УДК 539.4:661.657.5

В. Т. Головчан (г. Киев)

О прочности поликристаллов плотных модификаций нитрида бора

Изложен аналитический алгоритм для вычисления напряжений в зернах поликристаллов плотных модификаций нитрида бора. Установленные связи между пределами прочности при растяжении и сжатии основаны на гипотезе разрушения Гриффитса для двухосного напряженного состояния. Учтено влияние на прочность вюртцитного нитрида бора технологических остаточных термических напряжений, которые формируются в его зернах при спекании на стадии охлаждения из-за анизотропии теплового расширения.

Ключевые слова*: аналитический алгоритм, поликристалл, кубический нитрид бора, вюртцитный нитрид бора, прочность при растяжении, прочность при сжатии.*

Введение. Проведение стандартных механических испытаний на одноосное растяжение или сжатие таких хрупких сверхтвердых материалов как поликристаллы плотных модификаций нитрида бора из-за высокой стоимости подготовки лабораторных образцов представляет сложную техническую проблему. Используемое в настоящее время диаметральное сжатие круглых дисков для измерения прочности сверхтвердых материалов является, по существу, специальным методом механических испытаний (как, например, поперечный изгиб). При таком нагружении в диске реализуется сложное неоднородное напряженное состояние, что делает весьма условным сравнение результатов измерения с прочностью исследуемого сверхтвердого материала при растяжении. На практике применяется также простейший способ оценки прочности по разрушающей нагрузке в условиях статического сжатия небольших частиц, полученных из массивного продукта дроблением [1].

Цель настоящей статьи состоит в разработке аналитического алгоритма для определения соотношения между пределами прочности поликристаллов плотных модификаций нитрида бора при одноосном сжатии и растяжении. Основой данного алгоритма является решение соответствующей модельной задачи для поликристаллического материала.

Решение модельной задачи. Пусть рассматриваемый анизотропный поликристалл находится в условиях однородного напряженного состояния с напряжениями p_{ik}. Для определения средних по объему зерна микронапряжений σ_{ik} воспользуемся расчетной схемой метода самосогласованного поля [2]. Рассмотрим бесконечную область, которая состоит из подобластей $r \le R$ и $r \ge R$, где R — средний радиус кристаллита и r — радиальная координата сферической системы (r, θ, φ). Свойства макроскопически изотропного материала в области $r \ge R$ определяются упругими модулями сдвига μ, всестороннего сжатия K и коэффициентом линейного теплового расширения α. Аналогичные свойства анизотропного кристаллита в области $r \le R$ задаются коэффициентами упругости c_{ik} и коэффициентами теплового расширения α_{ik}. Контактные условия на границе $r = R$ принимаем в форме

$$\vec{U}(R,\vartheta,\varphi)=\vec{u}(R,\vartheta,\varphi),\quad \vec{T}(R,\vartheta,\varphi)=\vec{t}(R,\theta,\varphi). \tag{1}$$

Здесь большими буквами обозначены вектор перемещения и вектор напряжения на сферической поверхности в области $r > R$, а малыми — аналогичные величины в области включения. Сферическая координатная система (r, θ, φ) соответствует кристаллографической системе (x_1, x_2, x_3) с началом в центре зерна.

Представим перемещение точек в бесконечной области в форме

$$\vec{U}=\vec{U}_0+\vec{U}_1;\quad \vec{U}_0=\left(\frac{A}{3K}+\alpha\Delta T\right)\vec{r}+\frac{1}{2\mu}\sum_{t=-2}^{2}A_t\left(2\vec{P}_{2t}+\vec{B}_{2t}\right)r;$$

$$\vec{U}_1=-B\,r^{-2}\vec{e}_r+\sum_{t=-2}^{2}\left\{B_t\left(-3\vec{P}_{2t}+\vec{B}_{2t}\right)r^{-4}+D_t\left[2(5-4\nu)\vec{P}_{2t}+2(1-2\nu\vec{B}_{2t})\right]r^{-2}\right\}; \tag{2}$$

$$A=\frac{1}{3}p_{kk};\ A_0=\frac{1}{6}\left(2p_{33}-p_{22}-p_{11}\right);\ A_1=\frac{1}{6}\left(p_{13}-ip_{23}\right);\ A_2=\frac{1}{24}\left(p_{11}-p_{22}-2ip_{12}\right).$$

В этих выражениях использованы частные векторные решения уравнений теории упругости, полная система которых приведена в монографии [3]. Неопределенные постоянные с отрицательными индексами B_t, D_t и параметры A_t удовлетворяют равенствам типа

$$A_{-1}=-6\overline{A}_1;\quad A_{-2}=24\overline{A}_2,$$

где риска над буквой отвечает операции комплексного сопряжения. В (2) учтены тепловые деформации, которые возникают в поликристалле при его охлаждении после спекания. Разность температур $\Delta T = T_{\text{ком}} - T_{\text{рел}}$, где $T_{\text{рел}}$ — значение температуры, при котором в зернах начинают формироваться термические микронапряжения. Вектору перемещения (2) соответствует вектор напряжения на сферической поверхности радиусом r

$$\begin{gathered}\vec{T}_r=\vec{T}_{r,0}+\vec{T}_{r,1};\quad \vec{T}_{r,0}=A\vec{e}_r+\sum_{t=-2}^{2}A_t\left(2\vec{P}_{2t}+\vec{B}_{2t}\right);\\ \frac{1}{2\mu}\vec{T}_{r,1}=2Br^{-3}\vec{e}_r+\sum_{t=-2}^{2}\left\{\left[12B_tr^{-5}+4(\nu-5)D_tr^{-3}\right]\vec{P}_{2t}+\left[-4B_tr^{-5}+2(1+\nu)D_tr^{-3}\right]\vec{B}_{2t}\right\}.\end{gathered} \tag{3}$$

При рассматриваемом типе внешнего нагружения поликристалла в выделенном кристаллите имеет место однородное напряженное состояние с постоянными микродеформациями ε_{ik} и микронапряжениями σ_{ik}. Соответствующие в точках зерна вектор перемещения

$$\vec{u}=a\vec{r}+\sum_{t=-2}^{2}a_t\left(2\vec{P}_{2t}+\vec{B}_{2t}\right)r;\ a=\frac{1}{3}\varepsilon_{kk};\ a_0=\frac{1}{6}(2\varepsilon_{33}-\varepsilon_{22}-\varepsilon_{11}); \tag{4}$$

$$a_1=\frac{1}{6}(\varepsilon_{13}-i\varepsilon_{23});\ a_2=\frac{1}{24}(\varepsilon_{11}-\varepsilon_{22}-2i\varepsilon_{12})$$

и вектор напряжения

$$\vec{t}_r = b\vec{e}_r + \sum_{t=-2}^{2} b_t\left(2\vec{P}_{2t} + \vec{B}_{2t}\right); b = \frac{1}{3}\sigma_{kk}; b_0 = \frac{1}{6}(2\sigma_{33} - \sigma_{22} - \sigma_{11}); \quad (5)$$

$$b_1 = \frac{1}{6}(\sigma_{13} - i\sigma_{23}); \; b_2 = \frac{1}{24}(\sigma_{11} - \sigma_{22} - 2i\sigma_{12}).$$

В равенствах (4—5) коэффициенты с отрицательными индексами удовлетворяют указанному выше соотношению для A_t. Связь между тензорами микродеформаций и микронапряжений устанавливается соответствующими уравнениями закона термоупругости.

При выполнении контактных условий (1) учитываем ортогональность на сфере векторных гармоник $\vec{P}_{2t}$ и $\vec{B}_{2t}$. В итоге после подстановки в (1) выражений (2—5) приходим к следующей системе алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}
&aR - \left(\frac{A}{3K} + \alpha\,\Delta T\right) R = -B\,R^{-2};\\
&b - A = 4\mu\, B\, R^{-3};\\
&2\,a_t R - \frac{1}{\mu} A_t\, R = -3B_t\, R^{-4} + 2(5-4\nu) D_t\, R^{-2};\\
&a_t R - \frac{1}{2\mu} A_t\, R = B_t\, R^{-4} + 2(1-2\nu) D_t\, R^{-2};\\
&b_t - A_t = \mu\left[12\, B_t\, R^{-5} + 4(\nu-5)\, D_t\, R^{-3}\right];\\
&b_t - A_t = 2\mu\left[-4B_t\, R^{-5} + 2(1+\nu) D_t\, R^{-3}\right], \quad t = 0, \pm 1, \pm 2.
\end{aligned} \quad (6)$$

Исключив из этой системы неизвестные B, B_t и D_t, получаем такие уравнения:

$$4\mu\, a + b = 3\frac{1-\nu}{1+\nu} A + 4\mu\,\alpha\,\Delta T; \quad b_t - \beta\, a_t = \gamma\, A_t; \quad \beta = \mu\frac{5\nu-7}{4-5\nu}; \; \gamma = \frac{15}{2}\frac{1-\nu}{4-5\nu}. \quad (7)$$

Равенства (7) связывают макроскопические напряжения p_{ik} с деформациями ε_{ik} и напряжениями σ_{ik} в кристаллите (что следует из выражений (2), (4) и (5)). До сих пор мы не делали каких-либо предположений о характере анизотропии поликристалла. Уравнения закона термоупругости для кристаллов гексагональной системы имеют вид

$$\begin{aligned}
&\varepsilon_{11} = s_{11}\,\sigma_{11} + s_{12}\,\sigma_{22} + s_{13}\,\sigma_{33} + \alpha_{11}\,\Delta T;\\
&\varepsilon_{22} = s_{12}\,\sigma_{11} + s_{11}\,\sigma_{22} + s_{13}\,\sigma_{33} + \alpha_{11}\,\Delta T;\\
&\varepsilon_{33} = s_{13}\,\sigma_{11} + s_{13}\,\sigma_{22} + s_{33}\,\sigma_{33} + \alpha_{33}\,\Delta T;\\
&\varepsilon_{23} = 0{,}5 s_{44}\sigma_{23}; \; \varepsilon_{31} = 0{,}5 s_{44}\sigma_{31}; \; \varepsilon_{12} = (s_{11} - s_{12})\sigma_{12}.
\end{aligned} \quad (8)$$

Здесь предполагается, что координатная ось x_3 совмещена с осью c кристалла. Совокупность соотношений (7) и (8) образует замкнутую систему алгебраических уравнений относительно деформаций ε_{ik} и напряжений σ_{ik} Для исключения из нее деформаций достаточно преобразовать параметры a и a_i в (4) к следующему виду:

$$
\begin{aligned}
&3a=(s_{11}+s_{12}+s_{13})(\sigma_{11}+\sigma_{22})+(2s_{13}+s_{33})\sigma_{33}+(2\alpha_{11}+\alpha_{33})\Delta T;\\
&6a_0=(2s_{13}-s_{12}-s_{11})(\sigma_{11}+\sigma_{22})+2(s_{33}-s_{13})\sigma_{33}+2(\alpha_{33}-\alpha_{11})\Delta T; \qquad (9)\\
&6a_1=0{,}5s_{44}(\sigma_{13}-i\sigma_{23});\ 24a_2=(s_{11}-s_{12})(\sigma_{11}-\sigma_{22})-2i(s_{11}-s_{12})\sigma_{12}.
\end{aligned}
$$

В результате получаем из уравнений (7) алгебраическую систему, неизвестными которой являются напряжения в зерне:

$$
\begin{aligned}
&d_{11}(\sigma_{11}+\sigma_{22})+d_{12}\sigma_{33}=b_1;\quad d_{21}(\sigma_{11}+\sigma_{22})+d_{22}\sigma_{33}=b_2;\\
&d_{33}(\sigma_{11}-\sigma_{22})=\gamma(p_{11}-p_{22});\ d_{33}\sigma_{12}=\gamma p_{12};\ d_{44}\sigma_{13}=\gamma p_{13};\ d_{44}\sigma_{23}=\gamma p_{23}.
\end{aligned} \qquad (10)
$$

В (10) введены такие обозначения:

$$
\begin{aligned}
&d_{11}=1+4\mu\,(s_{11}+s_{12}+s_{13});\ d_{12}=1+4\mu\,(2s_{13}+s_{33});\\
&d_{21}=-1-\beta\,(2s_{13}-s_{12}-s_{11});d_{22}=2\,[1-\beta(s_{33}-s_{13})];\\
&d_{33}=1-\beta(s_{11}-s_{12});\ d_{44}=1-0{,}5\beta\, s_{44}; \qquad (11)\\
&b_1=3\frac{1-\nu}{1+\nu}p_{kk}+4\mu\,(3\alpha-2\alpha_{11}-\alpha_{33})\Delta T;\\
&b_2=\gamma(2p_{33}-p_{22}-p_{11})+2\beta(\alpha_{33}-\alpha_{11})\Delta T.
\end{aligned}
$$

Таким образом, компоненты тензора средних напряжений в произвольном зерне гексагонального поликристалла определяются через макроскопические напряжения с помощью относительно несложных соотношений (10) и (11). Выражения для остаточных напряжений следуют из (10) и (11) при условии $p_{ik}=0$ и имеют вид

$$
\sigma_{33}^{\text{ост}}=\frac{2\beta\,(\alpha_{33}-\alpha_{11})\,\Delta T}{3+\beta\,(4s_{13}-s_{12}-s_{11}-2s_{33})};\quad \sigma_{22}^{\text{ост}}=\sigma_{11}^{\text{ост}}=-0{,}5\sigma_{33}^{\text{ост}}. \qquad (12)
$$

Макроскопический коэффициент теплового расширения поликристалла определяется при этом из первого равенства (10) с учетом (12) и равен

$$
\alpha=\frac{1}{3}(\alpha_{33}+2\alpha_{11})+\frac{2}{3}\,\frac{(s_{13}+s_{33}-s_{11}-s_{12})\beta}{3+\beta(4s_{13}-s_{12}-s_{11}-2s_{33})}(\alpha_{33}-\alpha_{11})\,. \qquad (13)
$$

Выражения для нормальных микронапряжений получаем из уравнений (10)

$$
\sigma_{11}=0{,}5\left[\frac{d_1}{d}+\frac{\gamma}{d_{33}}(p_{11}-p_{22})\right];\ \sigma_{22}=0{,}5\left[\frac{d_1}{d}-\frac{\gamma}{d_{33}}(p_{11}-p_{22})\right];\ \sigma_{33}=\frac{d_2}{d}, \qquad (14)
$$

где

$$
d=d_{11}\,d_{22}-d_{21}\,d_{12};\ d_1=b_1\,d_{22}-b_2\,d_{12};\ d_2=d_{11}\,b_2-d_{21}\,b_1. \qquad (15)
$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением одноосного напряженного состояния поликристаллического материала. В этом случае макроскопические напряжения

$$
p_{11}=pl^2;\ p_{22}=pm^2;\ p_{33}=pn^2;\ p_{12}=plm;\ p_{23}=pmn;\ p_{13}=pnl. \qquad (16)
$$

В (16) p — напряжение растяжения или сжатия; $l,\ m,\ n$ — направляющие косинусы линии действия внешнего напряжения. Параметры l, m и n определяют ориентацию кристаллита относительно направления внешней нагрузки.

Изложенное выше соответствует произвольному поликристаллу гексагональной симметрии.

Определение упругих характеристик и коэффициентов теплового расширения wBN. Для выполнения соответствующих вычислений в качестве исходных данных должны быть заданы прежде всего упругие постоянные c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}, c_{44} и коэффициенты теплового расширения α_{11}, α_{33} кристалла вюртцитного нитрида бора. Нам неизвестны какие-либо экспериментальные результаты измерений упругих постоянных wBN, поэтому воспользуемся относительно новыми данными для кубического нитрида бора. В [4] упругие постоянные c_{11}, c_{12} и c_{44} определены на основании первых принципов. Полученные в результате величины хорошо согласуются с экспериментальными значениями c_{11} = 820 ГПа, c_{12} = 190 ГПа, c_{44} = 480 ГПа. Исходя из этих данных, вычисляем упругие постоянные для wBN с использованием алгоритма из [5]. В итоге приходим к таким значениям:

$$c_{11} = 968{,}6 \text{ ГПа};\ c_{33} = 1040 \text{ ГПа};\ c_{12} = 151{,}4 \text{ ГПа}; \tag{17}$$

$$c_{13} = 80 \text{ ГПа};\ c_{44} = 355{,}8 \text{ ГПа}.$$

Упругим постоянным (17) соответствуют макроскопические упругие характеристики: модуль всестороннего сжатия K = 400 ГПа, модуль сдвига μ = 399 ГПа, модуль Юнга E = 898 ГПа и коэффициент Пуассона ν = 0,126. Значения модулей K и μ получены из решения двух нелинейных алгебраических уравнений [2], а величины E и ν вычислены по формулам

$$E = \frac{9K\mu}{3K + \mu}; \quad \nu = \frac{3K - 2\mu}{6K + 2\mu}.$$

Коэффициенты податливости s_{ik} для кристаллов гексагональной системы выражаются через упругие постоянные c_{ik} с помощью следующих соотношений [2]:

$$s_{11} = 0{,}5\left(\frac{c_{33}}{c} + \frac{1}{c_{11} - c_{12}}\right); \ s_{12} = 0{,}5\left(\frac{c_{33}}{c} - \frac{1}{c_{11} - c_{12}}\right);$$
$$s_{13} = -\frac{c_{13}}{c}; \ s_{33} = \frac{c_{11} + c_{12}}{c}; \ s_{44} = \frac{1}{c_{44}};$$
$$c = c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2.$$

Результаты измерений теплового расширения плотных модификаций нитрида бора в температурном интервале 300—1000 К приведены в [6]. Ориентировочные значения линейных коэффициентов теплового расширения в средней точке этого интервала, определенные из графиков в [6], равны

$$\alpha_{11} = 3{,}6 \cdot 10^{-6}\,\text{К}^{-1}, \quad \alpha_{33} = 4{,}3 \cdot 10^{-6}\,\text{К}^{-1}. \tag{18}$$

Линейный коэффициент теплового расширения нитрида бора wBN в соответствии с формулой (13) и величинами параметров (17) и (18) $\alpha = 3{,}83 \cdot 10^{-6}\,\text{К}^{-1}$. Заметим, что среднее в интервале температур 300—1000 К значение КТР для wBN, вычисленное по приведенной в [7] аппроксимации, равно $3{,}91 \cdot 10^{-6}$ К^{-1}.

Анализ микронапряжений. Для вычисления в зернах вюртцитного нитрида бора остаточных термических напряжений, которые формируются при спекании в процессе охлаждения и обусловлены анизотропией теплового расширения, необходимо иметь значение температуры $T_{\text{рел}}$. При этой температуре прекращается релаксация касательных напряжений на межзеренных границах и начинает устанавливаться жесткая связь между зернами. Из-за отсутствия в нашем распоряжении истинного значения $T_{\text{рел}}$ принимаем условно $T_{\text{рел}} = 1300$ K, т. е. считаем перепад температур в формулах (12) равным 1000 K. Такой выбор может быть оправдан до некоторой степени тем, что пластическая деформация поликристаллических материалов на основе кубического нитрида бора в условиях мягкого индентирования возникает лишь при температуре в интервале 800—1200 ºС [8]. В случае принятого перепада температур остаточные напряжения $\sigma_{11}^{\text{ост}} = \sigma_{22}^{\text{ост}} = -0{,}1$ ГПа и $\sigma_{33}^{\text{ост}} = 0{,}2$ ГПа.

Средние значения напряжений в зерне wBN зависят от ориентации его кристаллографических осей относительно линии действия внешней силы. В табл. 1 приведены результаты вычислений микронапряжений по формулам (10), (11) и (14), (15) для пяти ориентаций: 1) $l = 1$, $m = n = 0$; 2) $l = m = 2^{-0,5}$, $n = 0$; 3) $l = m = n = 3^{-0,5}$; 4) $l = n = 2^{-0,5}$, $m = 0$; 5) $l = m = 0$, $n = 1$. Как следует из этой таблицы, микронапряжения в координатном базисе кристаллографических осей существенно зависят от направляющих косинусов l, m, n.

Таблица 1. Значения микронапряжений, ГПа

Номер ориентации	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{13}	σ_{23}	σ_{12}
1	$-0{,}1 + 1{,}02p$	$-0{,}1 + 0{,}009p$	$0{,}2 - 0{,}03$p	0	0	0
2	$-0{,}1 + 0{,}515p$	$-0{,}1 + 0{,}515p$	$0{,}2 - 0{,}03p$	0	0	$0{,}506p$
3	$-0{,}1 + 0{,}333p$	$-0{,}1 + 0{,}333p$	$0{,}2 + 0{,}333p$	$0{,}315p$	$0{,}315p$	$0{,}337p$
4	$-0{,}1 + 0{,}495p$	$-0{,}1 - 0{,}01p$	$0{,}2 + 0{,}515p$	$0{,}472p$	0	0
5	$-0{,}1 - 0{,}03p$	$-0{,}1 - 0{,}03p$	$0{,}2 + 1{,}06p$	0	0	0

Прочность вюртцитного и кубического нитридов бора. Для оценки сопротивления разрушению поликристаллического материала в условиях рассматриваемого нагружения необходимо располагать определенным критерием прочности. Заметим, однако, что непосредственное вычисление пределов прочности при растяжении σ_p и при сжатии σ_c невозможно в рамках используемого феноменологического подхода. Поэтому ограничимся рассмотрением такого критерия, в котором в явном виде присутствует предел прочности σ_p. В этом случае предоставляется возможным установить связь между пределами прочности поликристалла σ_p и σ_c на основе данных о напряженном состоянии его зерен. С этой целью воспользуемся критерием разрушения Гриффитса для двухосного напряженного состояния

$$\begin{aligned} &\sigma_1 = \sigma_p; \quad 3\,\sigma_1 + \sigma_3 > 0; \\ &(\sigma_1 - \sigma_3)^2 + 8\,\sigma_p(\sigma_1 + \sigma_3) = 0; \quad 3\,\sigma_1 + \sigma_3 < 0, \end{aligned} \tag{19}$$

где σ_1 и σ_3 — первое и третье (алгебраически наибольшее и наименьшее) главные напряжения [9]. При макроскопической деформации сжатия применяется вторая группа соотношений в (19).

В общем случае произвольных значений направляющих косинусов для определения главных микронапряжений следует решать кубическое уравнение

$$\sigma^3 - \sigma_{kk}\sigma^2 + I_2\sigma - I_3 = 0; \quad I_2 = \sigma_{11}\sigma_{22} + \sigma_{22}\sigma_{33} + \sigma_{33}\sigma_{11} - \sigma_{12}^2 - \sigma_{23}^2 - \sigma_{31}^2;$$
$$I_3 = \sigma_{11}\sigma_{22}\sigma_{33} - \sigma_{11}\sigma_{23}^2 - \sigma_{22}\sigma_{31}^2 - \sigma_{33}\sigma_{12}^2 + 2\sigma_{12}\sigma_{23}\sigma_{31}.$$

Наибольшие значения первого главного напряжения при одноосном сжатии поликристалла имеют место в зернах, кристаллографическая ось c которых ортогональна линии действия внешней силы, т. е. для n = 0. С учетом этого выражение для предела прочности при сжатии

$$\sigma_c = \frac{1}{b}\left[a + 4\frac{d}{b}\sigma_p - \sqrt{8(a\frac{d}{b} - c)\sigma_p + 16\frac{d^2}{b^2}\sigma_p^2}\right]; \tag{20}$$
$$a = 0{,}296;\ b = -1{,}05;\ c = 0{,}099;\ d = 0{,}99$$

получается из третьего равенства (19) при $\sigma_c = -p$. Таким образом, пределы прочности при растяжении и сжатии вюртцитного нитрида бора связаны равенством (20). Соответствующие численные результаты приведены в табл. 2. С увеличением прочности отношение σ_c к σ_p возрастает.

Как показывают вычисления, максимальное значение первого главного напряжения при одноосном напряженном состоянии кубического нитрида бора достигается в зернах, в которых ось c составляет 45 градусов с линией действия внешней силы, т. е. при n = 0,707. Для этих зерен в случае сжатия $\sigma_1 = -0{,}061p$, $\sigma_2 = 0{,}041p$, $\sigma_3 = 1{,}02p$. С учетом этого получаем из критерия разрушения (19) простое соотношение между пределами прочности кубического нитрида бора в форме

$$\sigma_c = 6{,}57\sigma_p. \tag{21}$$

Сравнивая этот результат с данными табл. 2, приходим к заключению, что для высокопрочных вюртцитного и кубического нитридов бора (σ_p > 0,8) отношения σ_c к σ_p практически одинаковы.

Таблица 2. Пределы прочности вюртцитного нитрида бора, ГПа

σ_p	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
σ_c	1,38	2,14	2,88	3,61	4,33	5,06	5,78	6,50

Обсуждение результатов. Сопротивление разрушению поликристаллических плотных модификаций нитрида бора выше исследовали для условий макроскопически одноосного напряженного состояния. Экспериментальное определение пределов прочности при растяжении и сжатии таких материалов сопряжено с большими техническими трудностями из-за хрупкого характера их разрушения и значительного рассеяния результатов измерений даже в случае одноосного сжатия [10]. Для определения же предела прочности при растяжении используют косвенный метод диаметрального сжатия круглого диска с дополнительными вычислениями по определенному критерию разрушения [11]. В качестве такого в [11] принимали критерий А. А. Лебедева, а в [12] применяли теорию наибольших удлинений. Отметим, что в [12] установлено достаточно хорошее соответствие полученных методами диаметрального сжатия и одноосного растяжения значений пределов прочности для ряда хрупких материалов.

Решение упругой задачи для круглого диска, нагруженного сосредоточенными силами, приведено в [13]. В частном случае двух приложенных по концам диаметра сжимающих сил (задача Герца) напряженное состояние в центре диска задается напряжениями

$$\sigma_1 = \frac{2P}{\pi h D}; \quad \sigma_3 = -3\sigma_1; \quad \tau_{\max} = 2\sigma_1. \tag{22}$$

Характерно, что в точках диаметра диска, перпендикулярном линии действия сил P, наибольшие растягивающее и касательное напряжения определяются равенствами (22). Поэтому предположение о том, что разрушение материала произойдет в центре диска при $P = P_f$ является достаточно обоснованным (конечно при условии отсутствия существенных дефектов в других точках). Применяя для этого случая гипотезу (19) для $\sigma_3 + 3\sigma_1 = 0$, получаем выражение предела прочности материала при растяжении

$$\sigma_{\text{р}} = \frac{2P_f}{\pi h D}. \tag{23}$$

Имеющиеся в [10] экспериментальные сведения о пределе прочности при растяжении материалов на основе кубического нитрида бора вычисляли по этой формуле.

В данной статье рассматриваются однофазные поликристаллические материалы. Поэтому для сравнения полученных теоретических результатов с опубликованными экспериментальными данными следует привлекать реальный поликристаллический материал, который спекали из порошков без активирующих добавок. С этой целью может быть использован Эльбор-РМ, данные о механических свойствах которого приведены в [10]: $\sigma_{\text{с}} = (270 \pm 0{,}45)$ ГПа, $\sigma_{\text{р}} = (0{,}46 \pm 0{,}03)$ ГПа. В соответствии с этими результатами отношение пределов прочности при сжатии и растяжении для Эльбора-РМ находится в интервале от 4,6 до 7,35 со средним значением 6,0, что достаточно хорошо согласуется с равенством (21). Заметим, что модуль упругости кубического нитрида бора (для принятых нами значений упругих постоянных) E = 909 ГПа, в то время как приведенное в [10] опытное значение модуля упругости этого материала находится в интервале 765—915 ГПа.

Численные данные табл. 2 о прочности вюртцитного нитрида бора соответствуют следующему соотношению:

$$\sigma_{\text{с}} = -0{,}78 + 7{,}3\,\sigma_{\text{р}}. \tag{24}$$

Сопоставление установленной связи между пределами прочности при сжатии и растяжении (24) и опытными данными нельзя выполнить из-за отсутствия в нашем распоряжении соответствующих результатов. Отметим лишь, что эта связь получена с использованием некоторых существенных предположений. Во-первых, рассматривали однофазный поликристаллический вюртцитный нитрид бора. Во-вторых, его упругие характеристики вычислялись по упругим постоянным кристалла кубического нитрида бора. И в-третьих, выбранное значение перепада температур ΔT недостаточно обосновано. Следствием второго условия является практическое равенство упругих модулей плотных модификаций нитрида бора. Вычисленные значения остаточных термических напряжений в зернах wBN определены вторым и третьим условиями. Заметим, что вклад этих напряжений в зависимость (24) является существенным.

Уравнения (21) и (24) позволяют провести сравнительный анализ прочности двух исследуемых модификаций нитрида бора. Сравнение будем делать при выполнении условия равенства их пределов прочности σ_p. Возможны три соотношения между прочностью этих поликристаллов при сжатии. Оба материала имеют одинаковую прочность $\sigma_c' = 7{,}05$ ГПа для $\sigma_p' = 1{,}07$ ГПа. Пусть данной ситуации соответствует средний размер зерен d_c' для кубического нитрида бора и d_w' для вюртцитного. Для более крупнозернистых поликристаллов, когда $d_c > d_c'$ и $d_w > d_w'$, справедливы неравенства $\sigma_c < \sigma_c'$, $\sigma_p < \sigma_p'$ и более прочным при сжатии является кубический нитрид бора. В случае мелкозернистых поликристаллов (при $d_c < d_c'$ и $d_w < d_w'$) выполняются неравенства $\sigma_c > \sigma_c'$, $\sigma_p > \sigma_p'$ и более прочен при сжатии вюртцитный нитрид бора. Все эти выводы основаны на предположении, что прочность поликристаллического материала уменьшается с увеличением среднего размера его зерен.

В действительности равнопрочное состояние кубической и вюртцитной модификаций может не достигаться из-за слишком высоких значений пределов прочности. В таком случае сопротивление разрушению вюртцитного нитрида бора при сжатии будет меньше, чем кубического (для равных пределов прочности при растяжении).

Заключение

Представленная в данной статье численная информация о механических свойствах плотных модификаций нитрида бора получена с применением аналитического алгоритма, построенного на решении модельной задачи. Основные практические результаты могут быть суммированы следующим образом.

Определены упругие характеристики и коэффициент теплового расширения вюртцитного нитрида бора.

Вычислены остаточные термические напряжения в зернах вюртцитного нитрида бора.

Установлены связи между пределами прочности при растяжении и сжатии в форме $\sigma_c = 6{,}57\sigma_p$ для кубического нитрида бора и $\sigma_c = -0{,}78 + 7{,}3\sigma_p$ для вюртцитного.

1. *Петруша И. А.* Тонкозернистый высокопрочный материал кубического нитрида бора // Сверхтв. материалы. — 1999. — № 1. — С. 9—12.
2. *Шермергор Т. Д.* Теория упругости микронеоднородных сред. — М.: Наука, 1977. — 400 с.
3. *Головчан В. Т.* Анизотропия физико-механических свойств композитных материалов. — Киев: Наук. думка, 1987. — 302 с.
4. *Guo Y. D., Yang X. B., Li X. B. et al.* Systematics of elastic and thermodynamic properties of super-hardness cubic boron nitride under high pressure // Diamond Relat. Mater. — 2008. — **17**, N 1. — P. 1—6.
5. *Martin R. M.* Relation between elastic tensors of wurtzite and zinc-blende structure materials // Phys. Rev. B. — 1972. — **6**, N 12. — P. 4546—4553.
6. *Колупаева З. И., Фукс М. Я., Гладких Л. И. и др.* Тепловое расширение и характеристическая температура плотных модификаций нитрида бора // Сверхтв. материалы. — 1981. — № 2. — С. 3—7.
7. *Сверхтвердые* материалы. Получение и применение: В 6 т. / Под общей ред. Н. В. Новикова. — Т. 1: Синтез алмаза и подобных материалов / Под ред. А. А. Шульженко. — Киев: ИСМ им. В. Н. Бакуля, 2003. — 320 с.
8. *Harris T. K., Brookes E. J., Taylor C. J.* The flow stress of PcBN cutting tool materials at high temperatures // Int. J. Refr. Met. Hard Mater. — 2001. — **19**. — P. 267—273.

9. *Yokobori T.* The strength, fracture and fatigue of materials. — The Netherlands, Noordhoff: Groningen, 1965. — 372 p.
10. *Шульженко А. А., Божко С. А., Соколов А. Н. и др.* Синтез, спекание и свойства кубического нитрида бора. — Киев: Наук. думка, 1993. — 256 с.
11. *Новиков Н. В., Андросов И. М., Майстренко А. Л.* Методика определения прочности и трещиностойкости поликристаллических сверхтвердых материалов // Сверхтв. материалы. — 1982. — № 2. — С. 33—37.
12. *Седоков Л. М., Мартыненко А. Г., Симоненко Г. А.* Радиальное сжатие как метод механических испытаний // Заводская лаборатория. — 1977. — № 1. — С. 98—100.
13. *Лурье А. И.* Теория упругости. — М.: Наука, 1970. — 940 с.

Ин-т сверхтвердых материалов
им. В. Н. Бакуля НАН Украины

Поступила 27.02.09