**Кириллов Н. Мк-10 Перевод №2**

**Multiscale modeling of the structure and properties of ceramic nanocomposites**

**Abstract**

One of the most recent developments in ceramics has been the distribution of multiple phases in a ceramic composite at the nanoscopic length scale. An advanced nanocomposite microstructure such as that of polycrystalline silicon carbide (SiC)–silicon nitride (Si3N4) nanocomposites contains multiple length scales with grain boundary thickness of the order of 50 nm, SiC particle sizes of the order of 200–300 nm and Si3N4 grain sizes of the order of 0.8–1.5 μm. Designing the microstructure of such a composite for a targeted set of material properties is, therefore, a daunting task. Since the microstructure involves multiple length scales, multiscale analyses based material design is an appropriate approach for such a task. With this view, this chapter presents an overview of the current state of the art and work performed in this area.

**Key words**: ceramic nanocomposites, microstructure, multiple length scales, multiscale modeling.

**Многомасштабное моделирование структуры и свойств керамических нанокомпозитов**

**Аннотация**

Одним из последних достижений в керамике было распределение нескольких фаз в керамическом композите в масштабе наноскопической длины. Прогрессивная нанокомпозитная микроструктура, такая как структура нанокомпозитов поликристаллического карбида кремния (SiC)-силиконата (Si3N4), содержит несколько масштабов длины (“здесь имеется в виду масштабный уровень”) с толщиной границы зерен порядка 50 нм, размером частиц карбида кремния порядка 200-300 нм и размером зерен силиконата порядка 0,8-1,5 мкм. Таким образом, разработка микроструктуры такого композита для целевого набора свойств материала является сложной задачей. Поскольку микроструктура включает в себя несколько масштабов длины, многомасштабный анализ на основе материалов является соответствующим подходом для такой задачи. С этой точки зрения, в этой главе представлен обзор современного состояния и работы, выполняемой в этой области.

**Ключевые слова**: керамические нанокомпозиты, микроструктура, различные масштабы длины (масштабные уровни), многомасштабное моделирование.

**Introduction**

Over the past half century, ceramics have received significant attention as candidate materials for use as structural materials under conditions of high loading rates, high temperature, wear, and chemical attack that are too severe for metals. However, the inherent brittleness of ceramics has prevented their wide use in different applications. Significant scientific effort has been directed towards making ceramics more flaw-tolerant through design of their microstructures by:

* incorporation of fibers or whiskers that bridge the crack faces just behind the crack tip
* designing microstructures with elongated grains that act as bridges between crack faces just behind the crack tip
* incorporating second phase particles, which deflect the crack, making it travel a more tortuous path
* incorporating secondary phases that undergo stress-induced volume expansion that forces the crack faces together

**Введение**

За последние полвека керамика получила значительное внимание в качестве материалов-кандидатов для использования в качестве конструкционных материалов в условиях высоких нагрузок, высокой температуры, износа и химической атаки, которые являются слишком суровыми для металлов. Однако присущая хрупкость керамики препятствовала их широкому использованию в различных применениях. Значительные научные усилия были направлены на то, чтобы сделать керамику более устойчивой к недостаткам при разработке своих микроструктур путем:

* включения волокон или нитевидных кристаллов, которые соединяют поверхности трещины прямо за наконечником трещины
* проектирования микроструктур с удлиненными зернами, которые выступают в качестве мостов между слоями трещины непосредственно за наконечником трещины
* включая частицы второй фазы, которые отклоняют путь трещины, заставляя ее перемещаться по более извилистому пути
* включая вторичные фазы, которые подвергаются индуцированному расширению объема, что заставляет стороны трещины сойтись вместе

However, one of the most recent developments has been the distribution of multiple phases in a ceramic composite at the nanoscopic length scale. Owing to the prevalence of nanoscopic features, such composites are referred to as ceramic nanocomposites.

The definition of nanocomposite material has broadened significantly to encompass a large variety of systems such as one-dimensional (1D), twodimensional (2D), three-dimensional (3D), made of distinctly dissimilar components and mixed at the nanometer scale. The general class of nanocomposite organic/inorganic materials is a fast-growing area of research. Reducing the sizes of structural features in materials leads to a significant increase in the portion of surface/interface atoms. The surface/interface energy essentially controls the properties of a solid of such type. Interfaces provide a means to introduce non-homogeneity in the material. This non-homogeneity acts as a significant modification of both thermal and mechanical properties of the composites. Selective mixing of materials in a highly tailored morphology with a high percentage of interface area leads to materials with enhanced properties. The properties of nanocomposite materials depend not only on the properties of their individual parents but also on their morphology and interfacial characteristics

Однако, одним из последних открытий было распределение нескольких фаз в керамическом композите в масштабе наноскопической длины. Благодаря преобладанию наноскопических особенностей, такие композиты называются керамическими нанокомпозитами.

Определение нанокомпозитного материала значительно расширилось для охвата большого числа систем, таких как одномерные (1D), двухмерные (2D), трехмерные (3D), выполненные из совершенно разных компонентов и смешанные в нанометровом масштабе. Общий класс нанокомпозитных органических / неорганических материалов - быстрорастущая область исследований. Уменьшение размеров структурных характеристик материалов приводит к значительному увеличению доли атомов наружной/межфазной области. Энергия поверхностной / межфазной областей существенно контролирует свойства твердого тела такого типа. Межфазная область обеспечивает средство для введения неоднородности материала. Эта неоднородность действует как существенная модификация как тепловых, так и механических свойств композитов. Селективное смешивание материалов в сильно сшитой морфологии с высоким процентом площади межфазного пространства приводит к материалам с улучшенными свойствами. Свойства нанокомпозитных материалов зависят не только от свойств их отдельных родителей, но и от их морфологии и межфазных характеристик.

Nanocomposites find their use in various applications because of the improvements in the properties over the simpler structures. As an example, for components used in a gas turbine engine, a lifetime up to 10 000 h and a retained strength of ~300 MPa at a temperature of 1400 °C have been postulated, together with negligible creep rate. Furthermore, at elevated temperatures, the material must exhibit high resistance to thermal shock, oxidation, and subcritical crack growth. Ceramic nanocomposites have been shown to be extremely important for such future applications. Advanced bulk ceramic composite materials that can withstand high temperatures (> 1500°C) without degradation or oxidation can also be used for applications such as structural parts of motor engines, catalytic heat exchangers, nuclear power plants, and combustion systems, besides their use in fossil energy conversion power plants. These hard, high-temperature-stable ceramic composites and coatings are also in demand for aircraft and spacecraft applications.

One such material system in this class of composites, silicon carbide/silicon nitride (SiC/Si3N4) composites, has been shown to perform very well under high-temperature oxidizing conditions.

Нанокомпозиты находят свое применение в различных приложениях из-за улучшения в свойствах по сравнению с более простыми структурами. В качестве примера, для компонентов, используемых в газотурбинных двигателях, был рассчитан срок службы до 10 000 ч и удерживаемая сила ~ 300 МПа при температуре 1400 °С вместе с незначительной скоростью ползучести. Кроме того, при повышенных температурах материал должен обладать высокой сопротивляемостью к термическому удару, окислению и подкритическому росту трещины. Было показано, что керамические нанокомпозиты чрезвычайно важны для таких будущих применений. Продвинутые объемные керамические композиционные материалы, способные выдерживать высокие температуры (> 1500°C) без разрушения или окисления, также могут использоваться для таких применений, как конструктивные элементы моторных двигателей, каталитических теплообменников, атомных электростанций и систем сжигания, помимо их использования на электростанциях, преобразующих ископаемую энергию. Эти твердые, высокотемпературные стабильные керамические композиты и покрытия также пользуются спросом у авиационных и космических применений.

Показано, что одна такая материальная система в этом классе композитов, композитов из карбида кремния / нитрида кремния (SiC / Si3N4) очень хорошо работает в условиях высокотемпературного окисления.

Interest in such nanocomposites started with the experiments of Niihara who reported large improvements in both the fracture toughness and the strength of materials by embedding nanometer range (20–300 nm) particles within a matrix of larger grains and at the grain boundaries (GBs). A 200% improvement in both strength and fracture toughness, better retention of strength at high temperatures, and better creep properties were observed.

An advanced nanocomposite microstructure such as that of polycrystalline silicon carbide (SiC)–silicon nitride (Si3N4) nanocomposite contains multiple length scales with GB thickness of the order of 50 nm, SiC particle sizes of the order of 200–300 nm and Si3N4 grain sizes of the order of 0.8 to 1.5 μm. Designing the microstructure of such a composite (and similar others such as TiN–Si3N4, SiC–Al2O3, SiC–SiC, graphene/CNT+SiC, and carbon fiber+SiC nanocomposites) for a targeted set of material properties is, therefore, a daunting task. Since the microstructure involves multiple length scales, multiscale analyses based material design is an appropriate approach for such a task.

Интерес к таким нанокомпозитам начался с экспериментов Ниигара, которые сообщили о больших улучшениях как вязкости разрушения, так и прочности материалов за счет вложения нанометрового диапазона (20-300 нм) частиц в матрицу из более крупных зерен и границ зерен (ГЗ). Наблюдалось 200% повышение прочности и вязкости разрушения, лучшее удерживание прочности при высоких температурах и лучшие свойства ползучести.

Передовая нанокомпозитная микроструктура, такая как нанокомпозит поликристаллического карбида кремния (SiC) - нитрида кремния (Si3N4), содержит несколько масштабов длины с толщиной ГЗ порядка 50 нм, размером частиц SiC порядка 200-300 нм и размерами зерна нитрида кремния порядка 0,8-1,5 мкм. Следовательно, проектирование микроструктуры такого композита (и подобных других, таких как олово-силиконат, карбид кремния-оксид алюминия, карбид кремния-карбид кремния, графен / УНТ + карбид кремния и нанокомпозиты углеродного волокна + карбид кремния) для целевого набора свойств материала является сложной задачей. Поскольку микроструктура включает в себя несколько масштабов длины, многомасштабный анализ на основе материалов является соответствующим подходом для такой задачи.

**Multiscale modeling and material design**

A multiscale modeling paradigm is shown in Fig. 5.1. Atomistic analyses at the nanoscale can impart important information about the effect of critical features such as a grain boundary (GB), an interface, or a triple junction, etc. on mechanical deformation behavior of a small nanoscale (~ few nanometers) sample. In multiscale modeling such information is used to formulate macroscale (> a few micrometers) material models for understanding microstructure-dependent deformation behavior of a material sample such as the one shown in Fig. 5.1.

Appropriate mathematical models of microstructure property relations allow one to relate performances such as fracture toughness, ultimate strength, fatigue lifetime, etc. to key material microstructure parameters like volume fraction, particle size, and phase composition.

Since a typical nanoscale test sample is much smaller and is subjected to varied surroundings in a typical microstructure (e.g. Fig. 5.1), the incorporation of nanoscale information in macroscale models is subjected to statistical uncertainty.

**Многомасштабное моделирование и проектирование материалов**

Парадигма многомасштабного моделирования показана на рисунке 5.1. Атомные анализы на наномасштабном уровне могут дать важную информацию о влиянии критических характеристик, таких как граница зерен (ГЗ), граница раздела или тройной переход и т. д. на механическое поведение деформации небольшого нанометрового (~ несколько нанометров) образца. В многомасштабном моделировании такая информация используется для формулировки макромасштабированных (> нескольких микрометров) материальных моделей, для понимания, зависимого от микроструктуры деформационного поведения образца материала, такого какой показан на рисунке 5.1.

Соответствующие математические модели отношений свойств микроструктуры позволяют связать такие характеристики, как вязкость разрушения, предельная прочность, срок службы и т. д. с ключевыми параметрами микроструктуры материала, такими как объемная доля, размер частиц и фазовый состав.

Поскольку типичный наноразмерный тестовый образец намного меньше и подвергается разнообразным воздействиям окружающей среды в типичной микроструктуре (например, на рисунке 5.1), включение наномасштабной информации в макромасштабные модели подвержено статистической неопределенности.

If a complex microstructure is to be designed for a targeted set of properties, it is important that such uncertainties be correctly quantified and incorporated within a robust material design framework. The development of a variable fidelity model management framework that can incorporate material behavior analyses at multiple length scales in a design optimization framework has been reported.

Figure 5.2 details the process flow of a petascale multiphysics model management tool for multiscale material design. Deployed on a petascale machine, the design tool developed in this research, that integrates atomistic and mesoscale analyses using a variable fidelity model management framework, will facilitate a significant reduction in nanomaterials’ development cost and time with a simultaneous increase in the possible different combinations of individual composite material phases to achieve desired material performance. The model management framework, besides managing the models and scales, is also well suited to control hierarchical parallelism. The natural hierarchy is molecular dynamics (MD) within the cohesive finite element method (CFEM) within design under uncertainty, using a mixed programming model SHMEMTM by SGI for CFEM and MPI for MD and the uncertainty modeling.

Если сложная микроструктура должна быть спроектирована для целевого набора свойств, важно, чтобы такие неопределенности были корректно определены и включены в прочный конструктор материалов. Сообщалось о разработке схемы управления моделью переменной точности, которая может включать анализ поведения материала в нескольких масштабах в рамках оптимизации дизайна.

На рис. 5.2 подробно описывается процесс обработки инструмента управления моделью многошагового плейсаля для многомасштабного проектирования материалов. Развернутый на машине с чередованием, инструмент проектирования, разработанный в этом исследовании, объединяющий атомистические и мезомасштабные анализы с использованием системы управления моделью с переменной точностью, будет способствовать значительному снижению затрат и времени разработки наноматериалов с одновременным увеличением возможных различных комбинаций отдельных фаз композитного материала для достижения желаемых характеристик материала. Конструкция управления моделью, помимо управления моделями и масштабами, также хорошо подходит для управления иерархическим параллелизмом. Естественная иерархия - это молекулярная динамика (MD) в рамках когезионного метода конечных элементов (CFEM) в рамках проектирования в условиях неопределенности с использованием модели смешанного программирования SHMEMTM SGI для CFEM и MPI для MD и моделированием неопределенности.

Material design analyses of the model system have been performed to understand the morphology-related parameters that must be controlled for optimal targeted set of properties. The application of the design tool is focusing on the continuous fiber ceramic composite (CFCCs) models of SiC–Si3N4 nanocomposites (Fig. 5.3). The second phase (circles and cylinders) are the SiC fibers that have higher elastic modulus and higher creep resistance (E) but lower yield stress and fracture toughness, than that of the primary Si3N4 phase. The problem is to design the most suitable CFCC, with maximum strength and creep resistance for a set of external temperatures T, where the number of design variables will depend on whether the simulation tests are run on the 2D or 3D model. The design variables to be considered in the nanocomposite design optimization problem, for the 2D model, are the fiber diameter (d) and the external temperature (T). For the 3D model, the design variables to be considered are the fiber diameter (d), the length of fibers (l) and the external temperature (T).

Figure 5.4 illustrates normalized (0–100) function values for the strength and creep strain rate as a function of design variables for the high-fidelity model (3D) and low-fidelity model (2D).

Проведен анализ материалов модельной системы для понимания параметров, связанных с морфологией, которые необходимо контролировать для оптимального целевого набора свойств. Применение инструмента для проектирования фокусируется на моделях непрерывных волоконно-керамических композитов (CFCC) нанокомпозитов карбид кремния-силиконат (рис. 5.3). Вторая фаза (круги и цилиндры) представляет собой волокна карбида кремния с более высоким модулем упругости и более высоким сопротивлением ползучести (E), но более низким пределом текучести и вязкостью разрушения, чем у первичной фазы силиконата. Проблема заключается в проектировании наиболее подходящего CFCC с максимальной прочностью и сопротивлением ползучести для набора внешних температур T, где количество проектных переменных будет зависеть от того, будут ли имитационные тесты выполняться в 2D или 3D-модели. Проектные переменные, которые следует учитывать в задаче оптимизации нанокомпозитного проектирования, для 2D-модели - это диаметр волокна (d) и внешняя температура (T). Для трехмерной модели рассматриваемыми переменными являются диаметр волокна (d), длина волокон (l) и внешняя температура (T).

На рисунке 5.4 показаны нормированные (0-100) значения функции для скорости деформации прочности и ползучести в зависимости от конструктивных переменных для модели высокой точности (3D) и модели с низкой точностью (2D).

Figure 5.4(a) shows an increase in the CFCC strength and a corresponding decrease in the creep strain rate as the design variable d increases. Similarly, for the high-fidelity model, Fig. 5.4(b) shows an increase in the CFCC strength and a corresponding decrease in the creep strain rate as the design variables d and l increase.

**Multiscale modeling approach**

The multiscale analyses (at nanometer and micrometer length and time scales) are based on a combination of CFEM and MD based techniques as shown in Fig. 5.5. In such analyses we extract information between multiple phases of a material based on molecular simulations. Such information is usually not available in experiments, but is incorporated in continuum models and later compared and validated with experiments.

Several studies have shown that the incorporation of SiC nanoparticles in a Si3N4 matrix improves high-temperature creep resistance while maintaining or improving the room-temperature strength. Following this observation, innovative processing approaches using polymer-derived amorphous Si–C–N powders have been developed to produce SiC nanoparticle reinforced composites.

На рис. 5.4 (а) показано увеличение силы CFCC и соответствующее уменьшение скорости деформации ползучести при увеличении проектной переменной d. Аналогично, для модели с высокой точностью на рисунке 5.4 (b) показано увеличение силы CFCC и соответствующее уменьшение скорости деформации ползучести при увеличении проектных переменных d и l.

**Многомасштабный подход к моделированию**

Многомасштабные анализы (на нанометровой и микрометрической длине и временном масштабе) основаны на сочетании методов CFEM и MD, как показано на рисунке 5.5. В таких анализах мы извлекаем информацию между несколькими фазами материала на основе молекулярного моделирования. Такая информация обычно недоступна в экспериментах, но включена в модели континуума, а затем сравнивается и проверяется с помощью экспериментов.

Несколько исследований показали, что включение наночастиц карбида кремния в матрице силиконата улучшает сопротивление высокотемпературной ползучести при сохранении или улучшении прочности при комнатной температуре. Следуя этому наблюдению, были разработаны инновационные подходы к обработке с использованием полимерных аморфных карбидо-углеродо-азотных порошков для получения композитов на основе карбида кремния на основе наночастиц.

While the material system is an excellent candidate for high-temperature applications, a careful analysis of the effect of the underlying morphology on the overall high-temperature behavior of the material system is lacking. Such studies exist for composites in which the reinforcement size is in the several-micron range and, in these studies, both the reinforcement size and volume fraction significantly affect the fracture toughness and strength. A fundamental understanding of the effect of nanosized SiC reinforcements on the mechanical behavior of Si3N4 matrix composites is required before further attempting to improve the properties of these composites by varied morphological alterations in experiments.

Tomar reported on the effect of morphological variations in second-phase SiC particle placement and GB strength on the dynamic fracture strength of SiC–Si3N4 nanocomposites using continuum analyses based on a mesoscale cohesive finite element method (CFEM). It was found that high-strength and relatively small sized SiC particles act as stress concentration sites in the Si3N4 matrix, leading to intergranular Si3N4 matrix cracking as a dominant failure mode.

В то время как материальная система является отличным кандидатом для высокотемпературных применений, отсутствует тщательный анализ влияния основной морфологии на общее высокотемпературное поведение материальной системы. Такие исследования существуют для композитов, в которых размер армирующей матрицы находится в диапазоне нескольких микрон, и в этих исследованиях как размер матрицы, так и объемная доля существенно влияют на вязкость и прочность на разрыв. Необходимо фундаментальное понимание влияния наноразмерных усилений карбида кремния на механическое поведение матричных композитов силиконата, прежде чем пытаться улучшить свойства этих композитов с помощью разнообразных морфологических изменений в экспериментах.

Томар сообщил о влиянии морфологических изменений в размещении частиц карбида кремния второй фазы и силе ГЗ на динамическую прочность на разрыв нанокомпозитов карбид кремния-силиконат с использованием континуальных анализов на основе мезомасштабного когезионного метода конечных элементов (CFEM). Было обнаружено, что высокопрочные и относительно мелкие частицы карбида кремния действуют как центры концентрации напряжений в матрице силиконата, приводящее к межкристаллическому матричному крекированию силиконата в качестве доминирующего режима отказа.

However, as a result of a significant number of nanosized SiC particles being present in microsized Si3N4 matrix, the SiC particles invariantly fall in wake regions of microcracks, leading to significant structural strength. This mechanism was further examined using 3D molecular dynamics (MD) simulations of crack propagation in SiC–Si3N4 nanocomposites with cylindrical SiC inclusions.

In the case of SiC–Si3N4 nanocomposites, MD analyses have also revealed that the second-phase particles act as significant stress raisers in the case of single crystalline Si3N4 phase matrix, affecting the strength significantly. However, the particles’ presence does not have a significant effect on the mechanical strength of bicrystalline or nanocrystalline Si3N4 phase matrices. The strength of the SiC–Si3N4 nanocomposite structures showed an uncharacteristic correlation between GB thickness and temperature. The strength showed a decrease with increase in temperature for structures having thick GBs having diffusion of C, N, or Si atoms. However, for structures with no appreciable GB thickness (no diffusion of C, N, or Si atoms), due to particle clustering and increase in SiC–Si3N4 interfacial strength with temperature, the strength improved with an increase in temperature.

Однако в результате значительного количества наноразмерных частиц карбида кремния, присутствующих в микронизированной матрице силиконата, частицы карбида кремния инвариантно падают в области следа микротрещин, что приводит к значительной структурной прочности. Этот механизм был дополнительно изучен с использованием трехмерной молекулярной динамики (MD) моделирования распространения трещин в нанокомпозитах карбид кремния-силиконат с цилиндрическими включениями карбида кремния.

В случае нанокомпозитов карбид кремния-силиконат, МД-анализы также показали, что частицы второй фазы действуют как значительные усилители напряжений в случае однокристаллической фазовой матрицы силиконата, существенно влияя на прочность. Однако присутствие частиц не оказывает существенного влияния на механическую прочность бикристаллических или нанокристаллических матриц силиконата. Прочность нанокомпозитных структур карбид кремния-силиконат показала нехарактерную корреляцию между толщиной ГЗ и температурой. Значение прочности показало уменьшение с увеличением температуры для структур, имеющих толщину ГЗ, имеющих диффузию атомов углерода, азота или кремния. Однако для структур без заметной толщины ГЗ (без диффузии атомов углерода, азота или кремния) из-за кластеризации частиц и увеличении межфазной прочности в карбиде кремния-силиконате с температурой, прочность улучшалась с повышением температуры.

Figure 5.6 shows snapshots of fracture propagation analyses in such nanocomposites obtained using the CFEM. Current research work focuses on obtaining experimental images of the ceramic nanocomposites developed by collaborators, developing nanoscale CFEM meshes on such images, and performing failure analyses using the combination of MD and CFEM techniques.

As noted earlier, high-strength and relatively small sized SiC particles act as stress concentration sites in the matrix, leading to intergranular Si3N4 matrix cracking as a dominant failure mode. CFEM analyses also revealed that the SiC nanosized particles invariantly fall in wake regions of microcracks, leading to significant mechanical strength. This finding was confirmed in the MD analyses that revealed that particle clustering along the GBs significantly increases the strength of these nanocomposites. While some nanocomposite morphologies have sharply defined SiC–Si3N4 interfaces, other nanocomposite morphologies have diffusion of C, N, or Si atoms at the interfaces.

На рисунке 5.6 показаны снимки анализов распространения трещин в таких нанокомпозитах, полученных с использованием CFEM. Текущая исследовательская работа фокусируется на получении экспериментальных изображений керамических нанокомпозитов, разработанных сотрудниками, разработке наномасштабных CFEM-сеток на таких изображениях и проведении анализа отказов с использованием комбинации методов MD и CFEM.

Как отмечалось ранее, высокопрочные и относительно мелкие частицы карбида кремния действуют как узлы концентрации напряжений в матрице, что приводит к межкристаллическому матричному крекингу силиконата в качестве доминирующего режима отказа. Анализ CFEM также показал, что наноразмерные частицы карбида кремния инвариантно падают в области следа микротрещин, что приводит к значительной механической прочности. Это открытие было подтверждено в MD-анализах, которые показали, что кластеризация частиц вдоль ГЗ значительно увеличивает прочность этих нанокомпозитов. В то время как некоторые нанокомпозитные морфологии имеют четко определенные границы карбида кремния-силиконата, другие морфологии нанокомпозитов имеют диффузию атомов углерода, азота или кремния на границах раздела.

Classical MD replaces a comprehensive quantum mechanical treatment of interatomic forces with a phenomenological description in the form of an interatomic potential. MD has been used recently to achieve nm/cycle fatigue crack extension rate similar to that observed in experiments. Al with grain sizes from 30 nm to 90 nm by Yamakov and co-workers have been found to be in close agreement with experimental observations reported by Liao et al. MD simulations have proven to provide phenomenological trends on deformation mechanisms of nanocrystalline materials in agreement with experiments. Atomistic analyses of the nanocomposite mechanical strength as a function of phase morphology are relatively new and have focused on a very limited set of issues. Both SiC and Si3N4 have been individually analyzed in atomistic simulations for different mechanical strength related issues. However, SiC–Si3N4 nanocomposite morphologies are analyzed in this work for the first time.

**The cohesive finite element method (CFEM)**

Molecular dynamics (MD) simulations are performed using a wellestablished nanocomposite molecular dynamics simulation framework. The CFEM analyses are performed using the analyses criterion developed and reported in [40].

Классический МД-метод заменяет комплексную квантовомеханическую обработку межатомных сил феноменологическим описанием в форме межатомного потенциала. В последнее время MD используется для достижения скорости удлинения трещин при длине нанометр / цикл, аналогичной наблюдаемой в экспериментах. Ямаковым и сотрудниками было обнаружено, что алюминий с размерами зерна от 30 нм до 90 нм находится в тесном согласии с экспериментальными наблюдениями, данными Liao и другими. Моделирование МД показало, что они обеспечивают феноменологические тенденции в отношении механизмов деформации нанокристаллических материалов в соответствии с экспериментами. Атомистический анализ механической прочности нанокомпозитов в зависимости от фазовой морфологии является относительно новым и сосредоточен на очень ограниченном наборе задач. Как карбид кремния, так и силиконат были индивидуально проанализированы в атомистическом моделировании для различных вопросов, связанных с механической прочностью. Однако морфология нанокомпозитов карбид кремния - силиконат в этой работе анализируется впервые.

**Метод когезионных конечных элементов (CFEM)**

Моделирование методом молекулярной динамики (MD) выполняется с использованием хорошо разработанной модели наномолекулярной молекулярной динамики. Анализ CFEM выполняется с использованием критерия анализа, разработанного и сообщенного в [40].

The CFEM is based on continuum mechanical foundations. In the CFEM meshes, each phase is modeled with hyperelastic constitutive behavior based on available experimental evidence. In the absence of experimental information, the distribution of the crystalline orientation of the Si3N4 and SiC phases is neglected. In the MD morphologies, crystalline orientations are explicitly considered.

The complete CFEM framework has been described earlier, so it is only briefly described here. A Lagrangian finite deformation formulation is used to account for the finite strains and rotations in crack tip regions. The CFEM simulations are carried out under plane strain assumption. Although the discussion in the presented research focuses on tensile loading, compression and contact can also be dealt with within this framework. An irreversible bilinear cohesive law is used. Fracture energy per unit cohesive surface area is the same as the fracture energy of the material, Ф0 (Table 5.1). The damage in cohesive surfaces is tracked through a parameter Фd, which is a function of the extent of the separation of cohesive surfaces. Фd= Ф0 when surfaces have separated to cause fracture. Фd is partly converted into the surface energy and partly spent on causing damage in the material adjacent to crack surfaces through microcrack formation that is not based on a pre-specified criterion.

CFEM основан на механических основах континуума. В сетках CFEM каждая фаза моделируется с гиперэластическим конститутивным поведением на основе имеющихся экспериментальных данных. В отсутствие экспериментальной информации распределение кристаллической ориентации фаз силиконата и карбида кремния пренебрегается. В морфологиях MD четко рассматриваются кристаллические ориентации.

Полная структура CFEM была описана ранее, поэтому она кратко описана здесь. Лагранжева конечная деформационная формулировка используется для учета конечных деформаций и вращений в областях наконечника трещины. Моделирование CFEM выполняется в предположении плоской деформации. Хотя обсуждение в представленном исследовании сосредоточено на растягивающей нагрузке, сжатие и контакт также могут быть рассмотрены в этих рамках. Используется необратимый билинейный когезионный закон. Энергия разрушения на единицу когезионной площади поверхности такая же, как энергия разрушения материала, Ф0 (таблица 5.1). Ущерб в когезионных поверхностях отслеживается через параметр Фд, который зависит от степени разделения когезионных поверхностей. Фд = Ф0, когда поверхности разделены, чтобы вызвать перелом. Фд частично преобразуется в поверхностную энергию и частично тратится на причинение ущерба материалу, прилегающему к поверхности трещины, посредством образования микротрещины, который не основан на заранее заданном критерии.

A unique damage parameter can be defined to phenomenologically track the progressive softening of cohesive surfaces interspersed throughout the composite microstructure.

Note that 0 ≤ D ≤ 1, with D = 0 indicating fully recoverable interfacial separation and D = 1 signifying complete separation or total fracture. In the numerical analysis carried out by Tomar and co-workers, and in the presented research, D is used as a state variable quantifying the degree of the damage, providing a phenomenological measure for failure analysis.

**Experiment-based calculation of the bilinear cohesive law parameters**

Overall, five parameters are needed to specify the cohesive behavior, including the maximum tensile strength Tmax, the critical separations Δnc and Δlc, characteristic separation η0 and α. Note that only four of these parameters are independent since α = Δnc/Δlc. Calibration of these parameters is an important aspect in the implementation of the CFEM model. Tmax is commonly assumed to be a fraction of the Young’s modulus (1/100 to 1/1000). The critical separations Δnc and Δlc are usually obtained by equating the area under the cohesive relation to the formation energy per unit area of the corresponding fracture surface. In this regard, experimental efforts have been reported.

Уникальный параметр повреждения может быть определен феноменологически отслеживанием постепенного размягчения когезионных поверхностей, перемещающихся по всей сложной микроструктуре.

Заметим, что 0 ≤ D ≤ 1, с D = 0, указывающим полностью восстановимое межфазное разделение, и D = 1, означающее полное разделение или полное разрушение. В численном анализе, проведенном Томаром и его коллегами, и в представленном исследовании, D используется как переменная состояния, определяющая степень ущерба, предоставляя феноменологическую меру для анализа отказа.

**Экспериментальный расчет параметров билинейного когезионного закона**

В целом, для определения когезионного поведения требуются пять параметров, включая максимальную прочность на растяжение Tmax, критические расстояния Δnc и Δlc, характеристическое разделение η0 и α. Заметим, что только четыре из этих параметров независимы, так как α = Δnc / Δlc. Калибровка этих параметров является важным аспектом в реализации модели CFEM. Обычно Tmax считается частью модуля Юнга (1/100 до 1/1000). Критические разделения Δnc и Δlc обычно получают путем приравнивания площади над когезионном отношении к энергии пласта на единицу площади соответствующей поверхности трещины. В этой связи сообщалось об экспериментальных усилиях.

The cohesive finite element method (CFEM) obtained from the ratio between the tangential and normal energy release rates.

In this study, the approach for parameter selection as described by Xu and Needleman is used. The value of characteristic separation η0 is taken as 0.001. GBs in the nanocomposites have a glassy structure consisting of densification aids such as Y2O3 and other rare earth oxides such as samarium, gadolinium, dysprosium, erbium, and ytterbium (verified using the TEM observations on the Si3N4 phase). Experimental data on the fracture properties and strength of GBs are not available. The GBs’ chemical composition is a complex and uncharacterized combination of different compounds such as Y2O3, MgO, etc. with glassy structure. Accordingly, the fracture properties for GBs cannot be specified based on chemical composition. However, experiments for polycrystalline Si3N4 have shown that the presence of GBs results in lowering of mechanical strength owing to GB sliding (attributed to glassy structure) and an increase in fracture strength owing to the crack-deflection effect (roughly of the order of 5%). Accordingly, the GBs are arbitrarily assigned 5% higher fracture strength than that of the Si3N4 matrix.

Метод когезионных конечных элементов (CFEM) получен из соотношения между тангенсальной и нормальной скоростью высвобождения энергии.

В этом исследовании используется подход для выбора параметров, описанный Xu и Needleman. Значение характеристического разделения η0 принимается за 0,001. ГЗ в нанокомпозитах имеют стекловидную структуру, состоящую из вспомогательных средств для уплотнения, таких как оксид иттрия и других редкоземельных оксидов, таких как самарий, гадолиний, диспрозий, эрбий и иттербий (проверено с использованием наблюдений электронного микроскопа на фазе силиконата). Экспериментальные данные о свойствах разрушения и прочности ГЗ недоступны. Химический состав ГЗ представляет собой сложную и нехарактерную комбинацию различных соединений, таких как оксид иттрия, оксид магния и т. д. со стекловидной структурой. Соответственно, свойства разрушения для ГЗ не могут быть указаны на основе химического состава. Однако эксперименты по поликристаллическому силиконату показали, что присутствие ГЗ приводит к снижению механической прочности вследствие скольжения ГЗ (приписываемого стеклообразной структуре) и увеличению прочности на разрыв из-за эффекта трещин (примерно порядка 5%). Соответственно, у ГЗ произвольно назначаются на 5% выше прочность на разрыв, чем у матрицы силиконата

An increase in fracture strength for structural and glassy materials is often accompanied with a reduction in elastic modulus. Accordingly, while arbitrary assigning 5% higher fracture toughness to GBs than Si3N4 phase, the elastic modulus is made smaller than that of the Si3N4 phase by 5%. The immediate effect is that the simulations are qualitative in nature. With the availability of experimental measurements on GB properties, more realistic properties of GBs can be incorporated to increase the accuracy of the simulation predictions.

Because the GBs have finite widths, there are three phases (GBs, SiC, and Si3N4) in the microstructures analyzed. The cohesive parameters are calculated using experimental information on the elastic moduli and Ф0. Homogenized properties are calculated using volume weighted averaging. The values for Ф0 are obtained based on surface energy release rate measurements during fracture experiments on bulk SiC and Si3N4 reported in the literature. An interface between any two of the three phases is assigned the cohesive properties corresponding to the weaker phase. Table 5.1 shows the material properties for analyzing microstructures shown in Fig. 5.6.

Увеличение прочности на разрыв для структурных и стеклообразных материалов часто сопровождается уменьшением модуля упругости. Соответственно, при произвольном назначении на 5% более высокой вязкости разрушения для ГЗ, чем у фазы силиконата, модуль упругости будет меньше, чем у фазы силиконата на 5%. Непосредственный эффект заключается в том, что моделирование носит качественный характер. При наличии экспериментальных измерений свойств ГЗ более реалистичные свойства ГЗ могут быть включены для повышения точности предсказаний моделирования.

Поскольку ГЗ имеют конечную ширину, в анализируемых микроструктурах имеются три фазы (ГЗ, карбид кремния и силиконат). Когезионные параметры рассчитываются с использованием экспериментальной информации о модулях упругости и Ф0. Гомогенизированные свойства рассчитываются с использованием взвешенного по весу усреднения. Значения для Ф0 получены на основе измерений скорости высвобождения поверхностной энергии во время экспериментов по разлому основных частей карбида кремния и силиконата, указанных в литературе. Межфазному пространству между любыми двумя из трех фаз присваиваются когезионные свойства, соответствующие более слабой фазе. В таблице 5.1 показаны свойства материала для анализа микроструктур, показанных на рисунке 5.6.

**CFEM problem setup**

Microstructures analyzed using CFEM are shown in Fig. 5.6. Since a given unique set of phase morphology defining parameters (such as the location of SiC particles in the current research) corresponds to multiple sets of phase morphologies, three different random samples corresponding to each microstructural representation shown in Fig. 5.6 are used to characterize the material behavior. The microstructures have Si3N4 grain size approximately equal to 1.2 μm and SiC particle size approximately equal to 200 nm. The volume fraction of the SiC phase is fixed at 20%. The average GB width is approximately 120 nm. Accordingly, the microstructures with GBs have the approximate volume fraction of 10%.

To track complex crack/microcrack patterns, arbitrary crack paths and crack branching, cohesive surfaces are specified along all finite element boundaries as an intrinsic part of the finite element model. All cohesive surfaces serve as potential crack paths in the microstructure; therefore, fracture inside each microstructural phase and along interphase boundaries can be explicitly resolved. Accordingly, the analyses are able to take into account the intergranular as well as intragranular fracture.

**Сложности настройки CFEM**

Микроструктуры, проанализированные с использованием CFEM, показаны на рисунке 5.6. Так как данный уникальный набор фазовых морфологий, определяющих параметры (такие, как расположение частиц карбида кремния в текущем исследовании), соответствует множеству фазовых морфологий, для характеристики микроструктурного представления, показанного на рис. 5.6, используются три разных случайных выборки, соответствующие каждому микроструктурному представлению материального поведения. Микроструктуры имеют размер зерна силиконата приблизительно равного 1,2 мкм, и размер частиц карбида кремния приблизительно равного 200 нм. Объемная доля фазы карбида кремния фиксируется на уровне 20%. Средняя ширина ГЗ составляет приблизительно 120 нм. Соответственно, микроструктуры с ГЗ имеют приблизительную объемную долю 10%.

Для отслеживания сложных трещин / микротрещин, произвольных путей трещины и разветвления трещин, когезионные поверхности задаются вдоль всех границ конечных элементов как неотъемлемая часть модели конечных элементов. Все когезионные поверхности служат потенциальными траекториями трещин в микроструктуре; поэтому перелом внутри каждой микроструктурной фазы и вдоль межфазных границ может быть явно разрешен. Соответственно, анализы способны учитывать межкристаллический, а также внутригранулярный перелом.

The finite element meshes used have a uniform structure with ‘crosstriangle’ elements of equal dimensions arranged in a quadrilateral pattern (Fig. 5.7). This type of triangulation is used since it gives the maximum flexibility for resolving crack extensions and arbitrary fracture patterns. Because of the computational limitations and the requirement that stress wave reflections do not interfere with the analyses results, the microstructures are embedded in a uniform finite element mesh. The uniform mesh has elements with higher size increasing the overall size of the sample to delay the stress wave reflection and minimize its effect on dynamic fracture while simultaneously reducing the computational load. Since the crack propagation is limited to the microstructural window whose size had been analyzed in a previous research, the results are unaffected by the presence of the uniform mesh.

The dimensions for the microstructural region (7.5 μm 630 μm) are limited by the memory sizes of the supercomputers used. These regions are much larger than the length scales involved in all microstructures. Thus, reasonable representations of the microstructures are achieved. Material outside the microstructure window is assumed to be homogeneous and assigned effective properties representative of those for the SiC–Si3N4 ceramic composite. Computations are carried out for side-cracked samples under tensile loading. The length of the initial crack is ai= 9.0 μm.

Используемые сетки конечных элементов имеют однородную структуру с элементами «кросстриангуляции» с равными размерами, расположенными в четырехугольной структуре (рис.5.7). Этот тип триангуляции используется, поскольку он дает максимальную гибкость для расчета расширения трещин и произвольных структур трещин. Из-за вычислительных ограничений и требования, чтобы рефлексы волновых волн не мешали результатам анализа, микроструктуры встроены в единую сетку конечных элементов. Единая сетка имеет элементы с более высоким размером, увеличивающие общий размер образца, чтобы задержать отражение волны напряжений и минимизировать его влияние на динамический разрыв, одновременно уменьшая вычислительную нагрузку. Поскольку распространение трещины ограничено микроструктурным окном, размер которого был проанализирован в предыдущем исследовании, результаты не подвержены влиянию присутствия однородной сетки.

Размеры микроструктурной области (7,5 мкм 630 мкм) ограничены размерами памяти используемых суперкомпьютеров. Эти области намного больше масштабов длины, используемых во всех микроструктурах. Таким образом, достигаются разумные представления микроструктур. Материал вне окна микроструктуры считается однородным и имеет эффективные свойства, характерные для керамического композита карбид-силиконат. Вычисления проводят для образцов с боковыми трещинами под растягивающей нагрузкой. Длина начальной трещины равна ai = 9,0 мкм.

Tensile loading is applied by imposing velocity boundary conditions along the upper and the lower edges of the specimen in the direction shown in Fig. 5.7. The boundary velocity V0 (0.5 m/sec and 2 m/sec) is imposed on the bottom and top edges with a linear ramp from zero to V0 in the initial phase of loading. This represents the loading of the pre-crack by a tensile wave with a stress amplitude of σ = ρ\* CL\* V0 (ρ is homogeneous material density and CL is the homogeneous material longitudinal wave velocity) (14.3 MPa and 57.3 MPa at V0= 0.5 m/sec and 2 m/sec, respectively) and a linear ramp from zero to that value in the initial phase of loading. The specimen is stress free and at rest initially. Conditions of plain strain are assumed to prevail.

For the CFEM mesh and the bilinear cohesive law used, convergence analyses of the dependence of mesh element size on simulation results have been performed. Based on those analyses, we require the characteristic finite element size, h, to satisfy: 750 nm > h ≥ 30 nm. The upper limit is based on the minimum cohesive zone size estimate based on the properties listed in Table 5.1. The lower limit is based on the elimination of material softening because of the use of bilinear law with finite initial stiffness. The characteristic element size of 75 nm satisfies the convergence criterion.

Нагрузка на растяжение применяется путем введения граничных условий скорости вдоль верхнего и нижнего краев образца в направлении, показанном на рисунке 5.7. Граничная скорость V0 (0,5 м/с и 2 м/с) накладывается на нижнюю и верхнюю границы с линейной рампой от нуля до V0 в начальной фазе загрузки. Это представляет собой нагрузку предварительной трещины на растягивающую волну с амплитудой напряжения σ = ρ\* CL\*V0 (ρ - однородная плотность материала, CL - скорость продольных волн однородного материала) (14,3 МПа и 57,3 МПа при V0 = 0,5 м/с и 2 м/с, соответственно) и линейной рампой от нуля до этого значения в начальной фазе загрузки. Образец не подвергается напряжению и находится в состоянии покоя. Предполагается, что преобладают условия простой деформации.

Для сетки CFEM и используемого билинейного когезионного закона был проведен анализ конвергенции зависимости размера элемента сетки от результатов моделирования. На основе этих анализов мы требуем, чтобы характерный размер конечного элемента h удовлетворял: 750 нм> h ≥ 30 нм. Верхний предел основан на минимальной оценке размера когезионной зоны на основе свойств, перечисленных в таблице 5.1. Нижний предел основан на устранении размягчения материала из-за использования билинейного закона с конечной начальной жесткостью. Характерный размер элемента 75 нм удовлетворяет критерию сходимости.

**Molecular dynamics (MD) modeling**

The MD simulations described here were carried out under 3D conditions (using periodic boundary conditions (PBCs)). The focus of the analyses is on understanding the deformation mechanisms in the composites and on delineating the factors affecting their strength. The microstructures analyzed are shown in Fig. 5.8.

Six different atomistic morphologies were analyzed: M1 is a 10nm sized cubic single crystal Si3N4 block; M2 a 10 nm sized cubic bi-crystalline Si3N4 block; M3 is a microstructure based on M1 with a 3nm sized cylindrical inclusion; M4 is based on M1 with 6nm sized cylindrical inclusion; M5 is based on M2 with 3nm sized cylindrical inclusion; M6 is based on M2 with 6nm sized cylindrical inclusion. Because of the imposition of PBCs, microstructures M3 to M6 represent composites with second-phase SiC inclusions arranged periodically. Figure 5.8 also shows crack lengths in the analyzed nanocomposites.

The structures shown in Fig. 5.8 are three-dimensional. The structures were formed by placing SiC cylindrical particles in Si3N4 blocks with holes.

**Моделирование методом молекулярной динамики**

Моделирование методом МД, описанное здесь, проводилось в трехмерных условиях (с использованием периодических граничных условий (ПГУ)). Основное внимание в анализе уделяется пониманию механизмов деформации в композитах и определению факторов, влияющих на их прочность. Проанализированные микроструктуры показаны на рисунке 5.8.

Были проанализированы шесть различных атомистических морфологий: M1 представляет собой кубический монокристалл силиконата размером 10 нм; M2 - кубический бикристаллический блок силиконата размером 10 нм; M3 представляет собой микроструктуру на основе M1 с цилиндрическим включением размера 3 нм; M4 основан на M1 с цилиндрическим включением размера 6 нм; M5 основан на M2 с цилиндрическим включением размера 3 нм; M6 основан на M2 с цилиндрическим включением размера 6 нм. Из-за наложения ПГУ микроструктуры М3-М6 представляют собой композиты с включениями второй фазы карбида кремния, расположенными периодически. На рис. 5.8 также показаны длины трещин в анализируемых нанокомпозитах.

Структуры, показанные на рисунке 5.8, являются трехмерными. Структуры были сформированы путем размещения цилиндрических частиц карбида кремния в блоках силиконата с отверстиями.

Setting up of the SiC–Si3N4 interface in the structures can critically affect the internal stresses. In order to relieve any artificial internal stresses, first Si3N4 blocks with holes were prepared and equilibrated without the presence of the corresponding SiC cylindrical particles. SiC particles that are to be inserted in the Si3N4 holes were separately equilibrated as clusters. After equilibration, the Si3N4 block and the corresponding SiC particle were put together to form a SiC–Si3N4 composite. Then the composite structure was again equilibrated. A gap of 2A was ensured between the SiC particles and the corresponding Si3N4 block’s hole in order to prevent additional buildup of internal stresses. However, changing the gap did not influence the observed trends and results.

The composites were analyzed for crack propagation as well as for mechanical deformation without an initial crack. The mechanical deformation methodology is based on earlier work by the authors. The initial crack in the nanocomposites was defined by switching of interatomic interactions along the plane shown in Fig. 5.8. After that, mechanical deformation was applied and crack propagation visually followed and analyzed.

Установка межфазной структуры карбид кремния - силиконат может критически влиять на внутренние напряжения. Для снятия любых искусственных внутренних напряжений первые блоки силиконата с отверстиями были подготовлены и уравновешены без присутствия соответствующих цилиндрических частиц карбида кремния. Частицы карбида кремния, которые должны быть вставлены в отверстия силиконата, отдельно уравновешивались как кластеры. После уравновешивания блок силиконата и соответствующую частицу карбида кремния объединяли для образования композита карбид кремния - силиконат. Затем композитная структура снова уравновешивалась. Между частицами карбида кремния и соответствующим отверстием блока силиконата был обеспечен зазор в 2 ангстрем, чтобы предотвратить дополнительное наращивание внутренних напряжений. Однако изменение разрыва не повлияло на наблюдаемые тенденции и результаты.

Композиты были проанализированы на предмет распространения трещины, а также механической деформации без начальной трещины. Методика механической деформации основана на более ранних работах авторов. Начальная трещина в нанокомпозитах определялась переключением межатомных взаимодействий вдоль плоскости, показанной на рис. 5.8. После этого наносили механическую деформацию и визуально отслеживали распространение пробы и анализировали ее.

**Interatomic potential for SiC–Si3N4 material system**

Classical MD simulations of Si3N4+SiC material systems require an interatomic potential to describe Si–Si, Si–N, Si–C, N–N, C–C, and N–C interactions. The potential should be fitted to the properties of Si3N4, SiC and to an approximation to the interfacial transitions between these components. The silicon nitride family consists of two members, α and β. The higher symmetry β phase has a hexagonal lattice (space groups C26 h, N176) with a primitive cell containing two Si3N4 formula units (a=7.606A°, c=2.909 A°). The lower symmetry α phase is trigonal (space groups C43 v, N159) and has a primitive cell nearly twice as large (a=7.746A °, c=5.619A °) with twice as many atoms. Both structures consist of a Si3N4 tetrahedron forming a 3D network with each N corner common to three tetrahedra. Each NSi3 polyhedra has a pyramid-like form in the α phase, while the β phase can be regarded as being built of planar N2Si3 and nearly planar N1Si3 triangles with each Si corner common to four triangles that are oriented perpendicular to the direction (001) or along it. The interatomic potentials for the Si3N4 material system have been developed elsewhere. Fang et al. carried out investigations of phonon spectrum and thermal properties in cubic-Si3N4.

**Межатомный потенциал для системы материалов карбид кремния - силиконат**

Классическое моделирование методом МД систем силиконат + карбид кремния требует межатомный потенциал для описания взаимодействий: кремний - кремний, кремний - азот, кремний - углерод, азот - азот, углерод - углерод и азот - углерод. Потенциал должен быть приспособлен к свойствам силиконата, карбида кремния и к приближению межфазных переходов между этими компонентами. Семейство нитридов кремния состоит из двух элементов: α и β. Более высокая симметрия β-фазы имеет гексагональную решетку (пространственные группы C26 h, N176) с примитивной ячейкой, содержащей две единицы формулы силиконата (a = 7,606A°, c = 2,909 A°). Фаза нижней симметрии α тригональна (пространственные группы C43 v, N159) и имеет примитивную ячейку, почти в два раза большую (a = 7,746A °, c = 5,619A °) с вдвое большим числом атомов. Обе структуры состоят из тетраэдра силиконата, образующего трехмерную сеть с каждым N-углом, общим для трех тетраэдров. Каждый полиэдр имеет пирамидоподобную форму в α-фазе, а β-фазу можно рассматривать как построенный из планарных и почти плоских треугольников с каждым углом, общим для четырех треугольников, ориентированных перпендикулярно направлению (001) или вдоль него. Межатомные потенциалы для материальной системы силиконата были разработаны в другом месте. Fang и другие провели исследования фононного спектра и тепловых свойств в кубическом силиконате.

Of all the above approaches, the potential of Ching et al. was chosen to model β-Si3N4 because of its simplicity and ability to enable large-scale MD simulations. β-Si3N4 was chosen because of its relative abundance in comparison to the α form. Different polytypes of SiC exist at ambient pressure, which are differentiated by the stacking sequence of the tetrahedrally bonded Si–C bilayers. Among these polytypes, β-SiC (cubic-SiC) is of much interest for its electronic properties.

The majority of interatomic potentials developed for SiC material system focus on describing the material properties of β-SiC. We choose Tersoff’s bond order potential to model interatomic interactions in SiC. At the interface of SiC and Si3N4, we need to be able to describe Si–C, Si–Si, C–N, and Si–N interactions. Tersoff’s potential is useful only for describing the bulk Si–Si, C–C, and Si–C interactions. Accordingly, a pair potential form similar to that used for Si3N4 is sought to be used for interfacial interactions at the SiC–Si3N4 interfaces.

Из всех вышеперечисленных подходов, был выбран потенциал Чинга и других для моделирования β-силиконата из-за его простоты и способности позволять широкомасштабное моделирование МД. β-силиконат был выбран из-за его относительного изобилия по сравнению с α-формой. Различные политипы карбида кремния существуют при атмосферном давлении, которые изменяются с помощью укладки последовательности тетраэдрически связанных кремний – углерод - бислоев. Среди этих политипов β-карбид кремния (кубический карбид кремния) представляет большой интерес из-за его электронных свойств.

Большинство межатомных потенциалов, разработанных для системы материалов карбид кремния, фокусируются на описании свойств материала β-карбид кремния. Выбирается потенциал порядка связи Тэрсоффа для моделирования межатомных взаимодействий в карбиде кремния. На границе карбида кремния и силиконата должна быть возможность описывать взаимодействия кремний - углерод, кремний - кремний, углерод - азот и кремний - азот. Потенциал Терсоффа полезен только для описания объемных взаимодействий кремний - кремний, углерод - углерод и кремний - углерод. Соответственно, форму парного потенциала, подобную той, которая используется для силиконата, используется для межфазных взаимодействий на межфазном пространстве карбид кремния - силиконат.

**Conclusions**

This chapter has CFEM and MD based analyses to understand the effect of second-phase SiC particles on the strength of SiC–Si3N4 nanocomposites. CFEM analyses can explicitly account for the effect of nanoscale inclusions on the strength of nanocomposites. However, the CFEM cannot account for the effect of nanoscale size changes and nanoscale position changes on the strength of nanocomposites. MD analyses can be very useful to reveal this information, along with information on the effect of interfaces and the mechanism of deformation for certain specific orientations.

Overall, CFEM analyses demonstrated that, irrespective of the location of second-phase particles, the final failure mode in all microstructures is brittle fragmentation with initial microcracks forming and propagating mainly in the Si3N4 matrix. Later parts of brittle fragmentation include GB and SiC fragmentation. Second-phase particles have two important effects. If they are present in front of the crack tip they weaken the microstructure because of the stress concentration caused by them. However, if they are present near GBs, they cause a crack bridging effect with an increase in strength of the microstructure.

**Выводы**

В этой главе анализируются CFEM и MD, чтобы понять влияние частиц карбида кремния второй фазы на прочность нанокомпозитов карбид кремния-силиконат. Анализ CFEM может явно объяснить влияние наноразмерных включений на прочность нанокомпозитов. Однако CFEM не может объяснить влияние изменений нанометрового размера и изменений наноразмерных положений на прочность нанокомпозитов. Анализ МД может быть очень полезен для выявления этой информации, а также информации о влиянии межфазного пространства и механизма деформации для определенных конкретных ориентаций.

В целом, анализ CFEM показал, что независимо от расположения частиц второй фазы конечный режим отказа во всех микроструктурах представляет собой хрупкую фрагментацию с начальными микротрещинами, образующимися и распространяющимися главным образом в матрице силиконата. Поздние фрагменты хрупкой фрагментации включают фрагментацию ГЗ и карбида кремния. Частицы второй фазы имеют два важных эффекта. Если они присутствуют перед наконечником трещины, они ослабляют микроструктуру из-за вызванной ими концентрации напряжений. Однако, если они присутствуют вблизи ГЗ, они вызывают эффект разрушения трещины с увеличением прочности микроструктуры.

MD analyses also reveal that the second-phase particles act as significant stress raisers, resulting in strength reduction of single-crystal and bicrystalline Si3N4 blocks by a factor of almost two times. The stress concentration increases almost 1.5 times with doubling the size of SiC particles. With smaller SiC particles, the interfacial boundary in the bicrystalline Si3N4 block acts as a stress reliever. However, with an increase in the size of SiC particles and with a decrease in the spacing between adjacent SiC particles, the presence of an interfacial boundary results in significant internal stress rise. This indicates that the placement of SiC particles along interfacial boundaries will not always lead to strengthening of a SiC–Si3N4 nanocomposite. Overall, MD analyses confirm the CFEM findings concerning the effect of second-phase SiC particles on SiC–Si3N4 nanocomposite strength. In addition, the analyses also indicate that the strengthening of a nanocomposite by placing second-phase particles along grain boundaries is only possible for a selective few second-phase particle sizes with interparticle spacing being another important factor.

MD анализы также показывают, что частицы второй фазы действуют как значительные усилители напряжения, что приводит к уменьшению прочности монокристаллических и бикристаллических блоков силиконата почти в два раза. Концентрация напряжений возрастает почти в 1,5 раза при удвоении размера частиц карбида кремния. При меньших размерах частиц карбида кремния граница раздела фаз в бикристаллическом блоке силиконата действует как стресс-питчер (снижение напряжения). Однако при увеличении размера частиц карбида кремния и при уменьшении расстояния между соседними частицами карбида кремния наличие межфазной границы приводит к значительному увеличению внутреннего напряжения. Это указывает на то, что размещение частиц карбида кремния вдоль межфазных границ не всегда приведет к усилению нанокомпозита карбид кремния -силиконат. В целом, MD-анализы подтверждают результаты CFEM, касающиеся влияния частиц карбида кремния второй фазы на прочность нанокомпозита карбид кремния-силиконат. Кроме того, анализы также показывают, что усиление нанокомпозита путем размещения частиц второй фазы вдоль границ зерен возможно только для селективного небольшого размера частиц второй фазы с межчастичным расстоянием, являющимся еще одним важным фактором.