. P. 423–431.
- [2]. Zhang, Y., Jiang, S., Zhu, X., Zhao, Y. Mechanisms of crack propagation in nanoscale single crystal, bicrystal and tricrystal nickels based on molecular dynamics simulation. *Results in Physics*. 2017. Vol. 7. P. 1722–1733.
- [3]. Song, H. Y., Zhang, L., Xiao, M. X. Molecular dynamics simulation of effect of hydrogen atoms on crack propagation behavior of α -Fe. *Physics Letters A*. 2016. Vol. 380, №. 47. P. 4049–4056.
- [4]. Zhang, Y., Jiang, S., Zhu, X., Zhao, Y. A molecular dynamics study of intercrystalline crack propagation in nano-nickel bicrystal films with (0 1 0) twist boundary. *Engineering Fracture Mechanics*. 2016. Vol. 168. P. 147–159.
- [5]. Fang, W., Xie, H., Yin, F., Li, J., Khan, D. F., Fang, Q. Molecular dynamics simulation of grain boundary geometry on crack propagation of bicrystal aluminum. *Materials Science & Engineering A*. 2016. Vol. 666. P. 314–319.
- [6]. Yuan, Y., Wang, Y., Geng, L., Fan, P., Shi, Y., Fang, W., Zhang, Y. In-depth molecular dynamics analysis of crack evolution in polycrystalline chromium under uniaxial tensile deformation. *Journal of Materials Research and Technology*. 2024. Vol. 30. P. 8111–8124.
- [7]. Zhao, X., Liu, S., Xie, Z., Liu, Z., Wang, D., Luo, L. Effects of temperature and strain rate on crack propagation in NiCoCr multi-principal element alloys: A molecular dynamics simulation. *Journal of Materials Research and Technology*. 2024. Vol. 28. P. 2004–2016.

- [13] Y. Zhou, W. Yang, M. Hu, and Z. Yang, "The typical manners of dynamic crack propagation along the metal/ceramics interfaces: A molecular dynamics study," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 112, pp. 27–33, Feb. 2016, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2015.10.012.
- [14] Z. Yang, Y. Zhou, T. Wang, Q. Liu, and Z. Lu, "Crack propagation behaviors at Cu/SiC interface by molecular dynamics simulation," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 82, pp. 17–25, Feb. 2014, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2013.09.029.
- [15] X. Zhou, W. Bu, S. Song, F. Sansoz, and X. Huang, "Multiscale modeling of interfacial mechanical behaviours of SiC/Mg nanocomposites," *Mater. Des.*, vol. 182, Nov. 2019, doi: 10.1016/j.matdes.2019.108093.
- [16] C. R. Dandekar and Y. C. Shin, "Molecular dynamics based cohesive zone law for describing Al-SiC interface mechanics," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 42, no. 4, pp. 355–363, Apr. 2011, doi: 10.1016/j.compositesa.2010.12.005.
- [17] P. Gholizadeh, H. Amini, J. Davoodi, and E. Poursaeidi, "Molecular dynamic simulation of crack growth in Ti/TiN multilayer coatings," *Mater. Today Commun.*, vol. 30, 2022, doi: 10.1016/j.mtcomm.2021.103059.
- [18] X. Han, P. Liu, D. Sun, and Q. Wang, "Molecular dynamics simulations of the tensile responses and fracture mechanisms of Ti₂AlN/TiAl composite," *Theor. Appl. Fract. Mech.*, vol. 101, pp. 217–223, Jun. 2019, doi: 10.1016/J.TAFMEC.2019.03.003.
- [19] S. Weng et al., "Molecular dynamics study of strengthening mechanism of nanolaminated graphene/Cu composites under compression," *Sci. Rep.*, vol. 8, no. 1, 2018, doi: 10.1038/s41598-018-21390-1.
- [20] S. Niknafs, M. Silani, F. Concli, and R. Aghababaei, "Numerical analysis of fatigue crack propagation using a coarse-grained molecular

dynamics approach,” *Int. J. Solids Struct.*, vol. 311, p. 113245, Apr. 2025, doi: 10.1016/j.ijsolstr.2025.113245.