

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
Механіко-машинобудівний інститут
кафедра Технології виробництва літальних апаратів

«На правах рукопису»

УДК 539.3+539.5+620.3

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ В.А. Тітов

«__» _____ 2020 р.

Магістерська дисертація

на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності 131 Прикладна механіка

на тему: *Визначення границі текучості високопористих матеріалів із регулярною структурою*

Виконав:

студент II курсу, групи МД-82мн

_____ Коробко Павло Олександрович _____

(прізвище, ім'я, по батькові)

Керівник: Штерн М. Б. член-кор. НАН України, д.т.н. _____

(посада, науковий ступінь, вчене звання)

(прізвище, ініціали)

Рецензент Михайлов О. В., ст.н.с., д.т.н. _____

(посада, науковий ступінь, вчене звання)

(прізвище, ініціали)

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент _____

Київ – 2020 року

**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

Інститут Механіко-машинобудівний
кафедра Технології виробництва літальних апаратів
Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-науковою
програмою
Спеціальність (спеціалізація) – 131 Прикладна механіка

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Тітов В.А.

«__» _____ 2020 р.

**ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту**

Коробку Павлу Олександровичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації *Визначення границі текучості високопористих матеріалів з регулярною структурою,*

науковий керівник дисертації *Штерн М. Б., член-кор. НАН України, д.т.н.*
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання),

затверджені наказом по університету від «03» березня 2020 р. №800с

2. Термін подання студентом дисертації «12» травня 2020 р.

3. Об'єкт дослідження: *високопористий матеріал зі структурою інверсного опалу, його технологія отримання та перспективи застосування.*

4. Вихідні дані: *Стаття «High strength metallic wood from nanostructured nickel inverse opal materials,» опублікована у журналі Scientific Reports, у 2019 році.*

5. Перелік завдань, які потрібно розробити: *1) виконати чисельне моделювання на елементарній комірці для знаходження пружних властивостей; 2) виконати чисельне моделювання на елементарній комірці для знаходження пластичних властивостей; 3) моделювання процесу наноіндентування.*

6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу:
мультимедійна презентація

7. Орієнтовний перелік публікацій: тези доповіді на міжнародній конференції, стаття у фаховому виданні.

8. Консультанти розділів дисертації*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
2, 3	Кузьмов А. В., к.т.н. ст. викл.		

9. Дата видачі завдання «24» січня 2019 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Аналіз існуючих наукових праць за відповідною тематикою	01.06.2019	
2	Підготовка матеріалів до чисельного моделювання	01.09.2019	
3	Проведення ряду чисельних експериментів відповідно до цілей дослідження	01.02.2020	
4	Оформлення результатів дослідження	01.05.2020	

Студент

_____ (ініціали, прізвище)

Науковий керівник дисертації

_____ (ініціали, прізвище)

Реферат

Робота виконана на 70 сторінках, включає 26 ілюстрацій, 10 таблиць та 33 посилання на джерела.

Суть роботи полягає у розробці методології із визначення механічних властивостей наноструктурних матеріалів зі структурою інверсного опалу. На сьогоднішній день наявні декілька робіт, що в своїй основі містять натурні експерименти із визначення певних параметрів матеріалу, що досліджується. Ці експерименти не тільки тривалі у часі і підготовці до проведення, а й мають досить високу вартість. Актуальним є зменшення фінансових витрат при проектуванні подібних матеріалів та скорочення термінів підготовки даних до виробництва, шляхом створення повністю комп'ютеризованої розрахункової методології із дослідження властивостей матеріалу.

Запланованим результатом дослідження є розроблена методологія з теоретичної оцінки властивостей метаматеріалів зі структурою інверсного опалу. Завданнями дослідження є:

- знаходження пружних властивостей матеріалу;
- знаходження пластичних властивостей матеріалу;
- розробка чисельного аналогу експерименту з наноіндентування зразків матеріалу.

Об'єктом дослідження є структура інверсного опалу, технологія її отримання та можливі області застосування.

Предметом дослідження є механічні властивості метаматеріалу зі структурою інверсного опалу.

В основу дослідження покладено чисельний аналіз системи методом скінченних елементів. Визначення ефективних властивостей структури здійснюється за допомогою мультимасштабного підходу, що дає змогу працювати в об'ємі матеріалу, що обумовлює найменші витрати часу при обчисленнях. Моделювання процесу наноіндентування зводиться до

чисельного аналізу у вісесиметричній формі, що дозволяє значно спростити чисельну модель, без втрати точності обчислення. Визначення параметрів моделі матеріалу при постановці чисельного аналогу процесу наноіндентування здійснювалося за допомогою теоретичного аналітичного підходу спільно із результатами мікромасштабного моделювання на основі теоретичних матеріалів, що розроблені авторами моделі.

У результаті проведення дослідження в першу чергу вдалося уточнити деякі теоретичні питання попередніх робіт та в повній мірі описати взаємозв'язок механічних властивостей твердої фази із ефективними властивостями метаматеріалу. Від попередніх досліджень робота відрізняється тим, що вся методологія із визначення властивостей ґрунтується виключно на теоретичних підходах і не вимагає проведення жодних натурних експериментів.

Результати проведених досліджень можуть використовуватися при проектуванні структури для використання в якості елементів конструкцій, або при проектуванні структур, подібних до розглянутої у цій роботі. Результати робіт із визначення ефективних пружних властивостей структури інверсного опалу були опубліковані у Матеріалах XX міжнародної студентської науково-практичної конференції «Наука та техніка XXI століття» що відбувалася у листопаді 2019 року.

Ключові слова: *метод скінченних елементів, наноструктурні матеріали, високопористі матеріали, структура інверсного опалу, пластичність, границя текучості.*

Abstract

The work is done on 70 pages, includes 26 illustrations, 10 tables and 33 references.

The essence of the work is to develop a methodology for determining the mechanical properties of nanostructured materials with the structure of inverse opal. To date, there are several works that are based on field experiments to determine certain parameters of the material under study. These experiments are not only time-consuming and preparatory, but also have a fairly high cost. It is important to reduce the financial costs of designing such materials and reduce the time of preparation of data for production, by creating a fully computerized calculation methodology for studying the properties of the material.

The planned result of the research is the developed methodology for theoretical evaluation of the properties of metamaterials with the structure of inverse opal. The objectives of the study are:

- finding the elastic properties of the material;
- finding the plastic properties of the material;
- development of a numerical analogue of the experiment on nanoindentation of material samples.

The object of research is the structure of inverse opal, the technology of its production and possible applications.

The subject of research is the mechanical properties of a metamaterial with the structure of inverse opal.

The study is based on numerical analysis of the system by the finite element method. The effective properties of the structure are determined using a multiscale approach, which allows you to work in the amount of material that causes the least time spent in calculations. Modeling of the nanoindentation process is reduced to numerical analysis in axisymmetric form, which greatly simplifies the numerical

model without losing the accuracy of the calculation. Determining the parameters of the material model in setting up a numerical analogue of the nanoindentation process was carried out using a theoretical analytical approach together with the results of microscale modeling based on theoretical materials developed by the authors of the model.

As a result of the research, first of all, it was possible to clarify some theoretical issues of previous works and to fully describe the relationship between the mechanical properties of the solid phase and the effective properties of the metamaterial. The work differs from previous research in that the whole methodology for determining the properties is based solely on theoretical approaches and does not require any field experiments.

The results of the research can be used in the design of the structure for use as structural elements, or in the design of structures similar to those discussed in this paper. The results of work to determine the effective elastic properties of the structure of inverse opal were published in the Proceedings of the XX International Student Scientific and Practical Conference "Science and Technology of the XXI Century" held in November 2019.

Keywords: finite element method, nanostructured materials, highly porous materials, structure of inverse opal, plasticity, yield strength.

Зміст

Вступ	9
1 Технологія отримання та виробництва матеріалу	13
2 Визначення ефективних властивостей структури	17
2.1 Визначення пружних властивостей структури	19
2.2 Визначення пластичних властивостей структури.....	24
2.3 Поведінка структури при значних деформаціях.	33
3 Наноіндентування.....	37
3.1 Постановка задачі у вісесиметричній формі.	37
3.2 Визначення параметрів моделі матеріалу.	40
3.3 Моделювання наноіндентування МСЕ.....	50
4 Порівняння отриманих результатів	56
5 Оцінка потенційних областей застосування структури	62
Висновки	65
Список використаних джерел	68

Вступ

Наука про матеріали, або ж матеріалознавство супроводжує людину із початку її розвитку як окремого виду. Розуміння властивостей матеріалів та можливість прогнозування їх властивостей у тих чи інших умовах було для людини не тільки питанням допитливості, а й питанням безпеки і виживання. Подальший розвиток матеріалознавства давав людині можливість розширення своїх володінь та завоювання інших народів. Деякі матеріали настільки вплинули на розвиток людства, що історики навіть розмежовують періоди життя людства, надаючи їм назви матеріалів – кам'яна доба, бронзова доба, залізна доба. [1] Деякі матеріали, такі як сталь та алюміній, мають вплив на людину і по сьогоднішній день.

Сучасне матеріалознавство вийшло далеко за межі однорідних (гомогенних) або, як їх ще називають, компактних матеріалів. Поєднуючи у собі досягнення металургії, хімії та фізики твердого тіла, вчені та інженери створюють матеріали та їх поєднання для задоволення вимог міцності, стійкості, довговічності, а також функціональних особливостей – теплопровідності, світлопроникності, радіопрозорості та ін.

Одною із таких прогресивних областей розвитку матеріалознавства є композиційні матеріали. Композиційний матеріал – матеріал, що утворений поєднанням двох або більше нерозчинних один в одному матеріалах, чії властивості відрізняються. В результаті такого поєднання отримується матеріал, властивості якого значущо відрізняються від кожного із його складових. [2] В залежності від виду основи (матриці) в якій розміщуються компоненти, що називаються наповнювачем, композити поділяють на групи: композити на металевій основі, композити на керамічній основі, композити на полімерній основі. Останні в свою чергу також поділяються на групи в залежності від матеріалу наповнювача: склопластики, вуглепластики і т.д. Також вводять класифікацію за геометрією компонентів: дисперсно зміцнені композити, шаруваті композити, волокнонаповнені.

Іншим вектором розвитку матеріалознавства є наноструктурні матеріали. До цих матеріалів відносяться такі, структурні елементи яких знаходяться у межах 1 – 100 нм (в окремих випадках до 1000 нм). [3] Зазвичай властивості наноструктурних матеріалів носять унікальний характер. Структура і матеріали, що утворюють цю структуру, закладаються під конкретні умови експлуатації композиту, а також під індивідуальні вимоги щодо його утилізації, переробки та впливу на навколишнє середовище.

Наноструктурні матеріали існують не лише як штучно створені матеріали, але і як природні органічні та неорганічні структури. Визначеною наноструктурою серед органічних об'єктів характеризуються кігті, кістки, бавовна, корали. Відомим представником неорганічної групи природніх наноструктурних матеріалів є опал – аморфний мінерал класу силікатів, утворений з аморфізованої суміші двооксиду кремнію та молекулярної води. Відомий як дорогоцінний камінь, знайшов застосування у ювелірній промисловості. Є природнім фотонним кристалом – тобто матеріалом структура якого характеризується періодичною зміною показника заломлення у просторових напрямках. [4]

Недоліком вищезгаданих наноструктурних матеріалів є їхня хаотична внутрішня будова. Саме тому у наукових роботах йде мова переважно про функціональні характеристики таких матеріалів. [5] Особливо розвивається область дослідження оптичних властивостей та технологія виготовлення структур. [6], [7] Наноструктурні матеріали, які мають впорядковану періодичну структуру, називаються метаматеріалами.

Перші роботи у цьому напрямку можна віднести до кінця XIX століття. У 1898 році Джагадіс Чандра Бозе провів перший мікрохвильовий експеримент із дослідження поляризаційних властивостей структур викривленої конфігурації, що були ним створені. [8], [9] У 1914 році Ліндман впливав на штучні середовища, що представляли собою множину хаотично орієнтованих дрібних дротів, що скручені у спіраль та розміщені у

середовище, що їх орієнтує. [8], [9] У 1946-1948 роках Уїнстон Кок вперше створив мікрохвильові лінзи, використавши провідникові сфери, диски та періодично розташовані металеві смужки, що фактично утворювали штучне середовище із специфічним за величиною індексом заломлення. [8], [9] Детальний опис історії питання можна знайти в роботі Аграновича і Гартштейна [10], а також в публікаціях [8] та [9]. У більшості випадків історія питання про матеріали із від'ємним коефіцієнтом заломлення починається із роботи радянського фізика Віктора Веселаго, що була опублікована в журналі «Успехи физических наук» у 1967 році. [11] Стаття розповідає про можливість існування матеріалу із від'ємним коефіцієнтом заломлення, котрий був названий «лівостороннім». Автор прийшов до висновку, що з таким матеріалом майже всі відомі оптичні явища розповсюдження хвиль суттєво змінюються, хоча в той час матеріали з від'ємним коефіцієнтом заломлення ще не були відомі. Проте такі середовища значно раніше обговорювалися в роботі Сивухіна [12] та в статтях Парфимова [13].

В останні роки ведуться інтенсивні дослідження явищ, що пов'язані з від'ємним коефіцієнтом заломлення. Причиною інтенсифікації цих досліджень стала поява нового класу штучно модифікованих матеріалів з особливою структурою, про які ми вже згадували – метаматеріалів. Електромагнітні властивості метаматеріалів визначаються елементами їх внутрішньої структури, що розміщуються за заданою схемою на мікроскопічному рівні. Тому властивості цих матеріалів можливо змінювати таким чином, щоб вони мали більш широкий діапазон електромагнітних характеристик, включаючи від'ємний коефіцієнт заломлення.

Що стосується механічних властивостей метаматеріалів, то ця область до сьогодні залишається досить невивченою. По-перше впорядкована структура у просторі може простягатися в одному вимірі (1D композити), у двох напрямках (2D композити), та у тривимірному просторі. По-друге доводити ефективність тої чи іншої структури метаматеріалу доводиться

досить тривалими дослідженнями. По-третє – підбравши оптимальну структуру під поставлену задачу для неї потрібно визначити ефективно застосування матеріалу твердої фази та технологію виготовлення виробів із отриманого метаматеріалу. Очевидно, що не останнє місце у цьому циклі розробок займає економічна доцільність цих досліджень.

В останні п'ять років з'являються роботи присвячені матеріалам із впорядкованою структурою інверсного опалу, які розглядаються у якості конструкційних матеріалів. Перевага такої структури в першу чергу полягає у високих питомих характеристиках міцності та жорсткості. [14]

Матеріалами твердої фази у цих роботах виступають кремній та його діоксид, оксиди алюмінію, титану [14] а також нікель [15] або навіть золото. [16], [17] Роботи деталізують питання експериментального та чисельного вивчення механічних властивостей матеріалу зі структурою інверсного опалу, проте опускають питання обґрунтованого вибору моделі пористого тіла для експериментів із наноіндентування. Одна із робіт [15] не закладає у чисельний експеримент суто аналітичний підхід, а використовує результати натурного експерименту, умовно зводячи отримані результати до необхідного параметру матеріалу твердої фази при дослідженні елементарного об'єму структури.

В першу чергу ці роботи спрямовані на знаходження оптимальної комбінації пористості, а в перерахунку і щільності матеріалу, із характеристиками міцності, аніж на дослідження фундаментальних питань протікання процесу деформації структури, поведінки структури під навантаженням і узгодження із існуючими аналітичними моделями та сучасними уявленнями. Саме на останніх питаннях ми зосередимо наше дослідження і спробуємо закласти методологічну базу для повністю теоретичного вивчення подібних структур.

1 Технологія отримання та виробництва матеріалу

Оцінка технології виготовлення матеріалу є одним із ключових напрямків дослідження і розвитку питання практичної доцільності дослідження. Показники часу, які відповідають необхідним значенням для масштабування виробництва, слугують початковим параметром при оцінці ефективності виробництва, тому у сучасних роботах не уникають і питання виготовлення метаматеріалів зі структурою інверсного опалу. [7], [14], [15]

Для проведення досліджень у вище згаданих роботах використовують зразки у вигляді тонких плівок, тому методи виготовлення напівфабрикату в основному зосереджені на отриманні листового тіла. Друге питання, що охоплюється у цих роботах – це об'єми виробництва, адже існує очевидна різниця між виготовленням експериментального плоского зразка площею 1 см^2 і необхідного для виробництва листа розмірами $3 \times 2 \text{ м}$.

Суть методу, що висвітлюється у роботі [15] полягає у наступному.

Структура інверсного опалу виготовляється у декілька етапів (рис. 1.1). Першим етапом є самоскладання полістирольних сфер у опалову структуру (рис. 1.1 а) на підкладку із вапняного скла із шаром золота. Другим етапом є спікання сфер для утворення між ними з'єднання (рис. 1.1 б). На третьому етапі відбувається електроосадження нікелю, щоб заповнити решту простору між сферами (рис. 1.1 в). Четвертим етапом є травлення полістиролу і отримання власне структури інверсного опалу (рис. 1.1 г) після чого на утворену структуру може бути нанесений додатковий шар іншого матеріалу (рис. 1.1.д). Скло з покриттям золота виготовляють розпиленням 8 нм хрому з подальшим нанесенням 50 нм золота на скляну підкладку товщиною 1 мм . Далі цю підкладку розділяють на більш дрібні зразки, які в подальшому промиваються у розчині кислот протягом 4 годин і просушуються. Метод самостійної упаковки полістирольних сфер полягає у розміщенні контейнеру із колоїдним розчином сфер на гарячу плиту за температури 55°C . Далі цей контейнер накривають і випаровують рідину протягом 24-30 годин допоки розчин не

висохне. Діаметр сфер може варіюватися від 200 до 2000 нм, для керування структурою. Отриману структуру опалу спікали за температури 96°C протягом від 30 хвилин до 6 годин, в залежності від діаметра полістирольних сфер.

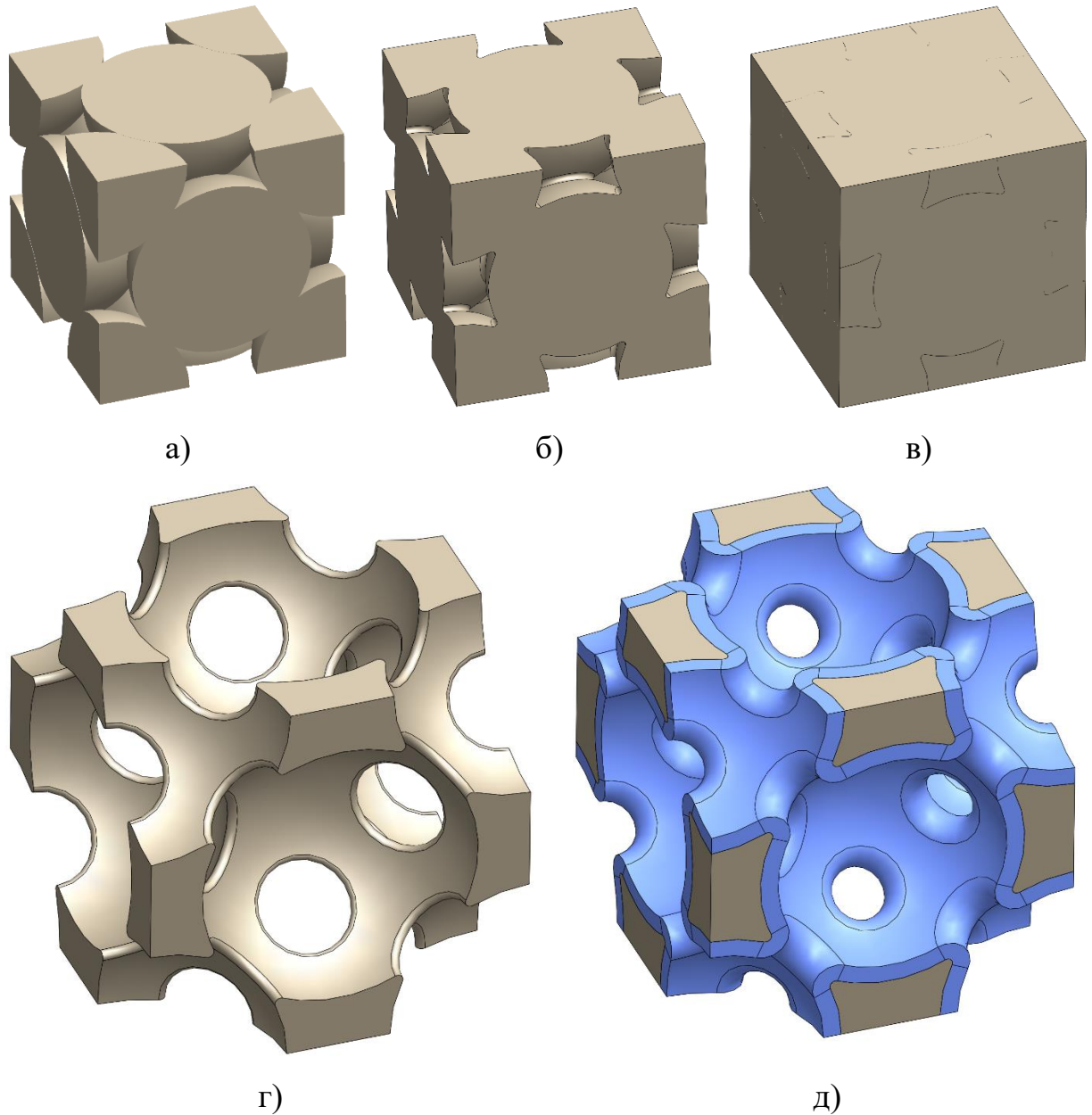


Рис. 1.1 Схема отримання структури інверсного опалу: а) складання сфер у структуру опалу; б) спікання сфер; в) електроосадження нікелю; г) видалення сфер; д) нанесення додаткового шару матеріалу.

Більш тривалий час агломерації збільшує діаметр зв'язку між сферами та зменшує об'ємну частку нікелю. Наступним кроком нікель

електроосаджується крізь полістирольний опал при постійній напрузі 1,8 В на відповідному нікелевому електроді протягом 32 хвилин у комерційному розчині Technic RTU Mechanical Agitation. Далі полістирол видаляють зануренням отриманого зразка у ванну із тетрагідрофураном на 24 години із наступним промиванням розчином тетрагідрофурану і толуолу. Таким чином отримуються експериментальні зразки товщиною близько 15-20 мкм. Додатковий шар матеріалу наноситься на отриманий інверсний опал використовуючи той самий розчин для гальванічного покриття, але пульсуючи напругу у 1,7 В протягом 30 секунд із інтервалом 20 секунд протягом 15-90 циклів. Імпульсне нанесення дозволяє отримати рівномірний шар покриття по всій поверхні інверсного опалу на всю глибину зразка. [18]

Простий розрахунок показує, що необхідний час для отримання плоского напівфабрикату складає від 49 до 60 годин, що досить тривало.

Запропоноване рішення масштабування виробництва командою американських вчених здатне значно зменшити витрату часу на виготовлення напівфабрикату зі структурою інверсного опалу. [19] Суть його полягає у вертикальному розміщенні підкладки у колоїдній суміші пластикових сфер із дистильованою водою (рис. 1.2), яка в подальшому випаровується. Такий спосіб збільшує тривалість «росту» структури у вертикальному напрямку до двох днів, проте не має обмежень у розмірі підкладки в горизонтальному напрямку, що в подальшому може ділитися на заготовки потрібного розміру.

Такий спосіб може збільшити варіації форм напівфабрикату, що отримується. Таким чином можливим є отримання періодичного профілю і тіл обертання у вигляді оболонок.

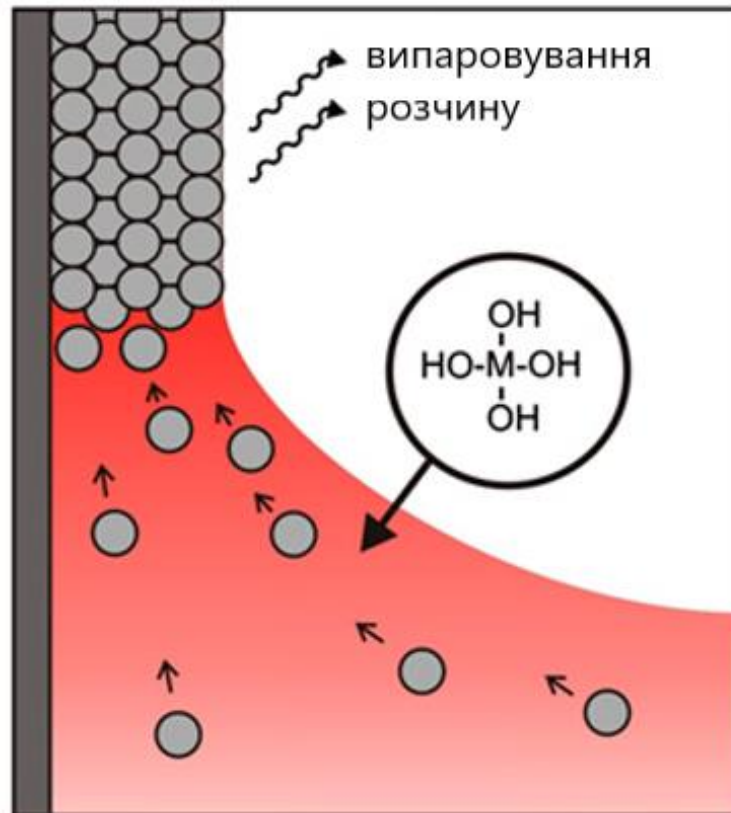


Рис. 1.2 Вертикальний метод упаковки пластикових сфер.

Оскільки структура матеріалу відноситься до пористого тіла із відкритою комірною, то у функціонуванні конструктивного елемента, що виготовлений із такого матеріалу, є певний недолік, що пов'язаний із проникністю середовища. Ця властивість може мати позитивні сторони, наприклад при використанні такої структури для фільтрації рідин. Проте можливість проникнення у тіло поверхнево активних речовин або розчинів солей і кислот може негативно вплинути на тривалість життя елемента конструкції. Для боротьби із цим негативним явищем ми пропонуємо використовувати захисні покриття для елементів конструкції, що виготовлені із такого типу матеріалу. Це може мати вплив не тільки у функціональних характеристиках елемента, але й у механічних властивостях деталі (стійкість до утворення тріщини, жорсткість поверхневого шару і т. д.).

2 Визначення ефективних властивостей структури

Завданням цього етапу дослідження є визначення «реальних» властивостей структури інверсного опалу, що утворена матеріалом, механічні характеристики якого наперед відомі. Такі властивості наноструктурного матеріалу отримали назву – ефективні властивості.

Для розуміння характеру поведінки наноструктурного матеріалу під дією зовнішніх сил і побудови феноменологічної моделі матеріалу використовуються декілька основних підходів. Одним із таких є використання аналітичної механіки. Проте цей підхід має ряд суттєвих недоліків. Головним недоліком є складність описання нелінійної поведінки пластичності та повзучості структури під навантаженням. Також існує обмеження у граничних умовах та врахуванні зміни геометрії наноструктури у процесі деформування структурних елементів. [20]

Вирішення поставленої задачі досягається використанням мультимасштабного підходу до моделювання поведінки структури. Цей підхід базується на використанні методу скінченних елементів при вирішенні задачі механіки деформівного твердого тіла. У об'ємі метаматеріалу виділяється елементарна комірка, періодичне відтворення якої вздовж трьох осей прямокутної системи координат утворить структуру, що досліджується.

Використання мультимасштабного підходу обумовлено ще й тим, що за рахунок періодичності структури ми можемо чітко виокремити елементарний об'єм у просторі, що розглядається. На відміну від експериментів з визначення механічних властивостей композитів, що зміцненні дисперсними волокнами, які розподілені хаотично в об'ємі матриці, де для отримання достовірних результатів необхідно брати границі елементарного об'єму достатньо великими, задля адекватного усереднення його властивостей, [21] або вводити значні спрощення, що збільшить похибку чисельного експерименту, [22] у періодичній структурі інверсного опалу ми маємо змогу виділити об'єм, порядок розмірності якого співпадає із розмірами

дисперсного елемента, що утворює геометрію структури. Таким чином величина похибки чисельного експерименту з визначення механічних властивостей не залежить від розмірів обраної репрезентативної комірки, а, отже, ми маємо змогу працювати з мінімально допустимими об'ємами і раціонально використовувати ресурси обчислювальної техніки, що в першу чергу має як результат економію часу, а у випадку подрібнення сітки скінченних елементів – збільшення точності розрахунку.

Використання моделі матеріалу для постановки задач механіки деформівного твердого тіла вимагає присутності наперед визначених залежностей між напруженнями та деформацією. Найбільш розповсюджений підхід до моделювання процесів деформування – це феноменологічний підхід до визначення властивостей матеріалу. У такому випадку тіло представлено як суцільне середовище в якому справедлива залежність $\sigma = (\varepsilon, T, \dot{\varepsilon})$, або інша, що задовольняє експериментальні дані.

Щоб створити феноменологічну модель компактного матеріалу, використовують стандартизовані тести із визначення механічних властивостей (випробування на розтяг, ударну в'язкість, тощо). Для структурно гетерогенного матеріалу також необхідно врахувати вплив структури на поведінку композиту під навантаженням при визначенні механічних властивостей. Як ми покажемо нижче, саме механіка передачі зусилля в об'ємі матеріалу має визначальний вплив на його властивості.

2.1 Визначення пружних властивостей структури

У цьому підрозділі висвітлюється дослідження пружної поведінки метаматеріалу зі структурою інверсного опалу (рис. 2.1).

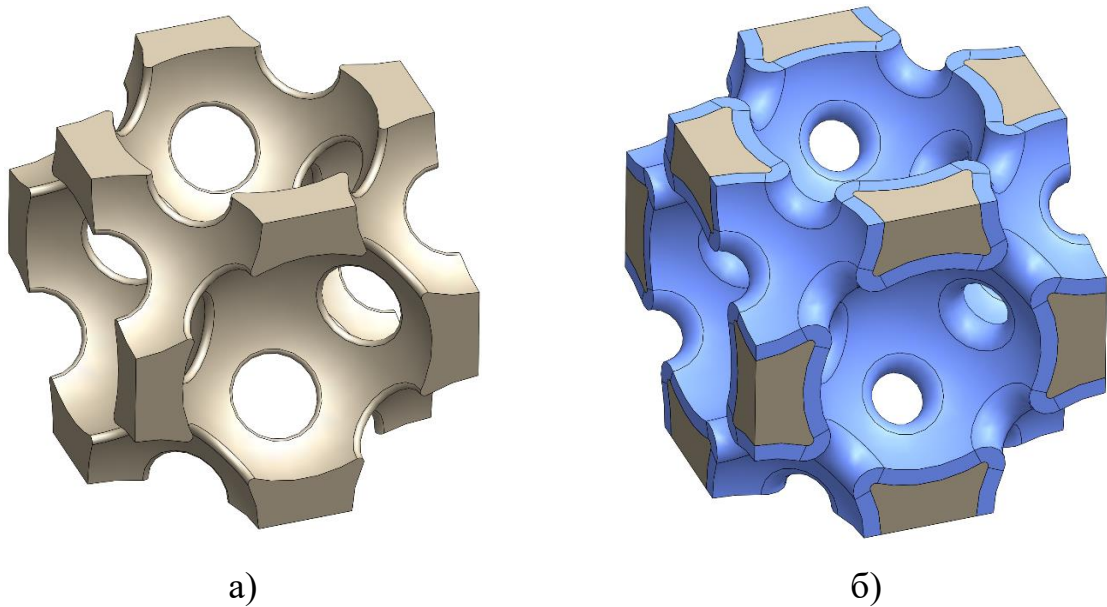


Рис. 2.1 Структура інверсного опалу: а) структура без додаткового шару; б) структура із нанесеним шаром твердої фази.

Для цього, елементарний (представницький) об'єм, що виділяється із простору матеріалу, піддається двом схемам навантаження – схемі гідростатичного стиску та схемі чистого зсуву (рис. 2.2).

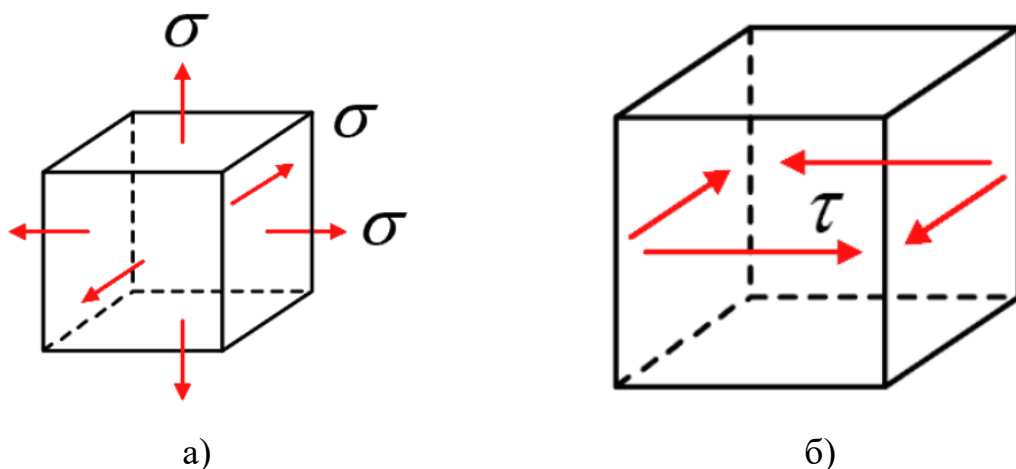


Рис. 2.2 Схема навантаження елементарного об'єму: а) схема гідростатичного стиску; б) схема зсувного навантаження.

Для постановки чисельного експерименту із визначення ефективних пружних властивостей наноструктурного матеріалу необхідно використовувати властивості твердої фази пористого матеріалу. В межах нашого дослідження в ролі твердої фази основи та покриття виступає електроосаджений нікель пружні константи якого відповідають властивостям чистого нікелю (табл. 2.1).

Таблиця 2.1

Матеріал	Густина, ρ	Модуль Юнга, E	Коефіцієнт Пуассона, μ
Електроосаджений нікель	$8900 \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right]$	171 ГПа	0,31

Як було зазначено вище, структуру необхідно піддати гідростатичному та зсувному навантаженню. Для того, щоб відтворити це математично, ми використали граничні умови на елементарній комірці, які трансформуються у матрицю деформацій (e_{ij}^0) із якої ми можемо розрахувати нормальну деформацію (e^0) та зсувну деформацію (γ^0) за наступними формулами:

$$e^0 = e_{11}^0 + e_{22}^0 + e_{33}^0; \quad (2.1)$$

$$\gamma^0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{(e_{11} - e_{22})^2 + (e_{22} - e_{33})^2 + (e_{33} - e_{11})^2 + 6(e_{12}^2 + e_{23}^2 + e_{31}^2)} \quad (2.2)$$

Оскільки границя елементарного об'єму є паралелепіпедом, то, з урахуванням симетрії структури, умови для мікромеханічного осереднення композиту з періодичною структурою можна подати у вигляді переміщень граней, що перпендикулярні до осей прямокутної системи координат (табл. 2.2). [23]

Таблиця 2.2

Напруження	Граничні умови	e_{ij}^0	e^0	γ^0
Гідростат.	$\vec{n} = (1,0,0): U_1 = -X$ $\vec{n} = (0,1,0): U_2 = -Y$ $\vec{n} = (0,0,1): U_3 = -Z$	$e_{ij}^0 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	3	0
Зсув	$\vec{n} = (1,0,0): U_1 = X$ $\vec{n} = (0,1,0): U_2 = -Y$	$e_{ij}^0 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$	0	$\sqrt{2}$

Моделювання процесу навантаження методом скінченних елементів проводимо у програмному середовищі ABAQUS/Standard. Модель матеріалу закладаємо ізотропною пружною, із властивостями, що наведені у таблиці 2.1. До елементарної комірки на відповідні грані прикладаємо переміщення, що відповідають зсувному та гідростатичному навантаженню, відповідно до параметрів, що наведені у таблиці 2.2. Використовуємо автоматичне розбиття твердої фази структури на сітку із десятиточкових квадратичних тетраедричних скінченних елементів за типом об'ємного напруження. Результати моделювання гідростатичного стиску структури із діаметром пори 495 нм та з нанесеним шаром нікелю 33 нм показано на рис. 2.3.

Шуканим параметром, при моделюванні гідростатичного навантаження є величина повної внутрішньої енергії ALLIE, накопиченої в процесі деформування. Визначивши цей параметр, розраховуємо значення повної пружної питомої енергії із наступного виразу:

$$W = \frac{ALLIE}{V_k}, \quad (2.3)$$

де V_k – об'єм представницької комірки.

З іншого боку, повна пружна питома енергія W визначається, як [24]:

$$W = \frac{K}{2} (e^0)^2 + G(\gamma^0)^2, \quad (2.4)$$

де K – об'ємний модуль, Па;

G – модуль зсуву, Па.

Враховуючи граничні умови (табл.2.2), із формули (2.4) ми можемо вирахувати об'ємний модуль K за наступною формулою:

$$K = \frac{2}{9} * W_{\Gamma} \quad (2.5)$$

де W_{Γ} – питома пружна енергія накопичена в результаті гідростатичного стискання, Па.

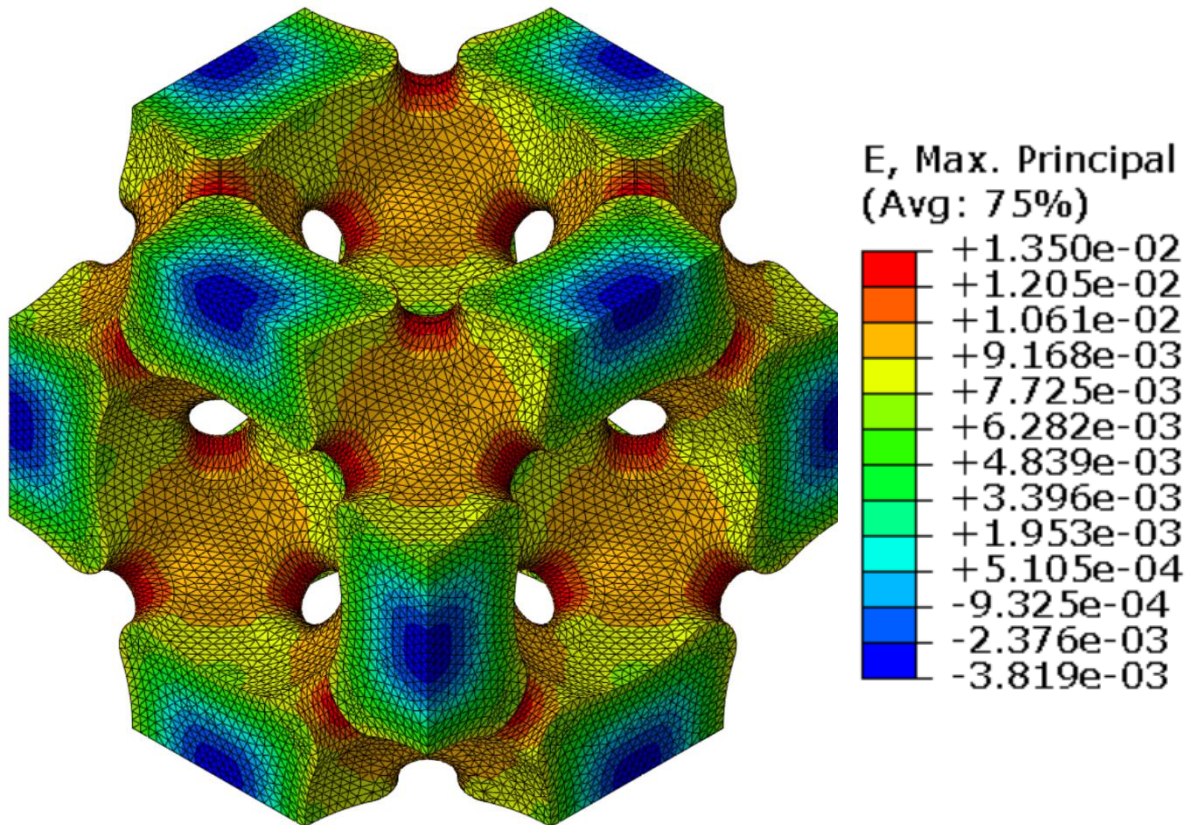


Рис. 2.3 Ступінь деформації при гідростатичному стиску

Аналогічно до гідростатичного стиску виконуємо моделювання деформації зсуву (рис.2.4). Шуканим параметром, при моделюванні гідростатичного навантаження є величина повної внутрішньої енергії ALLIE, накопиченої в процесі деформування. Визначивши цей параметр, розраховуємо значення повної пружної питомої енергії за формулою (2.3).

Враховуючи граничні умови (табл.2), із формули (2.4) ми можемо вирахувати модуль зсуву G за наступною формулою:

$$G = \frac{1}{2} W_{зс} \quad (2.6)$$

де $W_{зс}$ – питома пружна енергія накопичена в результаті деформації зсуву, Па.

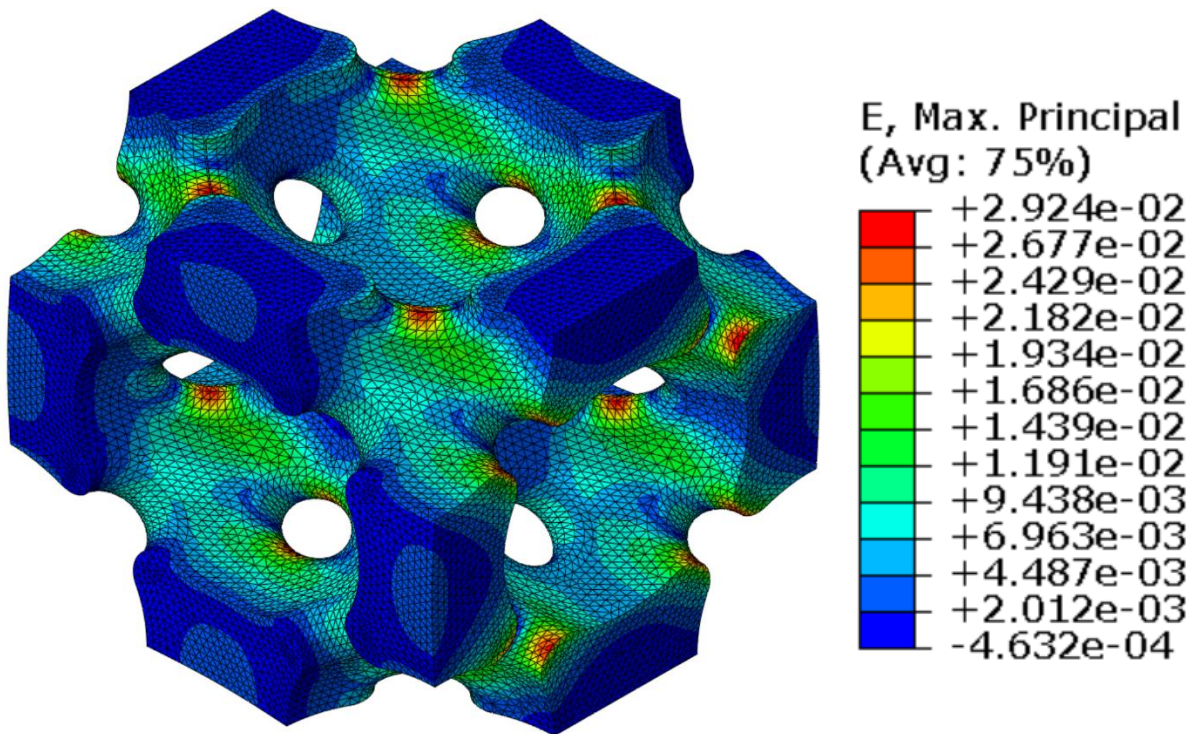


Рис. 2.4 Ступінь деформації при чистому зсуві

Отримані значення об'ємного модуля K і модуля зсуву G повністю описують ізотропну пружну поведінку структури інверсного опалу під навантаженням. У законі Гука для ізотропного лінійного пружного матеріалу, існує однозначний зв'язок між пружними константами матеріалу, тому для визначення ефективного модуля Юнга E^{eff} та коефіцієнту Пуассона ν^{eff} справедливі наступні залежності [25]:

$$E^{eff} = \frac{9KG}{3K + G}; \quad (2.7)$$

$$\nu^{eff} = \frac{3K - 2G}{2(3K + G)}. \quad (2.8)$$

Узагальнимо отримані значення із моделювання методом скінченних елементів з результатами аналітичних розрахунків у вигляді таблиці (табл. 2.3), де одночасно наведемо порівняння із властивостями матеріалу твердої фази.

Таблиця 2.3

Структура	Θ , %	W_r , [ГПа]	W_{zc} , [ГПа]	K , [ГПа]	G , [ГПа]	E , [ГПа]	ν
Гомогенний Ni	0	-	-	-	-	171	0,31
NiO 260нм	90	8,67	0,588	1,93	0,294	0,84	0,427
NiO 520нм	84	21,5	2,53	4,77	1,27	3,49	0,378
NiO 930нм	90	8,01	0,513	1,78	0,257	0,735	0,431
NiO 470+19нм	65	79,3	14,4	17,6	7,2	19	0,32
NiO 495+33нм	57	113	22,5	25,1	11,25	29,3	0,305

2.2 Визначення пластичних властивостей структури

Пластичність – стан матеріалу при якому частина набутої деформації від дії зовнішніх або внутрішніх сил після припинення їхньої дії залишається у системі. Така деформація називається незворотною або ж пластичною деформацією.

Для визначення пластичних властивостей структури інверсного опалу ми скористалися мікромасштабним підходом, що описаний у розділі 2.1. Проте у постановці чисельного експерименту із визначення пластичних властивостей структури наявні суттєві відмінності від постановки задачі з дослідження пружних властивостей.

В першу чергу відмінності стосуються геометрії елементарної комірки, що виділяється із об'єму матеріалу. При постановці задачі дослідження пластичності ми використали елементарну комірку у формі паралелепіпеда із двома площинами симетрії, що співпадають із площинами XOY та YOZ (рис.2.5). Введення симетрії диктується необхідністю

подрібнення сітки скінченних елементів, що призводить до зростання тривалості обчислення кожної ітерації і процесу деформування в цілому. Виокремивши четверту частину від комірки, що представлена на рис. 2.3 ми досягли значного скорочення тривалості розрахунку.

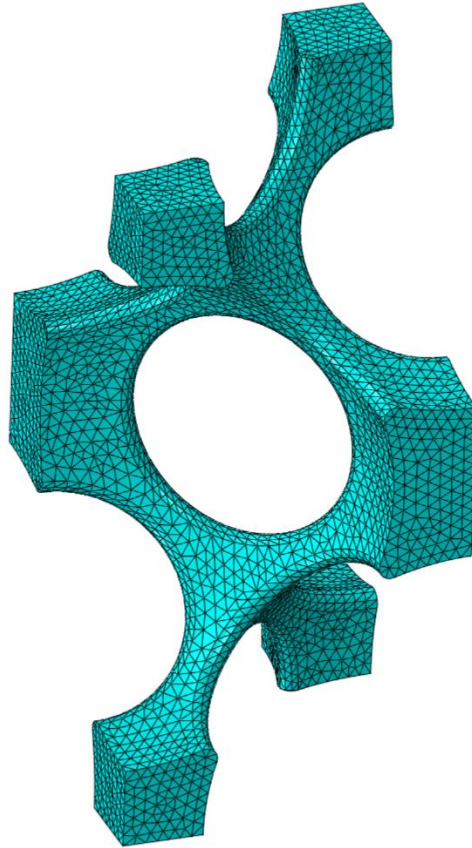


Рис. 2.5 Елементарний об'єм для визначення пластичних властивостей.

Наступною відмінністю від постановки задачі з дослідження пружних властивостей є граничні умови, що прикладаються до елементарної комірки. Оскільки елементарна комірка не є індивідуальним тілом у просторі, а її грані жорстко зв'язані із простором, що утворюється лінійним відтворенням геометрії структури вздовж координатних осей, ми маємо виключити зовні деформації у площинах границь репрезентативної комірки. Іншими словами грані елементарного об'єму мають залишатись плоскими і перпендикулярними між собою після деформування. Тому на множину точок N , що належить грані, яка є границею елементарної комірки, накладається

умова однакового переміщення U вздовж осі, що перпендикулярна до цієї грані.

Всі граничні умови, що накладаються на грані елементарної комірки зобразимо у вигляді таблиці (табл.2.4).

Таблиця 2.4

Множина точок	Граничні умови
$N \in XOY$	$U_z = U_{x,y,z}^r = 0$
$N \in YOZ$	$U_x = U_{x,y,z}^r = 0$
$N \in \vec{n}(1,0,0)$	$U_x^{N+1} - U_x^N = 0$
$N \in \vec{n}(0,1,0)$	$U_y = e_y Y$
$N \in \vec{n}(0,0,1)$	$U_z^{N+1} - U_z^N = 0$

Третьою відмінністю при дослідженні пластичної поведінки структури є додаткові параметри матеріалу твердої фази. Очевидно, що для того аби перетворити пружну модель матеріалу на пластичну, необхідно додати критерій переходу від одного стану до іншого. Для моделі Мізеса цим критерієм є межа текучості, точніше критерієм є досягнення інтенсивності дотичних напружень в точці значення межі текучості $\sigma_{0,2}$ для матеріалу твердої фази:

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)} = \sigma_{0,2} \quad (2.9)$$

У якості межі текучості матеріалу твердої фази нами було прийнято величину мікротвердості матеріалу H при індентуванні гомогенного зразка: $\sigma_{0,2} = H = 5,8$ ГПа. [15]

Досліджуваним параметром є значення ефективної межі текучості $\sigma_{0,2}^{eff}$ для структури інверсного опалу. Величина ефективної межі текучості визначається за наступною формулою:

$$\sigma_{0,2}^{eff} = \frac{RF}{A_{\vec{n}(0,1,0)}}, \quad (2.10)$$

де RF – сила, що прикладається до контрольної точки площини, яка здійснює деформування, Н;

$A_{\vec{n}(0,1,0)}$ – площа грані елементарної комірки, до якої прикладається деформуюче зусилля, м².

Значення сили деформування RF отримуємо із чисельного моделювання процесу одновісного навантаження елементарної комірки.

Процес деформування складається із двох етапів моделювання. Перший крок – навантаження (рис.2.6).

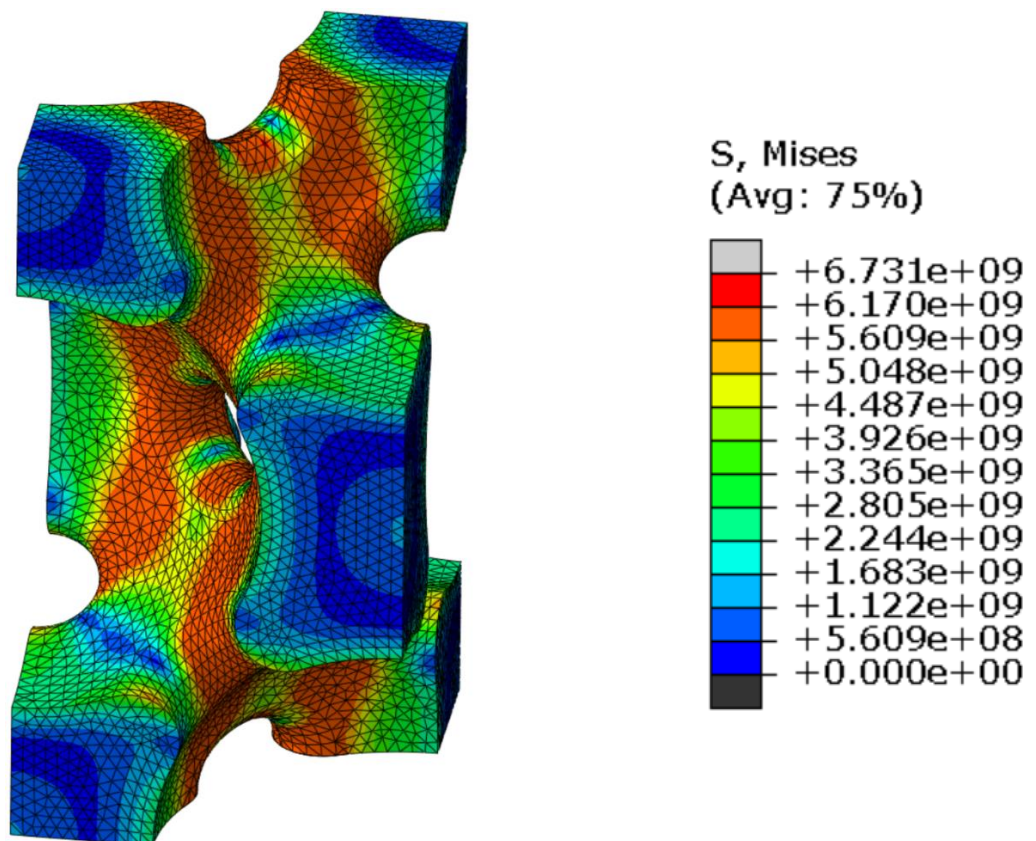


Рис. 2.6 Інтенсивність напружень при дії максимального зусилля деформування, Па

Переміщення U_y грані $\vec{n}(0,1,0)$ відповідає граничній умові:

$$U_y = e_y Y, \quad (2.11)$$

де e_y – ступінь деформації у напрямку вісі Y ;

Y – у нашому випадку лінійний розмір елементарної комірки у напрямку вісі y , або ж висота, м.

Другий крок – розвантаження (рис.2.7). Грань, для якої визначалися умови формулою (2.11), звільняється від граничних умов, таким чином пружна складова деформованого стану зникає і елементарний об'єм розвантажується на величину пружної складової e_y^e .

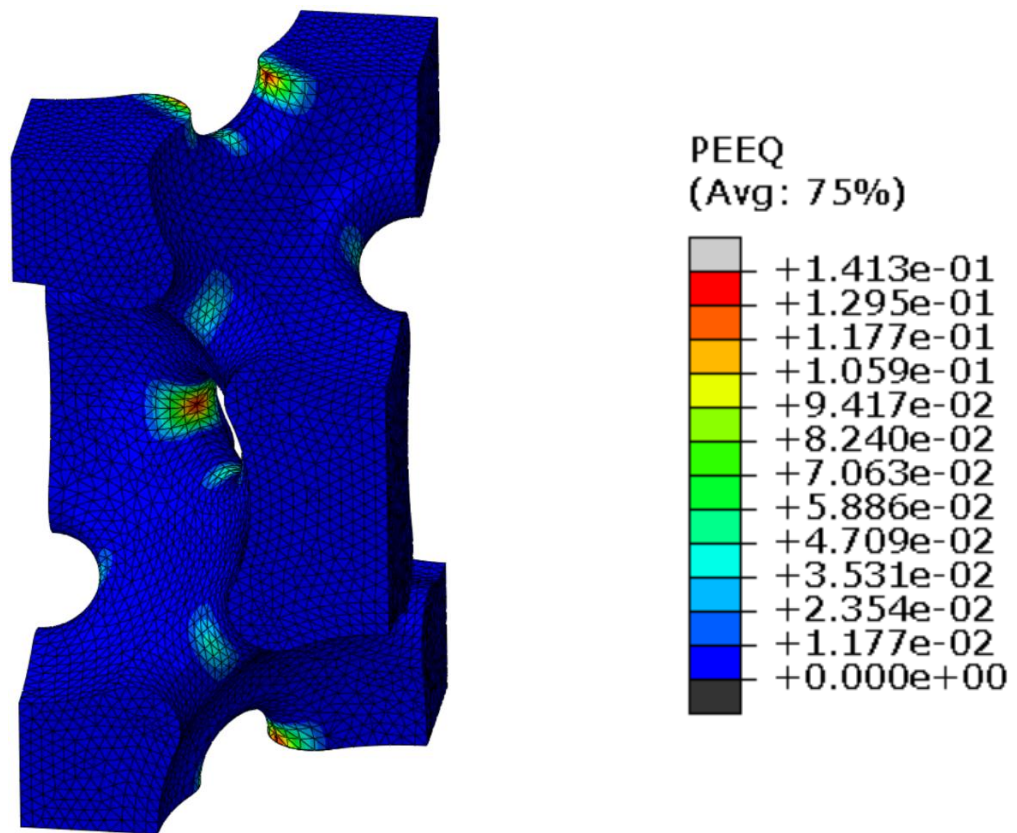


Рис. 2.7 Пластична деформація після розвантаження

Залишкове переміщення U'_y верхньої грані елементарної комірки визначатиме її координату Y' вздовж осі y після розвантаження:

$$Y' = Y - U'_y. \quad (2.12)$$

Ступінь пластичної деформації e_y^p в свою чергу визначається як:

$$e_y^p = \frac{Y - Y'}{Y} * 100\% . \quad (2.13)$$

Тоді, з урахуванням (2.12), цей вираз можна переписати, як:

$$e_y^p = \frac{Y - Y'}{Y} * 100\% = \frac{Y - (Y - U'_y)}{Y} * 100\% = \frac{U'_y}{Y} * 100\% . \quad (2.14)$$

Величина зусилля RF яке відповідає залишковій деформації $e_y^p = 0,2\%$ використовується у формулі (2.10) при знаходженні ефективної межі текучості $\sigma_{0,2}^{eff}$. Для знаходження повного переміщення грані, яке б відповідало залишковій деформації $0,2\%$ ми скористалися ітераційним підходом до визначення U_y . Моделювання проводимо у середовищі ABAQUS/Standard, постановка задачі об'ємна Модель матеріалу закладаємо пружно-пластичною із ізотропною пружністю та ідеально пластичною моделлю Мізеса. До елементарної комірки на відповідні грані прикладаємо граничні умови, що відповідають таблиці 2.4. Використовуємо автоматичне розбиття твердої фази структури на сітку із десятиточкових квадратичних тетраедричних скінченних елементів за типом об'ємного напруження. Обидва кроки моделювання закладаємо із врахуванням нелінійної поведінки геометрії. Результати моделювання та розрахунків показані у таблиці 2.5.

Таблиця 2.5

Структура	Θ , %	$A_{\vec{n}(0,1,0)}$, м ²	RF, Н	$\sigma_{0,2}^{eff}$, МПа
NiIO 260нм	90	28900	$1,33 \times 10^{12}$	50
NiIO 520нм	84	122500	$1,64 \times 10^{13}$	130
NiIO 930нм	90	372100	$1,49 \times 10^{13}$	40
NiIO 470+19нм	65	105625	$6,83 \times 10^{13}$	650
NiIO 495+33нм	57	115600	$1,1 \times 10^{14}$	940

Задля кращого розуміння отриманих результатів, зобразимо ефективну межу текучості, як функцію від пористості (рис. 2.8)

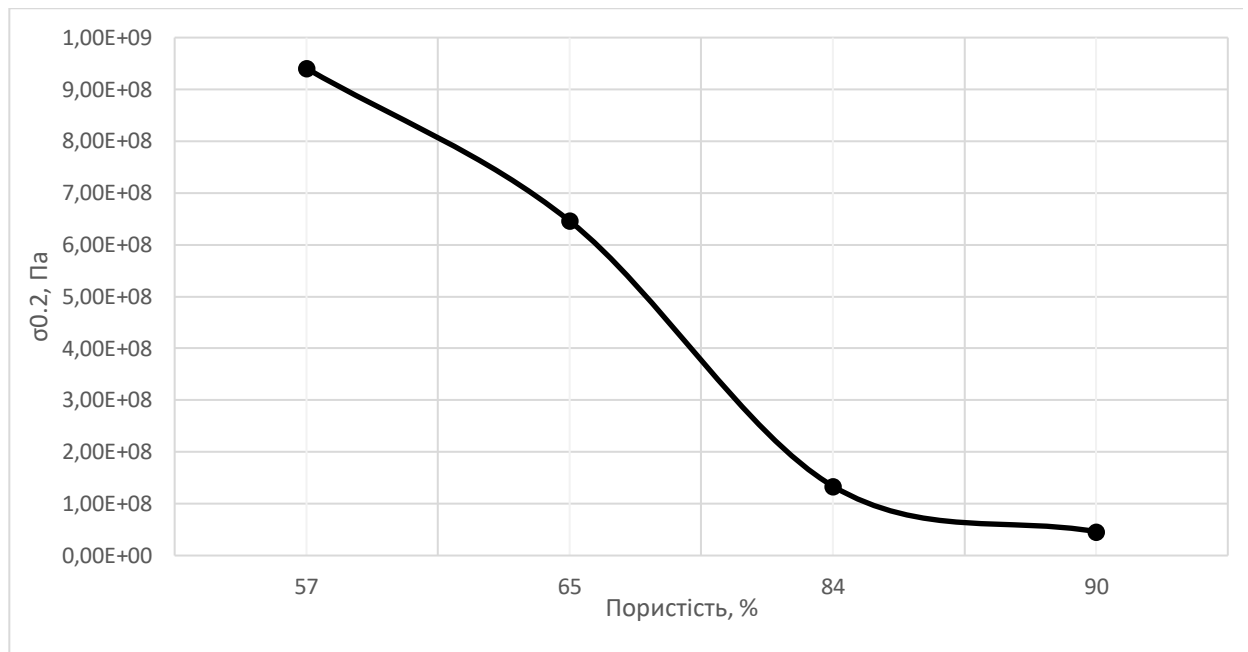


Рис. 2.8 Залежність ефективної межі текучості від пористості структури

Як видно із результатів моделювання зі збільшенням пористості матеріалу, ефективна межа текучості зменшується і, в порівнянні із межею текучості твердої фази, таке зменшення сягає близько двох порядків для величини пористості 90%.

При оцінці характеристик такого класу матеріалів недостатньо говорити лише про абсолютні значення величин тих чи інших механічних властивостей. Важливу роль при закладанні матеріалу у формі елемента конструкції, що експлуатується у певних умовах мають питомі механічні характеристики. Вибір матеріалу для прогресивних сфер застосування, таких як авіація та космос, давно відійшов від понять «найміцніший», «найвитриваліший» і т.д., сьогодні цей процес виражається у компромісах: в'язкість руйнування поступається питанням легкості, питання простоти виготовлення – ефективності застосування. Так, алюмінієві сплави, що мають вдвічі меншу міцність і втричі меншу щільність відносно сталі, майже повністю витіснили останню із конструкції планеру літака. Сьогоднішня тенденція показує, що настала черга компактних матеріалів бути витісненими композиційними матеріалами.

Проведемо порівняльну оцінку матеріалу, що досліджується, за питомими характеристиками міцності та жорсткості. У цьому розділі ми визначили за допомогою чисельних методів аналізу процесу деформування із використанням мультимасштабного підходу величину ефективної межі текучості $\sigma_{0,2}^{eff}$ матеріалу зі структурою інверсного опалу. Оскільки ми використовували модель матеріалу твердої фази без зміцнення, то приймаємо величину ефективної межі текучості у якості характеристики для оцінки міцності такого матеріалу. Оцінку питомої жорсткості матеріалу проводимо за результатами даних, що отримані у розділі 2.1.

Питомі характеристики міцності σ^* та жорсткості E^* за означенням є відношенням абсолютного значення величини, до щільності (густини) матеріалу і визначається за наступними формулами:

$$\sigma^* = \frac{\sigma_{0,2}}{\rho}, \quad (2.15)$$

де $\sigma_{0,2}$ – межа текучості матеріалу, МПа;

ρ – густина матеріалу, г/см³.

$$E^* = \frac{E}{\rho}, \quad (2.16)$$

де E – модуль Юнга, МПа.

Порівняльну оцінку виконаємо із «традиційними» компактними матеріалами машинобудування: сталь AISI 1045H; алюмінієвий сплав 6061 із термообробкою по режиму T6; титановий сплав Ti-6Al-4V. Результати порівняння заносимо до таблиці 2.6.

Отримані результати розрахунку питомих механічних властивостей показали наступні особливості матеріалу зі структурою інверсного опалу:

- 1) матеріал має досить низьку жорсткість – негативні та позитивні наслідки цього явища ми опишемо у наступних розділах;

- 2) матеріал за своєю характеристикою міцності в залежності від пористості здатен конкурувати із «традиційними» матеріалами машинобудування.

Таблиця 2.6

Матеріал	$\theta, \%$	$\rho, \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	$E, \text{ГПа}$	$\sigma_{0,2}, \text{МПа}$	$E^*, \frac{\text{ГПа}}{\text{г/см}^3}$	$\sigma^*, \frac{\text{МПа}}{\text{г/см}^3}$
Електроосаджений нікель	0	8,9	171	5800	19,2	651,7
NiO 260нм	90	0,89	0,84	50	0,94	56,2
NiO 520нм	84	1,424	3,49	130	2,45	91,3
NiO 470+19нм	65	3,115	19	650	6,1	208,7
NiO 495+33нм	57	3,827	29	940	7,58	245,62
Сталь AISI 1045H	0	7,8	200	415	25,64	53,02
6061-T6	0	2,7	69	250	25,55	92,59
Ti-6Al-4V	0	4,42	114	950	25,79	215

Зосередимося на другій складовій результатів визначення питомих механічних властивостей матеріалів, що розглядалися. Як видно із таблиці 2.6 матеріал із пористістю 90% здатен за характеристикою питомої міцності замінити якісні конструкційні сталі, а елемент конструкції виготовлений із такого матеріалу в порівнянні з тією ж сталлю матиме масу у понад вісім разів меншу. Матеріал із пористістю 84% може бути аналогом алюмінієвого сплаву 6061, така заміна може мати вигреш по масі майже у двічі. Титановий сплав Ti-6Al-4V (аналог ВТ6) може бути замінений матеріалом із пористістю 57%, суттєвого вигрешу у масі в такому випадку не спостерігається, проте сам матеріал має межу текучості вищу на 12%.

2.3 Поведінка структури при значних деформаціях.

Дослідження значних деформацій структури диктується необхідністю знаходження критичних значень деформації матеріалу, за якого він вважатиметься зруйнованим або ж викривленим у достатній мірі для того, щоб являти собою іншу структуру, відмінну від тієї, що досліджується.

Критерієм граничного стану деформування нами приймався момент, у який повністю закривався отвір між двома порами, або ж момент контакту двох діагональних вузлів структури, дивлячись, що наступить раніше (рис.2.9).

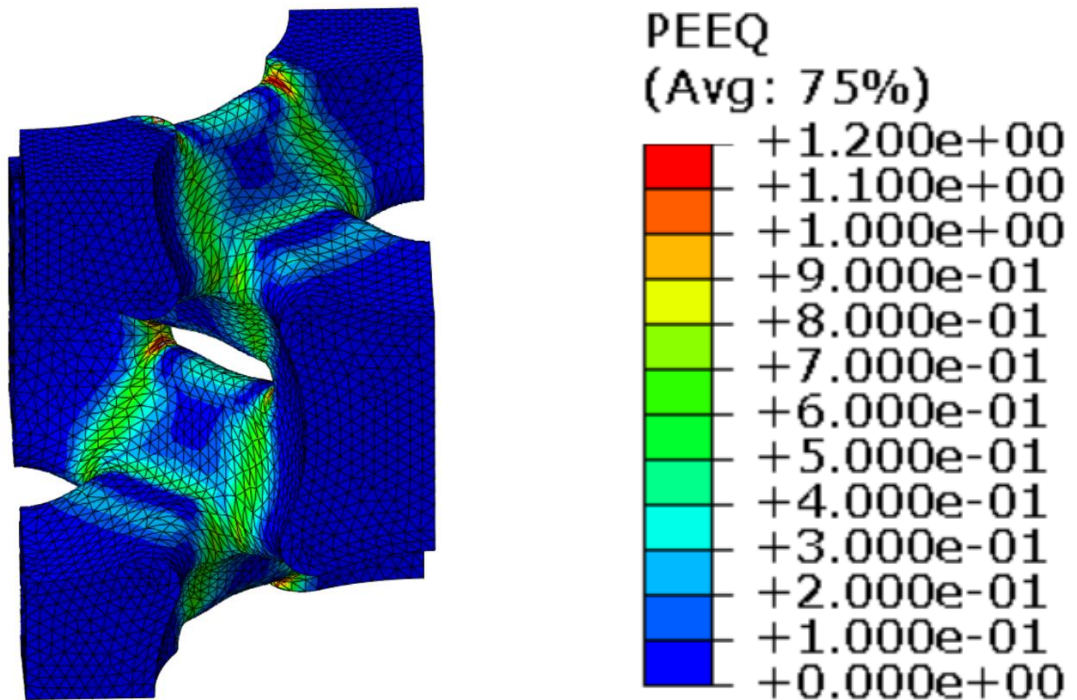


Рис. 2.9 Гранична деформація структури з пористістю 65%.

Для структури інверсного опалу із діаметром пори 470 нм і шаром покриття товщиною 19 нм покажемо залежність ефективного напруження від деформації (рис.2.10). Як видно із графіка, деформування комірки можна розділити на три етапи.

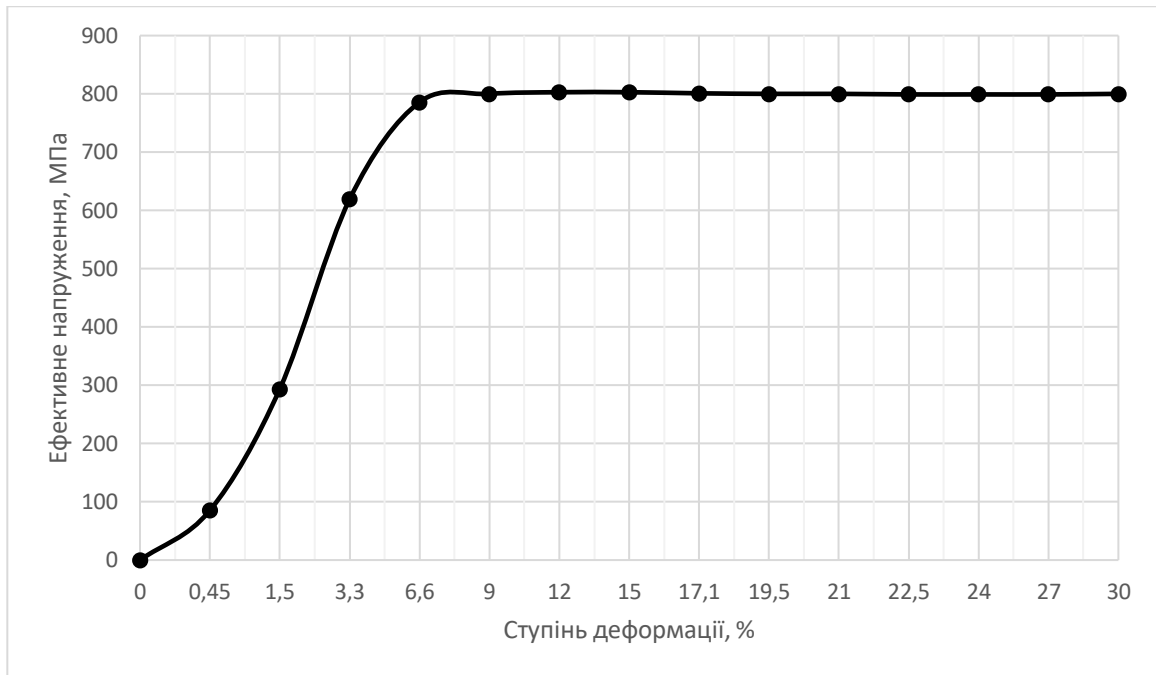


Рис.2.10 Залежність ефективного напруження від ступеня деформації

На першому етапі відбувається пружна осадка комірки, що відповідає деформації 0,45%. Викривлення геометрії структури майже відсутнє, а напруження концентруються у місцях переходу від містків до вузлів структури інверсного опалу(рис.2.11).

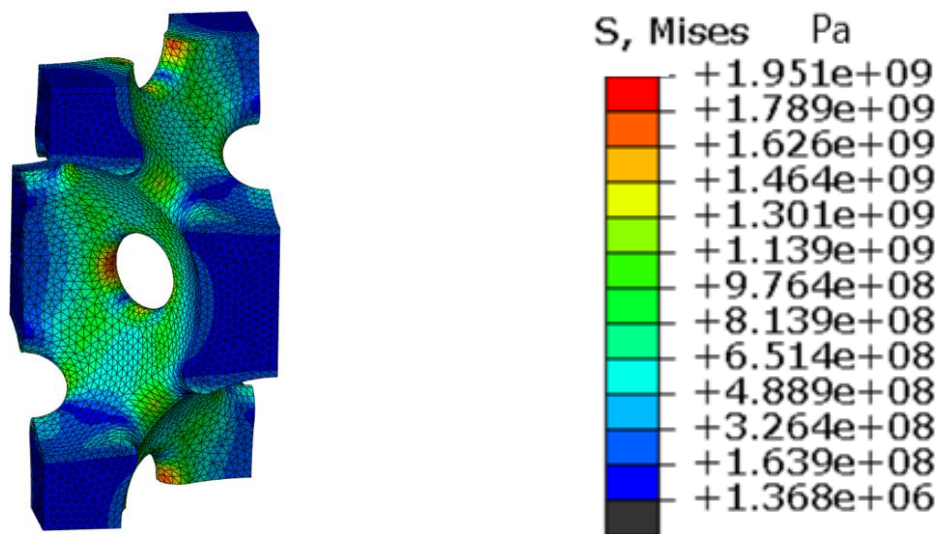


Рис. 2.11 Напруження за Мізесом для ступеню деформації 0,45%, Па

На наступному етапі, що відповідає похилій ділянці відбувається розповсюдження осередку пластичної деформації (рис.2.12) в об'ємі матеріалу твердої фази, саме на цій ділянці знаходиться точка, що відповідає залишковій деформації 0,2%. Для цієї залишкової деформації величина повної деформації складає 3,55%. На цьому етапі відбувається незначне викривлення структури.

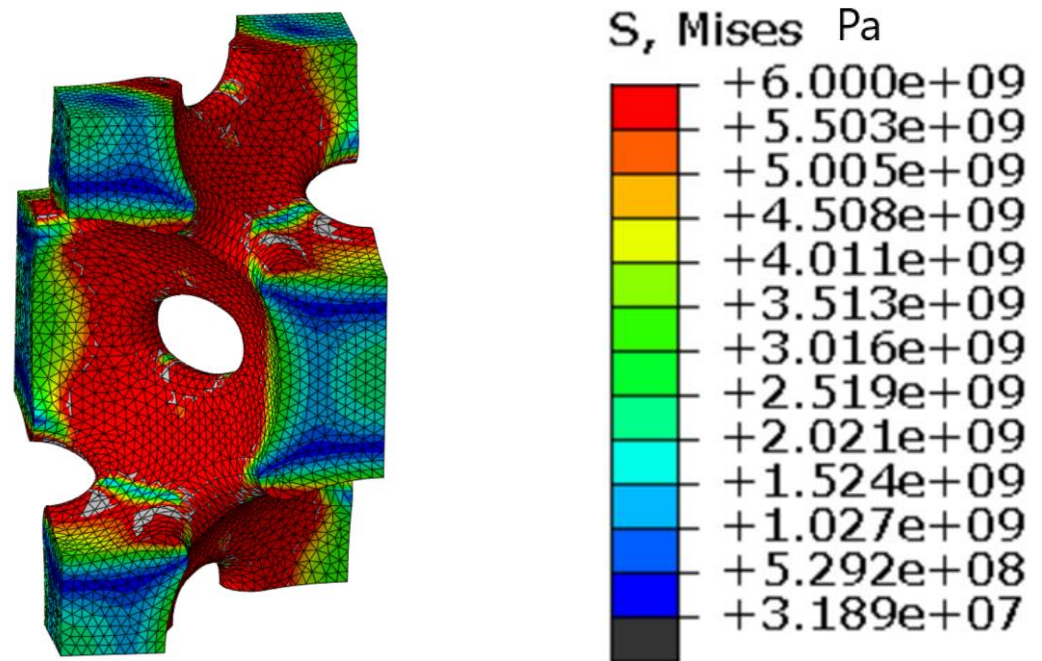


Рис. 2.12 Напруження за Мізесом для ступеню деформації 9%, Па

Третій етап відповідає горизонтальній ділянці графіка – тут геометрія структури зазнає значних викривлень і переважно відбувається згин містків, що з'єднують вузли (рис.2.13).

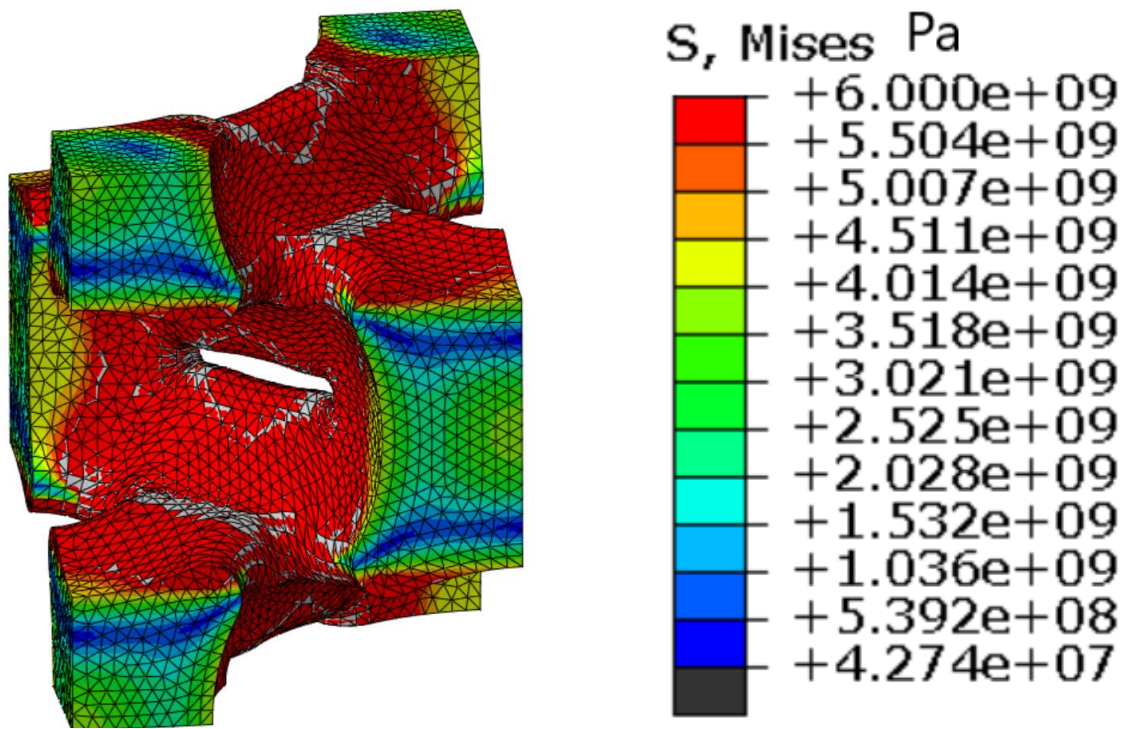


Рис. 2.13 Напруження за Мізесом для ступеню деформації 30%, Па

Дослідження поведінки структури при значних деформаціях дозволяє оцінити технологічні якості матеріалу, які будуть розглянуті у наступних розділах. Ця інформація дає можливість оцінити здатність матеріалу піддаватися традиційним технологічним процесам, або ж прогнозувати застосування спеціальних технологій. Дослідження питання критичного значення набутої деформації також є одним із основних параметрів для відтворення моделі матеріалу у комерційних пакетах прикладних програм.

3 Наноіндентування

3.1 Постановка задачі у вісесиметричній формі.

Наноіндентування – процес дослідження твердості методами вдавлювання індентора у поверхню матеріалу, який застосовується для малих об'ємів.

Для дослідження тонких шарів матеріалу доцільним є використання індентора Берковіча (рис. 3.1, а), що має вид трьохгранної піраміди із кутом між центральною лінією і гранню $65,3^\circ$. Завдяки своїй універсальності (може застосовуватись для гомогенних матеріалів, полімерів, тонких плівок, тестів на подряпину, зношування та в парі із мікроелектромеханічними системами) отримав широке розповсюдження при дослідженні механічних властивостей матеріалів. [26]

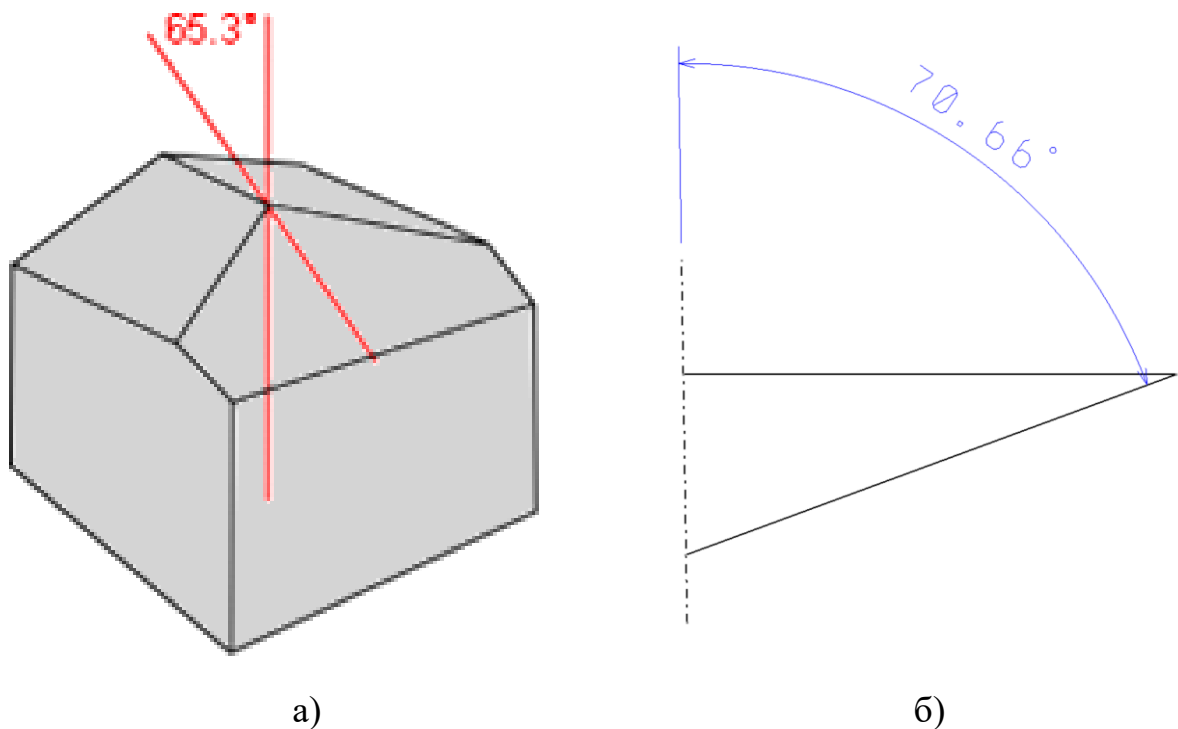


Рис. 3.1 Індентор Берковіча а) та його інтерпретація б) у вісесиметричній формі.

Для раціонального використання ресурсів обчислювальної техніки при постановці аналогу процесу індентування методом скінченних елементів, доцільним буде зведення задачі до вісесиметричної (рис. 3.1, б).

Для приведення задачі до вісесиметричної необхідно забезпечити виконання умови:

$$A_{tip} = A_{cone}, \quad (3.1)$$

де A_{tip} – площа контактуючої поверхні індентора Берковіча;

A_{cone} – площа контакту конуса.

Площа бічної поверхні конуса визначається, як:

$$A_{cone} = \pi * r * l, \quad (3.2)$$

де r – радіус основи, мм;

l – довжина твірної конуса, мм.

Довжина твірної l визначається, із теореми Піфагора наступним чином:

$$l = \sqrt{r^2 + h^2}, \quad (3.3)$$

де h – величина заглиблення індентора, мм.

Із врахуванням рівнянь (3.1), (3.2) і (3.3) можна отримати наступний вираз:

$$A_{tip} = \pi * r * \sqrt{r^2 + h^2}. \quad (3.4)$$

Позбудемося кореня у рівнянні звівши обидві частини до квадрату:

$$A_{tip}^2 = \pi^2 * r^2 * (r^2 + h^2). \quad (3.5)$$

Розкриваємо дужки у виразі (3.5) і переносимо усі параметри в одну частину рівняння:

$$\pi^2 r^4 + \pi^2 h^2 r^2 - A_{tip}^2 = 0. \quad (3.6)$$

Ми отримали рівняння четвертого ступеня, загальний вигляд якого показано нижче:

$$Ax^4 + Bx^3 + Cx^2 + Dx + E = 0. \quad (3.7)$$

Розв'язання рівняння виконуємо за теоремою Феррарі. У нашому випадку:

$$A = \pi^2; \quad (3.8)$$

$$B = 0; \quad (3.9)$$

$$C = \pi^2 h^2; \quad (3.10)$$

$$D = 0; \quad (3.11)$$

$$E = -A_{tip}^2. \quad (3.12)$$

Відповідно до теореми, необхідно визначити три параметри:

$$\alpha = \frac{3B^2}{8A^2} + \frac{C}{A} = \frac{C}{A} = \frac{\pi^2 h^2}{\pi^2} = h^2; \quad (3.13)$$

$$\beta = \frac{B^3}{8A^3} - \frac{BC}{2A^2} + \frac{D}{A} = 0; \quad (3.14)$$

$$\gamma = -\frac{3B^4}{256A^4} + \frac{B^2C}{16A^3} - \frac{BD}{4A^2} + \frac{E}{A} = \frac{E}{A} = -\frac{A_{tip}^2}{\pi^2}. \quad (3.15)$$

Оскільки $\beta = 0$, то $x = u - \frac{B}{4A} \rightarrow x = u$, розв'язуємо квадратне рівняння виду $u^4 + \alpha u^2 + \gamma = 0$:

$$x = \pm_s \sqrt{\frac{-\alpha \pm_t \sqrt{\alpha^2 - 4\gamma}}{2}}. \quad (3.16)$$

Рівняння четвертого ступеню має чотири корені відповідно до комбінації параметрів \pm_t та \pm_s . Для нашого випадку зміст матиме лише той корінь, для якого обидва параметри відповідають знаку «плюс».

На заглибленні $h=5$ мм умовний індентор Берковіча має площу контакту $A_{tip} = 675,89 \text{ мм}^2$. Підставивши значення відповідно до рівнянь (3.13) і (3.15) у рівняння (3.16) отримуємо значення радіуса основи конуса $r = 14,25 \text{ мм}$.

Зручним параметром для масштабування розрахованої геометрії вісесиметричного індентора буде значення половини кута при вершині конуса α , який розраховуємо із наступного виразу:

$$\alpha = \arctg\left(\frac{r}{h}\right) = 70,66^\circ. \quad (3.17)$$

Таким чином, ми привели тривимірну задачу до вісесиметричної постановки, що дозволяє зменшити кількість елементів та змінити їх тип, що призводить до зменшення кількості вузлів по яким ведеться розрахунок. Як наслідок маємо приріст в швидкості обчислення та полегшення процесу постановки чисельного експерименту.

3.2 Визначення параметрів моделі матеріалу.

Для постановки чисельного моделювання процесу наноіндентування нами було обрано модель матеріалу, відмінну від моделі пластичності Мізеса. Для оцінки твердості високопористого матеріалу зі структурою інверсного опалу ми використали модель крихкої піни Дешпанда-Флека. Для опису поведінки матеріалу під навантаженням для цієї моделі використовуються три параметри: пластичний коефіцієнт Пуассона, відношення нормального напруження при одновісному стиску до напруження гідростатичного стиску та ефективну межу текучості матеріалу. [27] Два перших параметри взаємно пов'язані між собою, що буде доведено нижче, а третій параметр був отриманий нами у розділі 2.2.

У цьому підрозділі розглянуто два підходи із визначення параметрів для постановки чисельного експерименту з наноіндентування, з використанням моделі крихкої піни Дешпанда-Флека. Одним із підходів є теоретичний метод, суть якого подана нижче.

Нехай існує деякий потенціал Φ , який є функцією напруженого стану і має свій еквівалент $\tilde{\Phi}$ у p - τ площині:

$$\Phi(\sigma_{ij}) = \tilde{\Phi}(p(\sigma_{ij}), \tau(\sigma_{ij})), \quad (3.18)$$

де $p(\sigma_{ij})$ – середнє напруження, МПа;

$\tau(\sigma_{ij})$ – інтенсивність дотичних напружень, МПа.

Потенціал Φ визначає деформований стан і для нього є справедливим вираз:

$$e_{ij} = \lambda \frac{d\phi}{d\sigma_i}, \quad (3.19)$$

де λ – деякий коефіцієнт.

У p - τ площині значення $p(\sigma_{ij})$ і $\tau(\sigma_{ij})$ розраховуються за формулами (3.20) і (3.21) відповідно:

$$p = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3}; \quad (3.20)$$

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)}. \quad (3.21)$$

Виходячи із (3.19) можна записати нормальну деформацію e і зсувну деформацію γ , як:

$$e = \lambda \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial p}; \quad (3.22)$$

$$\gamma = \lambda \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tau}. \quad (3.23)$$

Або ж:

$$e = e_{11} + e_{22} + e_{33}; \quad (3.24)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{(e_{11} - e_{22})^2 + (e_{22} - e_{33})^2 + (e_{33} - e_{11})^2 + 6(e_{12}^2 + e_{23}^2 + e_{31}^2)}. \quad (3.25)$$

Для зменшення кількості позначень при теоретичному розгляді моделі Дешпанда-Флека, вносимо наступні рівності:

$$p = -p; \quad (3.26)$$

$$q = \sqrt{\frac{3}{2}} \tau. \quad (3.27)$$

Тоді поверхня навантаження, прийнята у моделі крихкої піни із ізотропним зміцненням, з урахуванням (3.26) і (3.27):

$$G = \frac{3}{2} \tau^2 + \beta^2 p^2. \quad (3.28)$$

Тоді, відповідно до (3.31) і (3.32) деформація визначатиметься:

$$e = \lambda \frac{\partial G}{\partial p} = 2\beta^2 \lambda p; \quad (3.29)$$

$$\gamma = 3\lambda \tau. \quad (3.30)$$

Звідки напруження можна виразити, як:

$$p = \frac{e}{2\beta^2 \lambda}; \quad (3.31)$$

$$\tau = \frac{\gamma}{3\lambda}. \quad (3.32)$$

Прийнята для моделі Дешпанда-Флека поверхня текучості:

$$F(p, \tau) = \frac{3}{2} \tau^2 + \alpha^2 p^2 - B^2 = 0. \quad (3.33)$$

Перенесемо параметр В у праву частину:

$$\frac{3}{2} \tau^2 + \alpha^2 p^2 = B^2. \quad (3.34)$$

Напруження, записуємо через деформації, відповідно до (3.31) і (3.32):

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\gamma}{3\lambda} \right)^2 + \alpha^2 \left(\frac{e}{2\beta^2\lambda} \right)^2 = B^2. \quad (3.35)$$

Виразимо коефіцієнт λ , як функцію від деформацій:

$$\lambda = \lambda(e, \gamma). \quad (3.36)$$

Із (3.45) виносимо за дужки параметр λ :

$$\frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{\gamma^2}{6} + \frac{\alpha^2 e^2}{4\beta^2} \right) = B^2. \quad (3.37)$$

Позбуваємося квадрата у знаменнику:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{B}{\sqrt{\frac{\gamma^2}{6} + \frac{\alpha^2 e^2}{4\beta^2}}}. \quad (3.38)$$

Тоді, відповідно до (3.41) і (3.42), з урахуванням (3.48), напруження можна записати, як:

$$p = \frac{e}{2\beta^2\lambda} = \frac{e * B}{2\beta^2 \sqrt{\frac{\gamma^2}{6} + \frac{\alpha^2 e^2}{4\beta^2}}}; \quad (3.39)$$

$$\tau = \frac{\gamma}{3\lambda} = \frac{\gamma * B}{3 \sqrt{\frac{\gamma^2}{6} + \frac{\alpha^2 e^2}{4\beta^2}}}. \quad (3.40)$$

А їхнє співвідношення:

$$\frac{p}{\tau} = \frac{e * 3}{2\beta^2\gamma} = \frac{3}{2\beta^2} \frac{e}{\gamma}. \quad (3.41)$$

Для одновісного навантаження напруження мають вид:

$$p = \frac{-\sigma}{3}; \quad \tau = \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{2\sigma^2} = \sqrt{\frac{2}{3}}\sigma; \quad (3.42)$$

$$\frac{p}{\tau} = -\frac{1}{3}\sqrt{\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{6}}. \quad (3.43)$$

Тензор напружень записується, як:

$$\tilde{\sigma} = \begin{pmatrix} -\sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

У свою чергу, тензор деформацій має вигляд:

$$\tilde{e} = \begin{pmatrix} -e & 0 & 0 \\ 0 & +\nu_p e & 0 \\ 0 & 0 & +\nu_p e \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

де ν_p – пластичний коефіцієнт Пуассона.

Із (3.45) виразимо нормальну і зсувну деформацію відповідно до формул (3.24) і (3.25):

$$e = 2\nu_p e - e = e(2\nu_p - 1) = -e(1 - 2\nu_p); \quad (3.46)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{2(1 + \nu_p)^2 e^2} = \sqrt{\frac{2}{3}}(1 + \nu_p)e. \quad (3.47)$$

Прирівняємо (3.43) із (3.41) записавши замість деформацій e і γ отриманні значення у (3.46) і (3.47):

$$-\frac{1}{\sqrt{6}} = \frac{3}{2\beta^2} \frac{-(1 - 2\nu_p)}{\sqrt{\frac{2}{3}}(1 + \nu_p)}. \quad (3.48)$$

Виразимо звідси коефіцієнт β :

$$\beta^2 = \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} * \sqrt{2} * \sqrt{3} * \frac{1 - 2\nu_p}{1 + \nu_p} = \frac{9(1 - 2\nu_p)}{2(1 + \nu_p)}. \quad (3.49)$$

Позбуваємося квадрату:

$$\beta = \frac{3}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1 - 2\nu_p}{1 + \nu_p}}. \quad (3.50)$$

Для поверхні навантаження, враховуючи (3.42):

$$F(p, \tau) = 0; \quad (3.51)$$

$$\frac{3}{2} \left(\frac{2}{3} (\sigma_c^0)^2 \right) + \alpha^2 \frac{(\sigma_c^0)^2}{9} = B^2 = (\sigma_c^0)^2 \left(1 + \left(\frac{\alpha}{3} \right)^2 \right) = (\sigma_c^0)^2 \left(1 + \frac{\alpha^2}{9} \right), \quad (3.52)$$

де, σ_c^0 – напруження при одновісному стиску, МПа.

При гідростатичному стиску напруження мають вид:

$$p = p_c^0; \quad \tau = 0, \quad (3.53)$$

де p_c^0 – гідростатичне напруження, МПа.

Із (3.33) та (3.52) отримуємо рівність:

$$\alpha^2 (p_c^0)^2 = (\sigma_c^0)^2 \left(1 + \left(\frac{\alpha}{3} \right)^2 \right). \quad (3.54)$$

Знайдемо значення параметру α . Для цього введемо константу $k = \frac{\sigma_c^0}{p_c^0}$.

Тоді, із (3.54) можна отримати вираз:

$$\left(\frac{\sigma_c^0}{p_c^0} \right)^2 = \frac{\alpha^2}{1 + \left(\frac{\alpha}{3} \right)^2} = k^2 = \frac{9\alpha^2}{9 + \alpha^2}. \quad (3.55)$$

Звідки:

$$(9 + \alpha^2)k^2 = 9\alpha^2 \rightarrow \alpha^2(9 - k^2) = 9k^2; \quad (3.56)$$

$$\alpha^2 = \frac{3k}{\sqrt{9 - k^2}}. \quad (3.57)$$

Для асоційованого закону пластичної течії буде справедливою наступна рівність :

$$\alpha = \beta. \quad (3.58)$$

Відповідно до (3.50), підставляючи замість β вираз у правій частині:

$$\alpha = \frac{3}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1 - 2\nu_p}{1 + \nu_p}}. \quad (3.59)$$

Позбуваємося кореня:

$$\alpha^2 = \frac{9(1 - 2\nu_p)}{2(1 + \nu_p)}. \quad (3.60)$$

Виразимо ν через параметр α :

$$\frac{(1 - 2\nu_p)}{(1 + \nu_p)} = \frac{9}{2\alpha^2}; \quad (3.61)$$

$$\frac{2(1 + \nu_p)}{1 - 2\nu_p} = \frac{9}{\alpha^2}; \quad (3.62)$$

$$2 + 2\nu_p = \left(\frac{9}{\alpha^2}\right) - 2\nu_p \left(\frac{9}{\alpha^2}\right); \quad (3.63)$$

$$2\nu_p \left(1 + \frac{9}{\alpha^2}\right) = \frac{9}{\alpha^2} - 2; \quad (3.64)$$

$$\nu_p = \frac{\frac{9}{\alpha^2} - 2}{2\left(1 + \frac{9}{\alpha^2}\right)} = \frac{\frac{1}{2}\left(\frac{9}{\alpha^2}\right) - 1}{1 + \frac{9}{\alpha^2}}. \quad (3.65)$$

Отже, пластичний коефіцієнт Пуассона для асоційованого закону пластичної течії у моделі крихкої піни Дешпанда-Флека може бути визначений за наступною формулою:

$$\nu_p = \frac{\frac{1}{2} - \left(\frac{\alpha}{3}\right)^2}{1 + \left(\frac{\alpha}{3}\right)^2}. \quad (3.66)$$

Параметри α і β визначаються зі спеціалізованих експериментів, на спеціальних установках. [27] Для того, щоб визначити пластичний коефіцієнт Пуассона, не витрачаючи ресурси на високовартісні експерименти, можна звернутися до результатів моделювання на елементарній комірці, що висвітленні у розділі 2.2. При переміщенні верхньої грані елементарної комірки, що має форму паралелепіпеда, вниз – бічні грані рухаються у напрямку додатного переміщення вздовж координатних осей, яким вони перпендикулярні (рис.3.2).

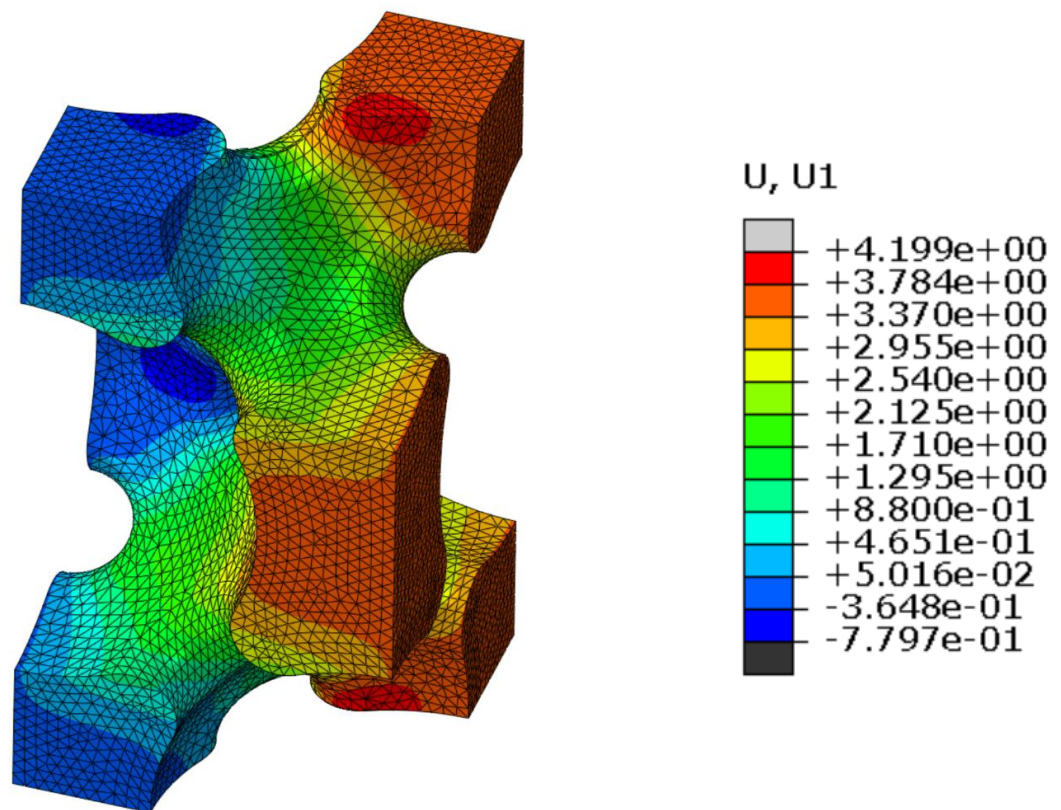


Рис. 3.2 Переміщення точок структури інверсного опалу при дії одновісного напруження вздовж осі x, мм

Відношення переміщення бічної грані після розвантаження до переміщення верхньої грані після розвантаження визначатиме пластичний

коефіцієнт Пуассона. Таким чином пластичний коефіцієнт Пуассона може бути розрахований, як:

$$\nu_p = \frac{U_{y2}}{U_{z3}}, \quad (3.67)$$

де U_{y2} – переміщення грані паралелепіпеда, що перпендикулярна до вісі Y, після розвантаження елементарної комірки, вздовж осі Y;

U_{z3} – переміщення грані паралелепіпеда, що перпендикулярна до осі Z, після розвантаження елементарної комірки, вздовж осі Z.

Наступним параметром, що визначає поведінку матеріалу за моделлю крихкої піни Дешпанда-Флека є параметр k . Він вже розглядався раніше і за означенням є відношенням нормального напруження при одновісному стиску σ_c^0 до гідростатичного напруження p_c^0 :

$$k = \frac{\sigma_c^0}{p_c^0} \quad (3.68)$$

Його можна визначити скориставшись формулами (3.65), (3.59) і (3.55). Після перетворень отримуємо вираз $k(\nu_p)$:

$$k = \sqrt{3(1 - 2\nu_p)} \quad (3.69)$$

Таким чином ми визначили два параметри моделі крихкої піни Дешпанда-Флека, а отже можемо перейти до моделювання вдавлювання індентора.

Зведемо ці параметри до спільної таблиці (табл.3.1), значення ефективної межі текучості для кожної структури, що досліджується беремо із розділу 2.2.

Таблиця 3.1

Структура	Θ , %	$\sigma_{0,2}^{eff}$, МПа	ν_p	k
NiIO 260нм	90	50	0,213	1,314
NiIO 520нм	84	130	0,23	1,275
NiIO 930нм	90	40	0,184	1,378
NiIO 470+19нм	65	650	0,151	1,448
NiIO 495+33нм	57	940	0,132	1,487

Як видно з таблиці 3.1 зі збільшенням частки матеріалу твердої фази у об'ємі простору матеріалу (зменшення пористості), що досліджується, величина пластичного коефіцієнта Пуассона зменшується, а відношення нормального напруження при одновісному навантаженні до гідростатичного зростає.

3.3 Моделювання наноіндентування МСЕ.

Визначивши параметри моделі крихкої піни Дешпанда-Флека для структури інверсного опалу, переходимо до моделювання процесу вдавлювання конічного індентора у поверхню матеріалу за допомогою прикладного пакету ABAQUS/Standard. Оскільки процес будується у виді вісесиметричної моделі виконуємо розбиття тіла матеріалу, що досліджується, на скінченні елементи виду чотирьохточкових білінійних вісесиметричних чотирикутників. Тіло індентора зображаємо у вигляді одновимірної дискретно жорсткої вісесиметричної геометрії із величиною половини кута вершини конуса $\alpha = 70,66^\circ$ (рис.3.3).

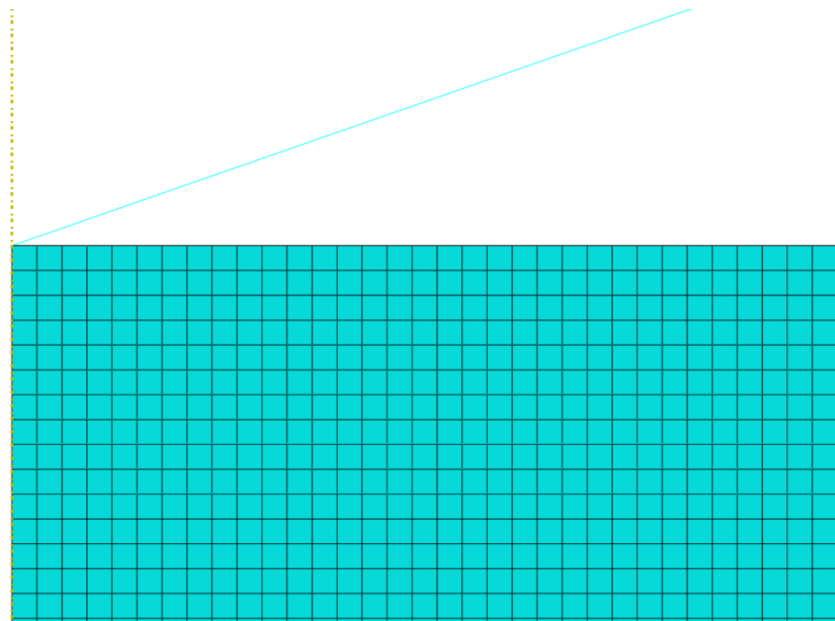


Рис. 3.3 Сітка скінченних елементів для процесу наноіндентування

Із умов задачі відомо, що сітка зазнаватиме значних деформацій, тому необхідно внести додаткові параметри перебудови сітки скінченних елементів. Перебудову сітки здійснюємо за розширеним алгоритмом, що базується на геометрії, що змінюється. Закладаємо модель перебудови за об'ємом із довільними початковими кутами і кутами переміщення, а частоту задаємо три перебудови на кожен ітерацію розрахунку.

При моделюванні процесу індентування матеріалів нашою шуканою величиною є параметр мікротвердості H , який визначається за наступною формулою:

$$H = \frac{RF}{A_{cont}}, \quad (3.70)$$

де RF – сила, що прикладається у напрямку осі індентора, Н;

A_{cont} – площа проекції поверхні контакту на площину перпендикулярну осі симетрії, м².

Проекція зони контакту на площину представляє собою круг, площа якого визначається, як:

$$A_{cont} = \pi r(h)^2, \quad (3.71)$$

де $r(h)$ - радіус круга в залежності від глибини заглиблення h , м.

Радіус круга визначається, як:

$$r(h) = h * \tan \theta = h * \tan(70,66^\circ) = 2,85h \quad (3.72)$$

Величину сили RF отримуємо із чисельного експерименту із наноіндентування матеріалу, а переміщення закладаємо при постановці експерименту.

Результати моделювання процесу наноіндентування матеріалу зі структурою інверсного опалу (рис. 3.4) заносимо до таблиці 3.2

Таблиця 3.2

Структура	Θ , %	A_{cont} , м ²	RF , МН	H , МПа
NiO 260нм	90	1,02	63,2	38,06
NiO 520нм	84	1,02	121	118
NiO 470+19нм	65	0,984	547	556
NiO 495+33нм	57	0,964	767	796

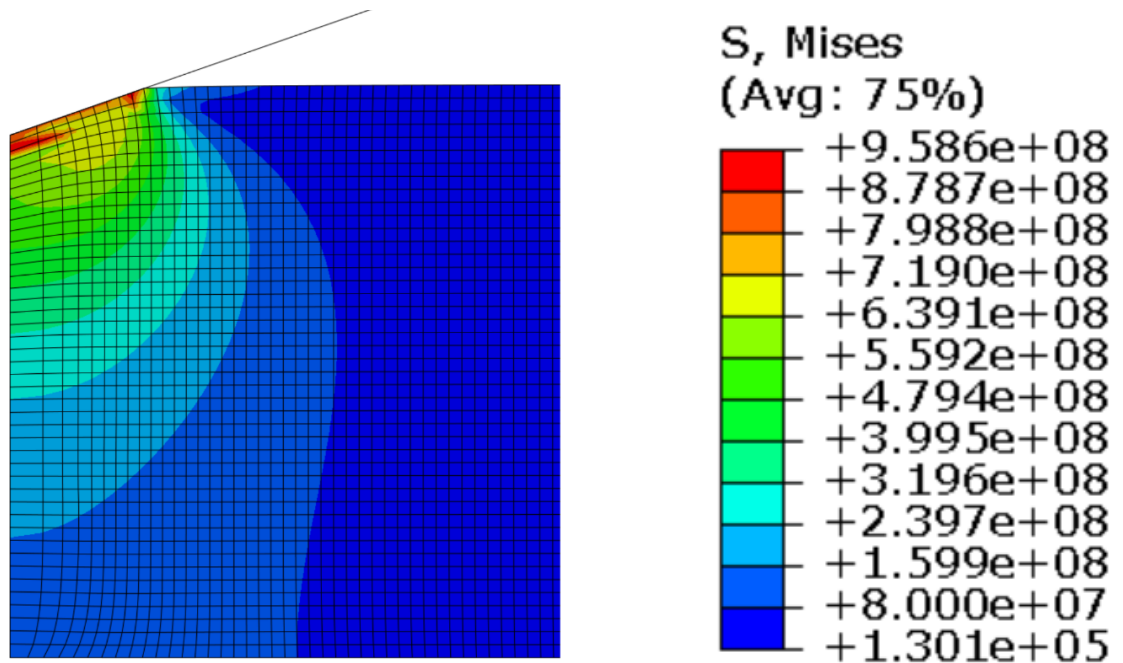


Рис. 3.4 Розподіл напружень у матеріалі в кінці інденування

Як видно із результатів чисельного експерименту зі збільшенням об'ємної доли матеріалу твердої фази в матеріалі, зростає величина параметру мікротвердості. На рис.3.4 показано залежність між величиною пористості і твердості матеріалу.

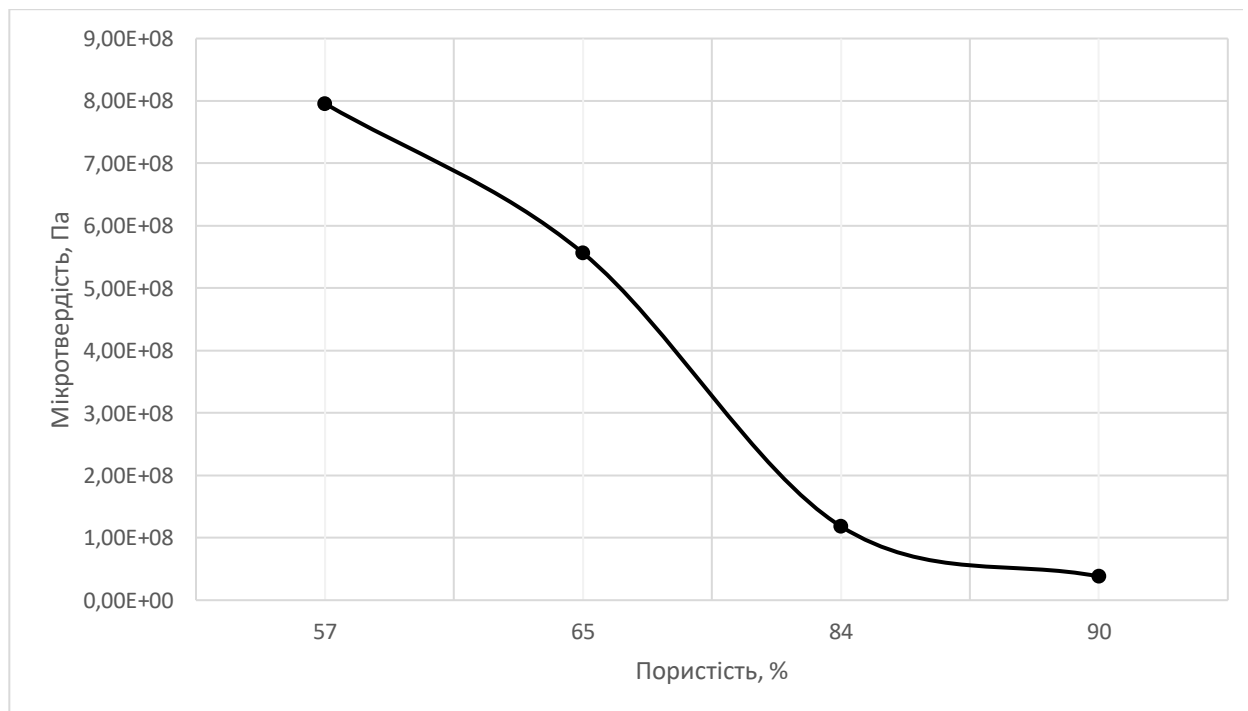


Рис. 3.5 Залежність між твердістю матеріалу і пористістю структури

Знайдемо величину номінальної твердості.

Номінальна (відносна) твердість H_N визначається як відношення твердості матеріалу H до ефективної межі текучості $\sigma_{0,2}^{eff}$:

$$H_N = \frac{H}{\sigma_{0,2}^{eff}}. \quad (3.73)$$

Значення твердості беремо із таблиці 3.2, а значення межі текучості із таблиці 2.5. Як видно із означення, величина відносної твердості пов'язує між собою значення твердості і межі текучості. Отже, визначивши величину мікротвердості матеріалу за допомогою стандартизованого тесту на вдавлювання індентора ми можемо отримувати інформацію стосовно межі текучості структури. Результати розрахунку зобразимо у вигляді графіка (рис.3.5).

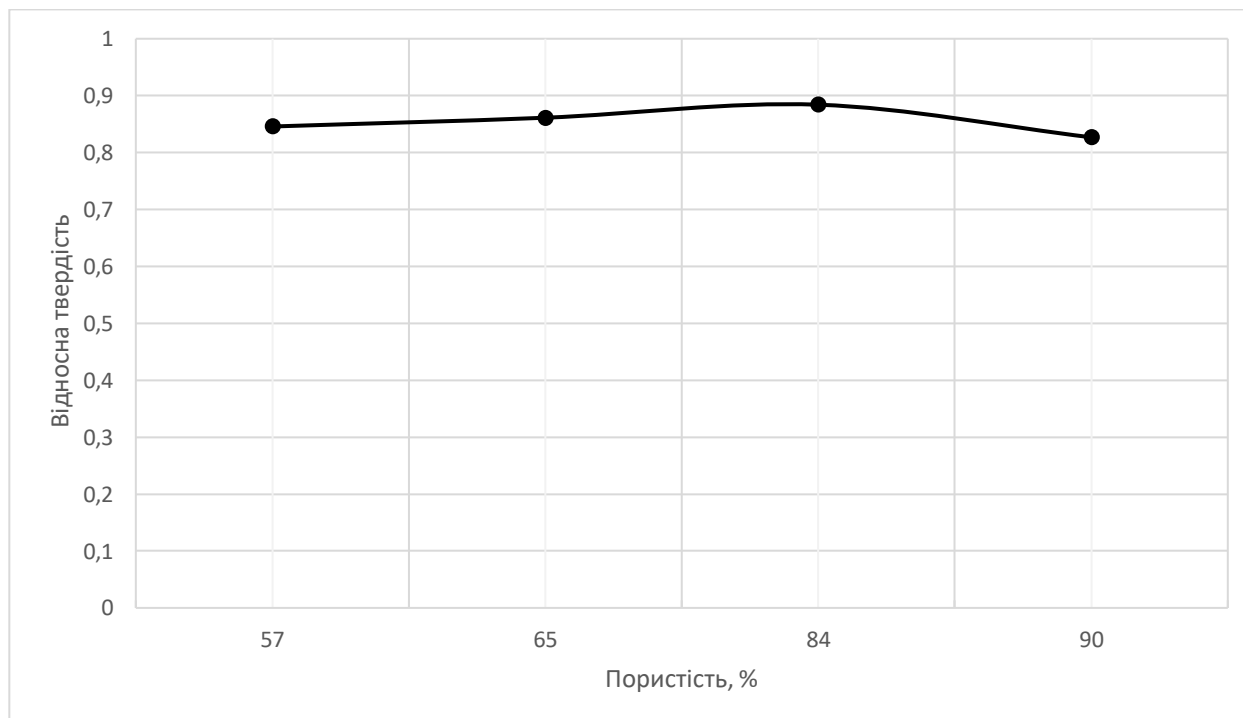


Рис. 3.6 Залежність відносної твердості матеріалу від пористості

Як показує результат розрахунку, значення відносної твердості матеріалу знаходиться в межах 0,8 – 0,9. Це означає, що в середньому значення

мікротвердості на 15% поступається величині межі текучості структури інверсного опалу.

Відповідно до отриманих значень, пластичного коефіцієнта Пуассона та відношення нормального напруження при одновісному навантаженні до гідростатичного, з урахуванням формули (3.33) ми маємо змогу побудувати поверхні текучості для структур, що досліджувалися.

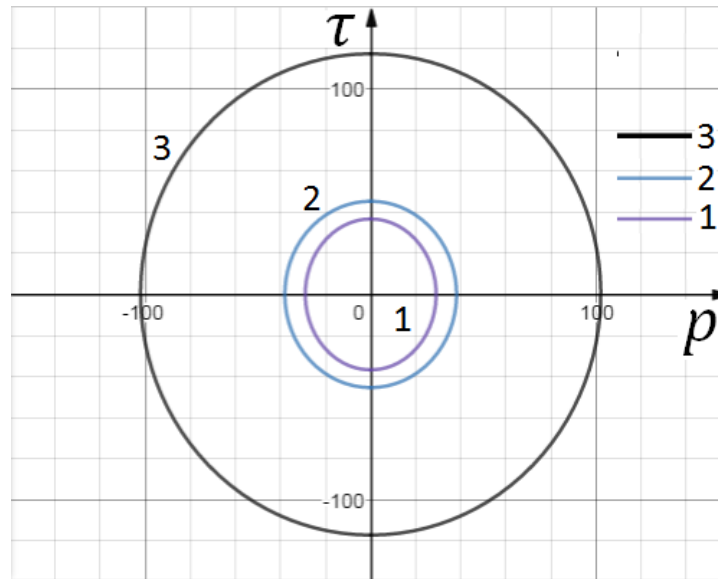


Рис. 3.7 Поверхні текучості для структур без додаткового шару покриття:
1 – Ni IO 260 нм; 2 - Ni IO 930 нм; 3 - Ni IO 520 нм

На рис. 3.3 показано поверхні текучості для структур, що не мають додаткового шару покриття. Як видно із графіку, для високої пористості матеріалу характерна низька чутливість до схеми напруженого стану, що може пояснюватися відносно низькою стійкістю структури до значних деформацій.

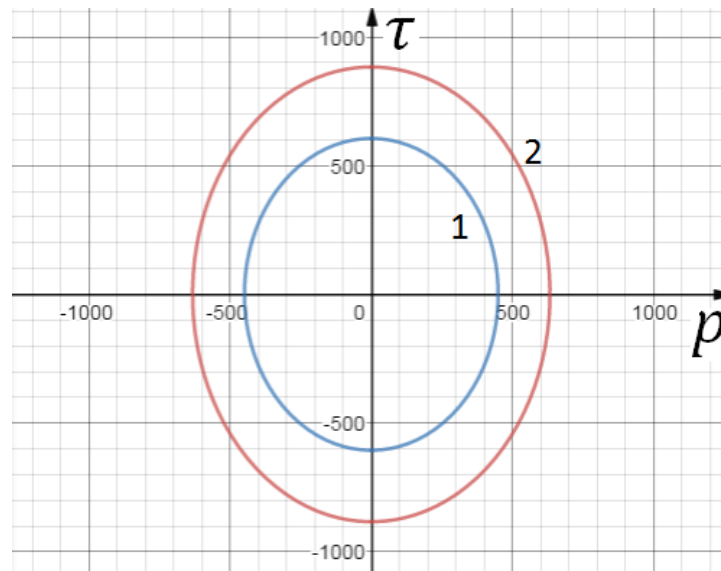


Рис. 3.8 Поверхні текучості для структур, що мають додатковий шар покриття: 1 - Ni IO 470+19 нм; 2 - Ni IO 495+33 нм.

Еліпсоїди напружень для структур із додатковим шаром покриття, що показані на рисунку 3.4 відображають значну відмінність такого класу матеріалів від компактних, оскільки більша піввісь еліпсоїда належить зсувному зусиллю. Це відбувається через збільшений опір деформації зсуву, оскільки містки між вузлами починають працювати на згин, і таким чином «зміщують» максимальні напруження до вузлів, розвантажуючи вузькі місця.

Відповідно до цих поверхонь існує їхня аналітична форма, яка виражається наступною формулою:

$$3(1 - 2\nu_p)p^2 + (1 + \nu_p)\tau^2 = (\sigma_c^0)^2 \quad (3.74)$$

Таким чином, провівши експеримент із наноіндентування метаматеріалу із регулярною структурою та визначивши параметри моделі Дешпанда-Флека ми отримали математичну модель, яка дозволяє прогнозувати межу текучості матеріалу для будь-яких схем напруженого стану та знайшли кореляцію між твердістю такого матеріалу, та його межею текучості, що дозволяє нам відносно простим способом визначити механічні властивості матеріалу, що досліджується.

4 Порівняння отриманих результатів

Як було вказано раніше, структура інверсного опалу мало вивчена у контексті механічних властивостей до теперішнього часу. Високопористі тіла, губки та інші тривимірні наноструктурні матеріали широко вивчаються різними групами вчених у великій кількості наукових установ. [28] Проте велике різноманіття форм внутрішньої будови композитів не може бути узагальнене до невеликого числа груп матеріалів в першу чергу через критичні відмінності у поведінці кожної структури під навантаженням. Тому у якості опорного дослідження, ми використовували одну із нещодавніх закордонних праць із вивчення механічних властивостей структури інверсного опалу на основі нікелю.

У аналогічній роботі команди вчених під керівництвом Д. Пікуля [15] наявні суттєві відмінності в першу чергу у визначенні властивостей матеріалу твердої фази. Продемонстрований підхід засновується на проведенні експерименту зі стискання мікростержня (рис. 4.1) із якого формується уявлення про гіпотетичну межу текучості матеріалу.

Мікростержневі зразки були підготовлені із використанням сфокусованого FEI Helios Nanolab 600i іонного променя. Кільцеве фрезерування в три етапи із використанням струмів силою 21 нА, 2,5 нА та 80 пкА призвело до отримання циліндричних зразків діаметром $\approx 3,6$ мкм і висотою ≈ 8 мкм. Завершальне кільцеве фрезерування шириною 100 нм полегшило підбір висоти мікростержнів і зменшило їхню конусність до менше ніж двох градусів відносно вертикалі. Установка Agilent G200 Nanoindenter із плоским алмазним пуансоном діаметром 10 мкм стискала мікростержні із середньою швидкістю деформації 10^{-4}с^{-1} . Наноіндентер продеформував мікростержні на величину деформації у 20%. Вимірювання за допомогою електронного мікроскопа діаметра та висоти мікростержня у його центрі дозволили отримати інформацію про напружено-деформований стан. Напруження при величині деформації 0,2% були прийняті у якості межі

текучості, що на нашу думку не є адекватною оцінкою межі текучості, адже існує суттєва відмінність між набутою та залишковою деформацією. Модуль пружності при розвантаженні і навантаженні був скорегований відповідно до товщини зразка за методологією, що описана у роботі [29].

Однією із основних відмінностей у постановці аналогу цього експерименту у чисельному виді у цій роботі є те, що коефіцієнт Пуассона приймався рівним нулю. Не зважаючи на те, що у деяких роботах такий підхід вважається виправданим [17], [30], ми не знайшли перешкод у застосуванні розрахункового коефіцієнта Пуассона як для експериментів із визначення межі текучості, так і в постановці чисельного аналогу процесу наноіндентування.

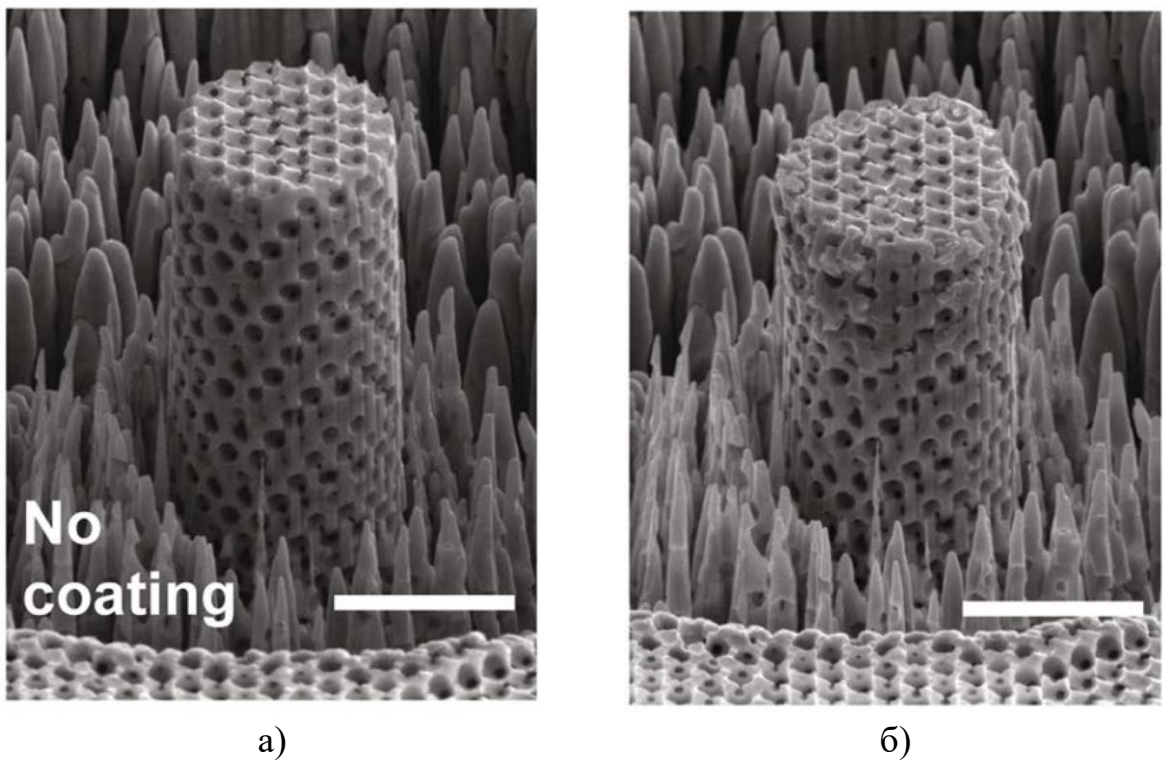


Рис.4.1 Експеримент зі стискання мікростержня: а) до деформування; б) після деформування. [15]

В результаті проведення експерименту були отримані результати, що занесені до таблиці 4.1. Поряд із цими результатами покажемо отримані нами результати теоретичного розрахунку.

Таблиця 4.1

Джерело	Експеримент із мікростержнем			Результати МСЕ		
Парам. Струк.	$\sigma_{0,2}^{Ni}$, ГПа	$\sigma_{0,2}^{eff}$, ГПа	E^{eff} , ГПа	$\sigma_{0,2}^{Ni}$, ГПа	$\sigma_{0,2}^{eff}$, ГПа	E^{eff} , ГПа
NiO 260нм	8,07	0,19	17	5,8	0,05	0,84
NiO 520нм	5,61	0,27	29	5,8	0,13	3,49
NiO 470+19нм	3,86	0,61	70	5,8	0,65	19
NiO 495+33нм	4,07	0,88	95	5,8	0,94	29

Як видно із таблиці 4.1 отримані значення у експерименті зі стискання мікростержня суттєво відрізняються від результатів чисельного розрахунку. Відмінність полягає у декількох факторах. По-перше – рівність величини пористості структури не забезпечує ідентичності у її геометрії. Так, для оцінки подібності структури ми можемо скористуватися параметром ефективного діаметра стержня в структурі, який можемо визначити із наступної формули:

$$d^{eff} = \sqrt{\frac{4A_{cs}}{\pi}}, \quad (4.1)$$

де d^{eff} – ефективний діаметр стержня, нм;

A_{cs} – площа найменшого поперечного перерізу містка, що з'єднує два вузли, нм².

Величина площі поперечного перерізу визначається безпосередньо із тривимірної моделі структури (рис.4.1). На рис. 4.1 показаний (зеленим кольором) поперечний переріз найвужчої частини містка структури, що відповідає розміру пори 260 нм. Подібним чином замірявши поперечні перерізи для всіх структур і підставивши ці значення у формулу 4.1 ми можемо визначити ефективні діаметри стержнів для порівняння структур між собою.

Отримані результати заносимо до таблиці 4.2.

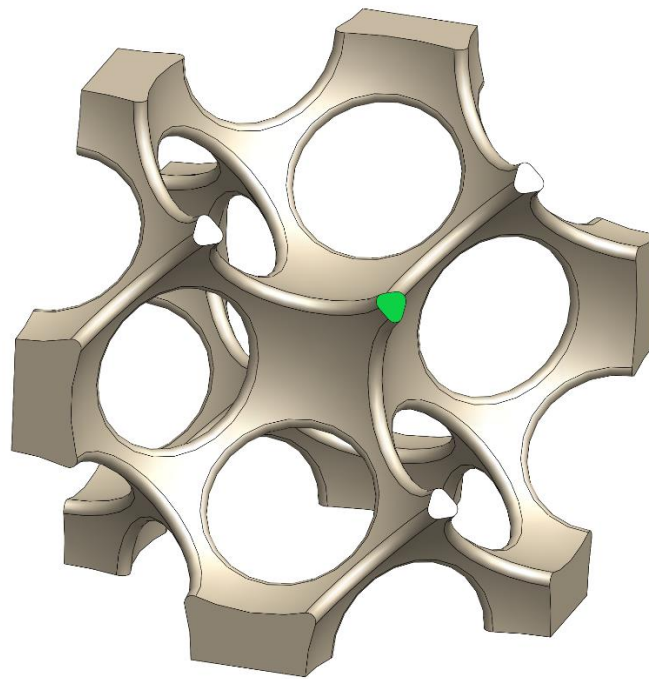


Рис. 4.1 Поперечний переріз містка

Для порівняння до таблиці вносимо також значення ефективного діаметра, яке наведено у статті [15]. Розрахунки відповідно до формули (4.1) заносимо до правої колонки.

Таблиця 4.2

Структура	θ , %	d^{eff} , нм (експ.)	d^{eff} , нм (розрах.)
NiO 260нм	90	16	20,67
NiO 520нм	84	51	70,51
NiO 470+19нм	65	83	124,9
NiO 495+33нм	57	115	153,74

Як видно із цього співставлення значень ефективного діаметра, вважати ідентичними ці структури з точки зору геометрії неможливо, адже у деяких випадках різниця сягає близько 30%.

Другою відмінністю, що впливає із таблиці 4.1 є змінна величина межі текучості матеріалу твердої фази. Так, у роботі [15] величина межі текучості залежить від розміру містка, що з'єднує вузли структури, який виражається через ефективний діаметр, про який ми згадали раніше. Зі зменшенням останнього величина межі текучості для матеріалу твердої фази зростає – ця залежність справедлива для структури, що не має додаткового шару покриття. У випадку, коли на структуру наноситься додатковий шар покриття ситуація змінюється. Для того, щоб краще зрозуміти суть нашої гіпотези доречним буде звернутися до ілюстрації (рис.4.2).

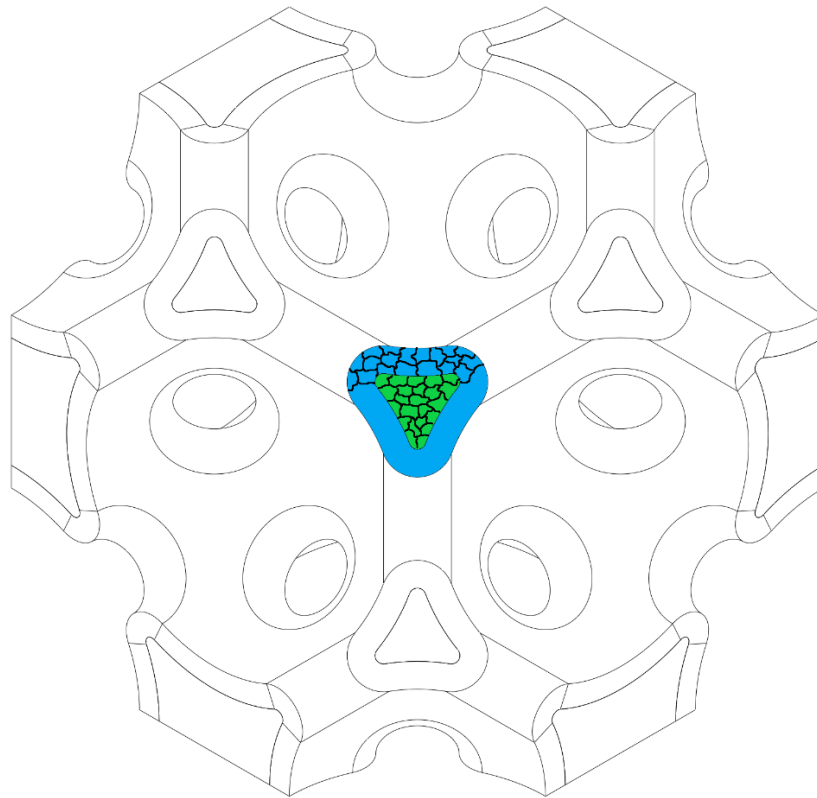


Рис. 4.2 Полікристалічна будова структури інверсного опалу

На рисунку 4.2 умовно показана кристалічна будова структури інверсного опалу у перерізі де діють максимальні напруження. Як ми зазначали у попередніх розділах розмір зерна для процесу електроосадження нікелю складає близько 15 нм. Тому для структури із додатковим шаром

покриття (позначено синім кольором на рис. 4.2) товщиною 33 нм кількість зерен по товщині цього покриття складає близько двох одиниць. Зменшення доступного простору для утворення зерен і їхнє безпосереднє зменшення дозволяє значно збільшити межу текучості полікристалічного зразка за рахунок утворення кристалів із внутрішньою будовою, що близька до ідеальної. Теоретично ідеально впорядкована структура інверсного опалу із пористістю у 70% і величиною ефективного діаметра містка менше 10 нм може досягати міцності у 10,5 ГПа, що в перерахунку може дати питому міцність близько 520 МПа/(г/см³). [31]

5 Оцінка потенційних областей застосування структури

Будь-яке проектування матеріалу базується на його потенційній області застосування. Саме умови експлуатації визначають властивості композиту, що будуть закладатися у якості цільових на етапі дослідження можливих варіантів внутрішньої геометрії, або ж структури матеріалу.

Спираючись на отримані нами дані про механічні властивості та особливості геометрії структури матеріалу ми можемо говорити про вірогідні області застосування. Однією із таких областей може бути медицина. На нашу думку використання матеріалу високої пористості із відкритою коміркою можливе для виготовлення фіксуєчих елементів при лікуванні переломів кісток. Так, елемент, що зображений на рис. 5.1 може слугувати фрагментом кістки, що був роздроблений і не підлягає відновленню.

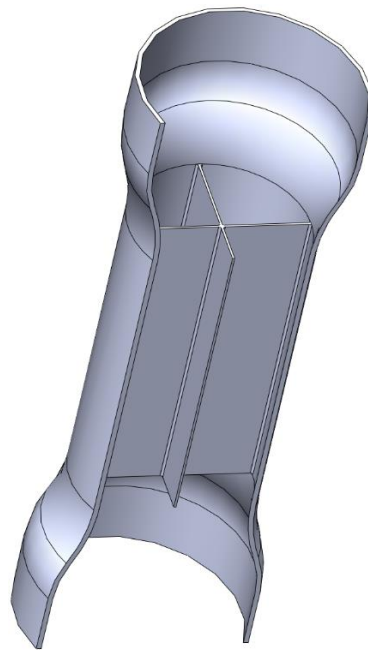


Рис. 5.1 Замінник фрагменту кістки у розрізі

Суть такого застосування полягає у тому, що область, що потребує заміни, очищується від уламків старої кістки, потім два кінці кістки, фрагмент між якими був видалений, з'єднуються між собою трубкою, що показана на

рис. 5.1 в області більшого діаметра. Такий спосіб з'єднання має характерну особливість - можливість проникнення кісткових тканин, що утворюються, у структуру матеріалу, тим самим утворюючи єдине ціле. Такий підхід до лікування переломів кісток зробить можливим однократне хірургічне втручання – для встановлення імпланту, а його видалення не матиме необхідності, адже він стане єдиною частиною із кісткою. Звичайно, що матеріал твердої фази в такому випадку має бути обраний в першу чергу керуючись питаннями біологічної інертності. Титан у випадку структури із пористістю 70% в ідеальних умовах утворення зерна теоретично матиме питому міцність $1463 \text{ МПа}/(\text{г}/\text{см}^3)$, так як його межа текучості складатиме близько 15 ГПа. [32]

Одним із потенційних застосувань матеріалу зі структурою інверсного опалу може бути обшивка панелей крила змінної форми (англ. «morphing wing»), один із проектів якого зображений на рис. 5.2. [33] Низька жорсткість матеріалу в поєднанні із високою межею текучості дозволить реалізовувати значне викривлення поверхні без накопичення пластичної деформації (рис. 5.3).



Рис. 5.2 Концепт аеродинамічного профілю змінної форми [33]

Підібравши оптимальне співвідношення міцності і жорсткості при використанні обшивки із метаматеріалу зі структурою інверсного опалу

можна досягти мінімальних енергозатрат на пружне деформування в поєднанні із високою витривалістю панелі. Не останнє місце в такому застосуванні відіграють високі питомі властивості, адже застосування цього матеріалу також дає вигреш у масі вдвічі у порівнянні із алюмінієм.

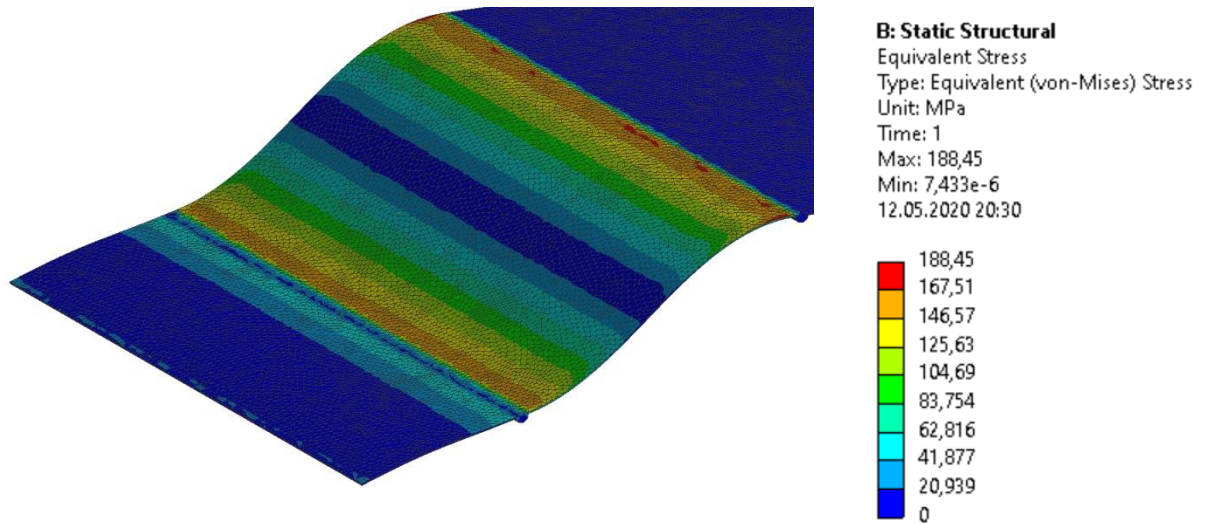


Рис. 5.3 Вигин панелі обшивки поліморфного крила

Особливості технологічних властивостей такого матеріалу потребують подальших досліджень, проте вже зараз можна говорити про граничні деформації у межах 30%, а технологічні процеси вимагатимуть застосування нестандартних методів серед яких вакуумне формування, або формування еластичним середовищем.

Висновки

Підсумовуючи результати проведеного дослідження можна зробити ряд висновків, які викладемо нижче.

1. В результаті виконання роботи вдалося досягти поставлених цілей із питань розроблення методології дослідження метаматеріалу зі структурою інверсного опалу. Дисертація описує чіткий алгоритм дій, що необхідно виконати, щоб пройти шлях від властивостей матеріалу твердої фази до ефективних властивостей гетерогенного матеріалу. У процесі проведення досліджень вдалося вирішити ряд практичних питань із застосування прикладного пакету програм при проведенні чисельних експериментів. До таких питань належить перебудова сітки скінченних елементів при моделюванні процесу наноіндентування, а також питання накладання граничних умов на грані елементарної комірки при проведенні чисельного експерименту із визначення текучості матеріалу.
2. До наукових досягнень роботи слід віднести детальний розгляд питання деформування структури, як для області малих так і для значних деформацій. Робота наводить значення критичної границі деформування елементарного об'єму матеріалу, що досліджується, що для групи досліджень, які проводилися протягом останніх років, є новизною. Ще одним якісним показником, який виокремлює роботу з-поміж аналогів, є детальний теоретичний огляд моделі матеріалу, що використовується для моделювання процесу наноіндентування та прогнозування характеристик структури для різних типів напруженого стану.
3. Робота звертає увагу на технологію отримання матеріалу у більш практичному ключі, аніж це подавалося у попередніх роботах. Було проаналізовано характеристики процесів та варіації форм напівфабрикатів, що можуть виготовлятися за існуючими технологіями. Значною відмінністю є розгляд матеріалу за межами лабораторного

зразка, у контексті потенційних областей застосування як конструкційного так і функціонального характеру.

4. Однією із переваг дослідження, що описується в цій роботі є точніший підхід до постановки чисельних аналогів експериментів. У постановці експерименту із наноіндентування кут при вершині конуса розраховувався аналітично, без припущень, узагальнень або спрощень і на відміну від деяких робіт-аналогів при постановці експерименту закладався розрахунковий коефіцієнт Пуассона, а не прирівнювалося його значення до нуля. Значною відмінністю у побудові геометрії є врахування капілярного ефекту при утворенні шийок під час спікання пластикових сфер при проектування геометрії структури інверсного опалу.

5. Окрім зазначених переваг робота має ряд суттєвих недоліків в порівнянні із закордонними працями. Намагання позбутися необхідності проведення натурних експериментів призвело до того, що характеристика матеріалу твердої фази в залежності від геометрії структури, залишалась постійною, хоча експериментальні дані говорять про зворотнє. Звідси випливає ще одна проблема проведеного дослідження – відсутність апробації розрахункових даних експериментальними. Порівняння із експериментами, що мали суттєво відмінну геометрію носить досить умовний характер і може використовуватися лише задля якісної оцінки отриманих результатів.

На підставі наведених висновків надамо рекомендації щодо подальшого розвитку дослідження. Перш за все необхідно відтворити адекватну модель зміцнення матеріалу твердої фази в результаті утворення ідеалізованої кристалічної структури у процесі електроосадження. Для цього необхідно відійти від моделі пластичності Мізеса та перейти на модель деформації полікристалічного тіла з урахуванням розмірів та геометрії структури. По-друге для того щоб перетворити розроблену методику на абсолютно теоретичну необхідно позбутися визначення межі текучості

матеріалу твердої фази з експерименту із заміру твердості гомогенного зразка. Оскільки модель Шеррера, що використовується у згаданих закордонних наукових працях, для прогнозування розміру зерна при визначенні твердості полікристалічного тіла, дає дещо завищені результати – на нашу думку варто звернутись до моделі Вільямсона-Холла, таким чином врахувавши розміри часток і мікронапруження у кристалі.

Наступним кроком є моделювання покриття як окремого тіла, що зв'язане внутрішньою поверхнею із зовнішньою поверхнею основи, що дозволить використовувати незалежні розміри зерна у моделі полікристалу, а власне зв'язок теж буде придатним до опису однією із аналітичних моделей.

Одним із важливих питань подальшого розвитку дослідження є використання моделі матеріалу для постановки процесу наноіндентування, що враховує зміну геометрії і пористості структури. Попри всю зручність одопараметричної моделі крихкої піни при постановці експерименту та визначенні параметрів, вона не дає достатньо адекватних параметрів для оцінки поведінки матеріалу при значних пластичних деформаціях.

Отже, у підсумку, із врахуванням всього, що було зазначено вище можна дійти висновку, що робота потребує значного доопрацювання у питанні визначення властивостей матеріалу твердої фази а також моделі матеріалу для процесу індентування. Подальший розвиток методології дослідження високопористих матеріалів зі структурою інверсного опалу за допомогою чисельних методів можливий тільки після вирішення згаданих питань.

Список використаних джерел

- [1] R. E. Hummel, *Understanding Materials Science History, Properties, Applications*, 2 ред., New York: NY: Springer-Verlag New York, LLC, 2005.
- [2] M. Fazeli, J. P. Florez та R. A. Simão, «Improvement in adhesion of cellulose fibers to the thermoplastic starch matrix by plasma treatment modification,» *Composites Part B: Engineering.*, p. 207–216, 2019.
- [3] C. Buzea, I. Pacheco та K. Robbie, «Nanomaterials and Nanoparticles: Sources and Toxicity,» *Biointerphases 2:4, MR17-MR71*, 2007.
- [4] J.-M. Lourtioz, H. Benisty, V. Berger, J.-M. Gerard, D. Maystre та A. Tchelnokov, *Photonic Crystals: Towards Nanoscale Photonic Devices*, Springer, 2005.
- [5] M. Adhikary, R. U. Cornelis, A. M. Harteveld, D. A. Grishina та W. L. Vos, «Experimental probe of a complete 3D photonic band gap,» *Opt. Express 28*, pp. 2683-2698, 2020.
- [6] A. T. L. Tan, S. Nagelberg, E. Chang-Davidson, J. Tan, J. K. W. Yang, M. Kolle та A. J. Hart, «In-Plane Direct-Write Assembly of Iridescent Colloidal Crystals,» *Small*, т. 16, № 4, 2020.
- [7] L. J. Torres, A. Margaronis, B. M., B. Meinhardt, L. Granzow, O. B. Ayyub та P. Kofinas, «Rapid and Tunable Method To Fabricate Angle-Independent and Transferable Structurally Colored Films,» *Langmuir*, pp. 1252-1257, 2020.

- [8] В. Слюсар, «Метаматериалы в антенной технике: история и основные принципы,» *Электроника: Наука, Технология, Бизнес*, т. 7, pp. 70-79, 2009.
- [9] В. Слюсар, «Метаматериалы в антенной технике: основные принципы и результаты,» *Первая миля. Last Mile (Приложение к журналу «Электроника: Наука, Технология, Бизнес»)*, т. 3, pp. 44-60, 2010.
- [10] В. М. Агранович та Ю. М. Гартштейн, «Пространственная дисперсия и отрицательное преломление света,» *УФН*, pp. 1051-1068, 2006.
- [11] В. Г. Веселаго, «Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ϵ и μ ,» *Успехи физических наук*, т. 92, pp. 517-526, 1967.
- [12] Д. В. Сивухин, *Оптика и спектроскопия*, т. 3, 1957, p. 308.
- [13] В. Е. Парфомов, *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*, 1959, 1957, 1956.
- [14] J. J. Rosario, J. B. Berger, E. T. Lilleodden, R. M. McMeeking та G. A. Schneider, «The stiffness and strength of metamaterials based on the inverse opal architecture,» *Extreme Mechanics Letters*, т. 12, pp. 86-96, 2016.
- [15] J. H. Pikul, S. Özerinç, B. Liu, R. Zhang, P. V. Braun, V. S. Deshpande та W. P. King, «High strength metallic wood from nanostructured nickel inverse opal materials,» *Scientific Reports*, 2019.
- [16] J. Biener, A. M. Hodge та A. V. Hamza, «Microscopic failure behavior of nanoporous gold,» *Applied Physics Letters*, 2005.

- [17] J. Biener, A. M. Hodge, A. V. Hamza, L. M. Hsiung та J. H. Satcher, «Nanoporous Au: A high yield strength material,» *Journal of Applied Physics*, 2005.
- [18] J. H. Pikul, J. Liu, P. V. Braun та W. P. King, «Integration of high capacity materials into interdigitated mesostructured electrodes for high energy and high power density primary microbatteries,» *Journal of Power Sources*, № 315, p. 308–315, 2016.
- [19] B. Hatton, L. Mishchenko, S. Davis, K. H. Sandhage та J. Aizenberg, «Assembly of large-area, highly ordered, crack-free inverse opal films,» *Proceedings of the National Academy of Sciences*, т. 23, № 107, pp. 10354-10359, 2010.
- [20] H. Berger, S. Kari, U. Gabbert, R. Rodriguez-Ramos, R. Guinovart, J. A. Otero та J. Bravo-Castillero, «An analytical and numerical approach for calculating effective material coefficients of piezoelectric fiber composites,» *International Journal of Solids and Structures*, т. 42, pp. 5692-5714, 2005.
- [21] M. Silani, S. Ziaei-Rad, H. Talebi та T. Rabczuk, «A semi-concurrent multiscale approach for modeling damage in nanocomposites,» *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, № 74, p. 30–38, 2014.
- [22] Y. Pan, L. Iorga та A. A. Pelegri, «Analysis of 3D random chopped fiber reinforced composites using FEM and random sequential adsorption,» *Computational Materials Science*, № 43(3), p. 450–461, 2008.

- [23] Н. Бахвалов та Г. Панасенко, Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов, Москва: Наука, 1984.
- [24] Б. Победря, Механика композиционных материалов, Москва: Изд-во Моск. ун-та., 1984.
- [25] Х. Хан, Теория упругости. Основы линейной теории и её применения. Пер. с нем., Москва: Мир, 1988.
- [26] «Nanoindenter Tips,» SURFACE systems + technology GmbH & Co. KG, [Онлайновый]. Available: <https://www.surface-tec.com/nanotips.php>. [Дата звернення: 24 березня 2020].
- [27] V. S. Deshpande та N. A. Fleck, «Isotropic Constitutive Model for Metallic Foams,» *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, № 48, pp. 1253-1283, 2000.
- [28] L. J. Gibson та M. F. Ashby, Cellular Solids: Structure and Properties, Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [29] H. Fei, A. Abraham, N. Chawla та H. Jiang, «Evaluation of Micro-Pillar Compression Tests for Accurate Determination of Elastic-Plastic Constitutive Relations.,» *Journal of Applied Mechanics*, т. 6, № 79, 2012.
- [30] A. M. Hodge, J. Biener, J. R. Hayes, P. M. Bythrow, C. A. Volkert та A. V. Hamza, «Scaling equation for yield strength of nanoporous open-cell foams.,» *Acta Materialia*, т. 4, № 55, p. 1343–1349, 2007.
- [31] L. Yue-Lin, Z. Ying, Z. Hong-Bo, L. Guang-Hong та K. Masanori, «Theoretical strength and charge redistribution of fcc Ni in

tension and shear,» *Journal of Physics: Condensed Matter*, т. 20, № 335216, 2008.

[32] Y. Song, R. Yang, D. Li та Z. Guo, «A first-principles study of the theoretical strength and bulk modulus of hcp metals.,» *Philosophical Magazine*, № 81, pp. 321-330, 2001.

[33] «Shape Adaptation,» Laboratory of Composite Materials and Adaptive Structures, [Онлайновый]. Available: <https://structures.ethz.ch/research/sa.html>. [Дата звернення: березень 2020].