

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА, АРМИРОВАННОГО КОРОТКИМИ ВОЛОКНАМИ. УЧЁТ АДГЕЗИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Белов П.А*, Гордеев А.В.

**ООО «НИК», г.Москва
Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия*

Аннотация

В работе предлагается модель волокнистого композита, армированного одинаково ориентированными короткими включениями при растяжении в направлении армирования. Модель учитывает адгезию волокна и матрицы. Определение эффективных свойств осуществлено на основе приближенного аналитического решения в рамках процедуры В.З. Власова. Получено аналитическое соотношение для эффективного модуля эквивалентного гомогенного материала. Приводится сравнение результатов расчета эффективного модуля Юнга с результатами других авторов, полученных с использованием методов компьютерного моделирования. Анализируется возможность использования классических моделей теории упругости для моделирования адгезионных взаимодействий, влияющих на снижение эффективных модулей композитов, дисперсно-армированных короткими жесткими включениями (углеродными нанотрубками).

Введение

В настоящее время, в связи с развитием новых технологий производства наноразмерных включений и технологий получения композитов, на основе таких включений, возникла потребность в адекватном моделировании свойств композиционных материалов, модифицированных нановолокнами. Методы молекулярно-динамического моделирования [1] представляются приемлемыми для описания поведения таких композитов. К их недостаткам следует отнести многообразие сценариев моделирования, которые определяются субъективными пристрастиями исследователя, а также потребность в значительных вычислительных ресурсах, а также сложность применения подобных методов для инженерных вычислений. В этой связи представляют интерес расчетные схемы, основанные на методах механики сплошной среды. В данной работе предложена модель деформирования композита, допускающая приближенные аналитические решения и оценки механических параметров. Такие решения могут быть интересными с точки зрения анализа и проектирования. Одна из целей данного исследования связана с оценкой применимости классических моделей для расчета параметров композита и описания адгезионных эффектов, возникающих между волокном и матрицей.

1. Модель композиционного материала

Для построения математической модели среды композиционного материала и адекватного сравнения полученной модели с результатами эксперимента, рассмотрим фрагмент композита [1], который представляет собой волокно, окруженное матрицей. Рассматривается композит с малой объёмной долей включений, когда можно не учитывать их взаимное влияние.

Корректность замены цилиндрического волокна соответствующим слоем рассмотрена в [2].

1.1. Постановка задачи

Рассмотрим фрагмент композиционного материала с одинаково ориентированными волокнами, показанный на рис. 1. Для получения приближенных оценок рассматривается двумерная постановка. Считается, что фрагмент нагружается в направлении ориентации включений, как показано на рис. 2. Будем использовать также следующие упрощения. Полагаем, что вектор перемещений R_i ($i = 1, 2$) имеет единственную проекцию R - на ось волокна. Такую постановку задачи будем называть биплоской постановкой. Считается при этом, что нагружение композита в направлении армирования передается исключительно за счет продольных сдвигов.

Решение строится методом В.З. Власова. Будем обозначать индексом M , параметры, относящиеся к матрице, а индексом D - параметры, относящиеся к волокну (дефекту). Введем следующие обозначения: l - длина включения, $E_{M,D}, G_{M,G}$ - модуль Юнга и модуль сдвига, $h_{M,D}$ толщина слоя матрицы вокруг волокна и радиус волокна.

Рассмотрим биплоскую 2D-постановку в декартовой системе координат. В этом случае погонная плотность лагранжиана в отношении координаты Z имеет вид [2]:

$$L_z = A_z - \frac{1}{2} \iint \left\{ E \frac{\partial R}{\partial x} \frac{\partial R}{\partial x} + G \frac{\partial R}{\partial y} \frac{\partial R}{\partial y} \right\} dx dy - \frac{1}{2} \int_{-l/2}^{+l/2} \int_{-h_g/2}^{+h_g/2} G_g \left[\frac{(R_M(x, h_D + h_g/2) - R_D(x, h_D - h_g/2))}{h_g} \right]^2 dx dy \quad (1)$$

где G_g - модуль сдвига «клея», h_g - толщина «клеявого» слоя, $g = G_g / h_g$ - адгезионный модуль.

Последнее слагаемое в этом выражении можно трактовать как потенциальную энергию деформации сдвига фиктивного клеявого слоя.

При реализации метода В.З. Власова, распределение перемещений вдоль оси волокна задается в виде линейной функции от x $R(x, y) = xr(y)$. Тогда из (1) следует:

$$L_z = A_z - \frac{1}{2} \int_0^{h_D+h_M} [Elr + \frac{Gl^3}{12} r' r'] dy - \frac{1}{2} \frac{gl^3}{12} [r_M(h_D) - r_D(h_D)]^2 \quad (2)$$

Вариационное уравнение получено в соответствии с принципом Лагранжа из требования стационарности лагранжиана (2):

$$\begin{aligned} \delta L = & \int_0^{h_D} [P_D l - E_D l r_D + \frac{G_D l^3}{12} r_D''] \delta r_D dy + \int_{h_D}^{h_D+h_M} [P_M l - E_M l r_M + \frac{G_M l^3}{12} r_M''] \delta r_M dy + \\ & + \frac{l^3}{12} G_D r_D'(0) \delta r_D(0) + \frac{l^3}{12} [-G_D r_D'(h_D) - g r_D(h_D) + g r_M(h_D)] \delta r_D(h_D) + \\ & + \frac{l^3}{12} [G_M r_M'(h_D) - g r_M(h_D) + g r_D(h_D)] \delta r_M(h_D) - \frac{l^3}{12} G_M r_M'(h_D + h_M) \delta r_M(h_D + h_M) = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

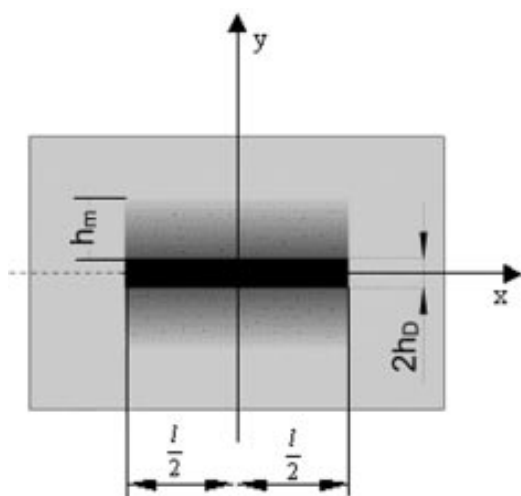


Рис. 1. Фрагмент композита с продольным расположением волокон

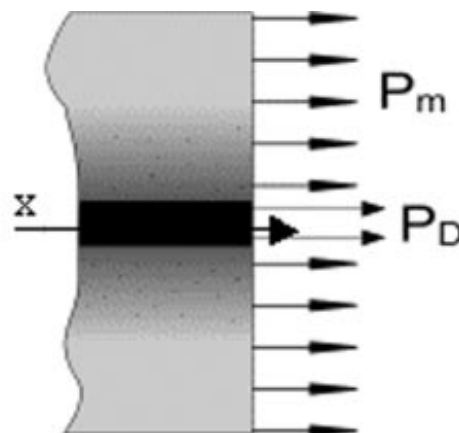


Рис. 2. Схема нагружения

Уравнения Эйлера, представляют собой дифференциальные неоднородные уравнения второго порядка вида:

$$P_{D,M} - E_{D,M} r_{D,M} + \frac{G_{D,M} l^2}{12} r''_{D,M} = 0 \quad (4)$$

Формулировка граничных условий вытекает из вариационного уравнения (3): касательные напряжения на оси симметрии волокна и на внешней границе матрицы равны нулю; касательные напряжения на границе контакта матрицы и волокна равны, разрыв перемещений на границе контакта пропорционален касательным напряжениям. Математическая формулировка граничных условий будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} r'_D(0) = 0 \\ r'_M(h_D + h_M) = 0 \\ G_M r'_M(h_D) - G_D r'_D(h_D) = 0 \\ \frac{1}{2} G_M r'_M(h_D) + \frac{1}{2} G_D r'_D(h_D) + g(r_D(h_D) - r_M(h_D)) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

В случае, когда $g \rightarrow \infty$ имеет место полный контакт волокна и матрицы, т.е. перемещения на границе раздела фаз равны: $r_D(h_D) = r_M(h_D)$.

В случае, когда $g \rightarrow 0$ волокно и матрица не взаимодействуют $G_M r'_M(h_D) = G_D r'_D(h_D) = 0$.

Введем обозначения:

$$b_{M,D} = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{12E_{M,D}}{G_{M,D}}} - \text{показатели затухания классического краевого эффекта;}$$

$$\beta_{M,D} = \frac{th(b_{M,D}h_{M,D})}{(b_{M,D}h_{M,D})} - \text{относительная объемная доля однородного состояния, } (1-\beta_{M,D}) -$$

относительная объемная доля краевых эффектов. Для ячейки с длинным волокном $\lim_{l \rightarrow \infty} \beta_{M,D} = 1$. В то же время $\lim_{l \rightarrow 0} \beta_{M,D} = 0$.

Общее решение контактной задачи (4)-(5) представлено в виде:

$$R(x, y) = xR_1(y) = x \begin{cases} \frac{P_D}{E_D} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right)C_{Db} \frac{chb_D y}{chb_D h_D} \\ \frac{P_M}{E_M} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right)C_{Mb} \frac{chb_M (y - h_M - h_D)}{chb_M h_M} \end{cases} \quad (6)$$

Система уравнений (5) относительно констант интегрирования принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{P_M}{E_M} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right)C_{Mb} = \frac{P_D}{E_D} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right)C_{Db} + \frac{1}{g} \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right)\tau \\ C_{Db} = \tau \frac{l^2}{12E_D\beta_D h_D} \\ C_{Mb} = -\tau \frac{l^2}{12E_M\beta_M h_M} \end{cases} \quad (7)$$

Решение для постоянных интегрирования:

$$\begin{aligned} C_{Db} &= \frac{E_M\beta_M h_M}{[E_D\beta_D h_D + E_M\beta_M h_M + \frac{12E_M\beta_M h_M E_D\beta_D h_D}{gl^2}]} \\ C_{Mb} &= -\frac{E_D\beta_D h_D}{[E_D\beta_D h_D + E_M\beta_M h_M + \frac{12E_M\beta_M h_M E_D\beta_D h_D}{gl^2}]} \end{aligned} \quad (8)$$

Подставляя (8) в (6), получим:

$$R(x, y) = xr(y) = x \begin{cases} \frac{P_D}{E_D} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right) \frac{E_M\beta_M h_M}{[E_D\beta_D h_D + E_M\beta_M h_M + \frac{12E_M\beta_M h_M E_D\beta_D h_D}{gl^2}]} \frac{chb_D y}{chb_D h_D} \\ \frac{P_M}{E_M} - \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D}\right) \frac{E_D\beta_D h_D}{[E_D\beta_D h_D + E_M\beta_M h_M + \frac{12E_M\beta_M h_M E_D\beta_D h_D}{gl^2}]} \frac{chb_M (y - h_M - h_D)}{chb_M h_M} \end{cases}.$$

1.2. Определение модуля Юнга эквивалентного материала

Вычислим потенциальную энергию составного фрагмента, используя теорему Клапейрона:

$$U = \frac{1}{2} l \int_0^{h_D+h_M} Pr(y) dy = \frac{1}{2} l P_D h_D \left[\frac{P_D}{E_D} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D} \right) C_{Db} \beta_D \right] + \frac{1}{2} l P_M h_M \left[\frac{P_M}{E_M} + \left(\frac{P_M}{E_M} - \frac{P_D}{E_D} \right) C_{Mb} \beta_M \right].$$

Положим $P_D = P_M = P$. Выражение для потенциальной энергии приобретает следующую форму:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} l P^2 \left[\frac{h_M}{E_M} + \frac{h_D}{E_D} + \left(\frac{1}{E_M} - \frac{1}{E_D} \right) (C_{Db} \beta_D h_D + C_{Mb} \beta_M h_M) \right] = \\ &= \frac{1}{2} l P^2 \left[\frac{h_M + (C_{Db} \beta_D h_D + C_{Mb} \beta_M h_M)}{E_M} + \frac{h_D - (C_{Db} \beta_D h_D + C_{Mb} \beta_M h_M)}{E_D} \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Чтобы найти модуль Юнга эффективного континуума, сравним потенциальную энергию рассмотренного составного фрагмента с потенциальной энергией эквивалентного однородного фрагмента с модулем E :

$$U_0 = \frac{1}{2} l (h_D + h_M) P^2 \frac{1}{E}.$$

Введем определение обменной объемной доли композита:

$$h_f = -(C_{Db} \beta_D h_D + C_{Mb} \beta_M h_M) = \frac{(E_D - E_M) \beta_D h_D \beta_M h_M}{[E_D \beta_D h_D + E_M \beta_M h_M + \frac{12 E_M \beta_M h_M E_D \beta_D h_D}{g l^2}]} \quad (10)$$

Из условия равенства потенциальных энергий для композита и эквивалентной однородной среды получим:

$$\frac{h_M + h_D}{E} = \frac{h_M - h_f}{E_M} + \frac{h_D + h_f}{E_D} \quad (11)$$

Из этого соотношения понятен физический смысл обменной объемной доли h_f - матрица «отдает» включению часть своей объемной доли.

Из (10)-(11) можно сделать следующие выводы:

1. При $g \rightarrow \infty$ величина обменной объемной доли h_f стремится снизу к величине, полученной при полном контакте, когда волокно не проскальзывает относительно матрицы [2].

2. При $g \rightarrow 0$ величина обменной объемной доли h_f стремится к нулю сверху и, соответственно, эффективный модуль стремится к величине, определяемой осреднением по Рейссу.

3. При $0 < g < \infty$ эффективный модуль будет удовлетворять неравенствам: $E_{\infty} < E < E_0$ для любой длины волокна. Соответственно, кривая зависимости эффективного модуля от длины волокна при конечном значении адгезионного модуля будет всегда лежать ниже кривой, для которой реализован полный контакт волокна и матрицы.

2. Результаты исследований

Применимость предложенной модели и достоверность полученных результатов проверяется сравнением результатов моделирования свойств композиционного материала SWNT/LaRC-SI (углеродная нанотрубка/полимер) с характеристиками того же материала, полученными при моделировании методами молекулярной динамики и микромеханического анализа, взятыми из работы [1]. Значения параметров модели те же, что и в [2].

2.1. Анализ полученных результатов

Кривые на рис. 3 демонстрируют зависимости осредненного модуля Юнга композита от длины включения при полном контакте. Приводятся также данные полученные с учётом адгезии и экспериментальные данные группы Одегарда [1].

Как видно из приведенных графиков, изменение параметра g позволяет описать различные условия взаимодействия матрицы и волокна. На рисунке показано, что полученные кривые при различных значениях адгезионного параметра $E_{\infty} < E < E_0$ лежат между кривой, определенной полным контактом, в постановке [2] и осреднением по Рейссу.

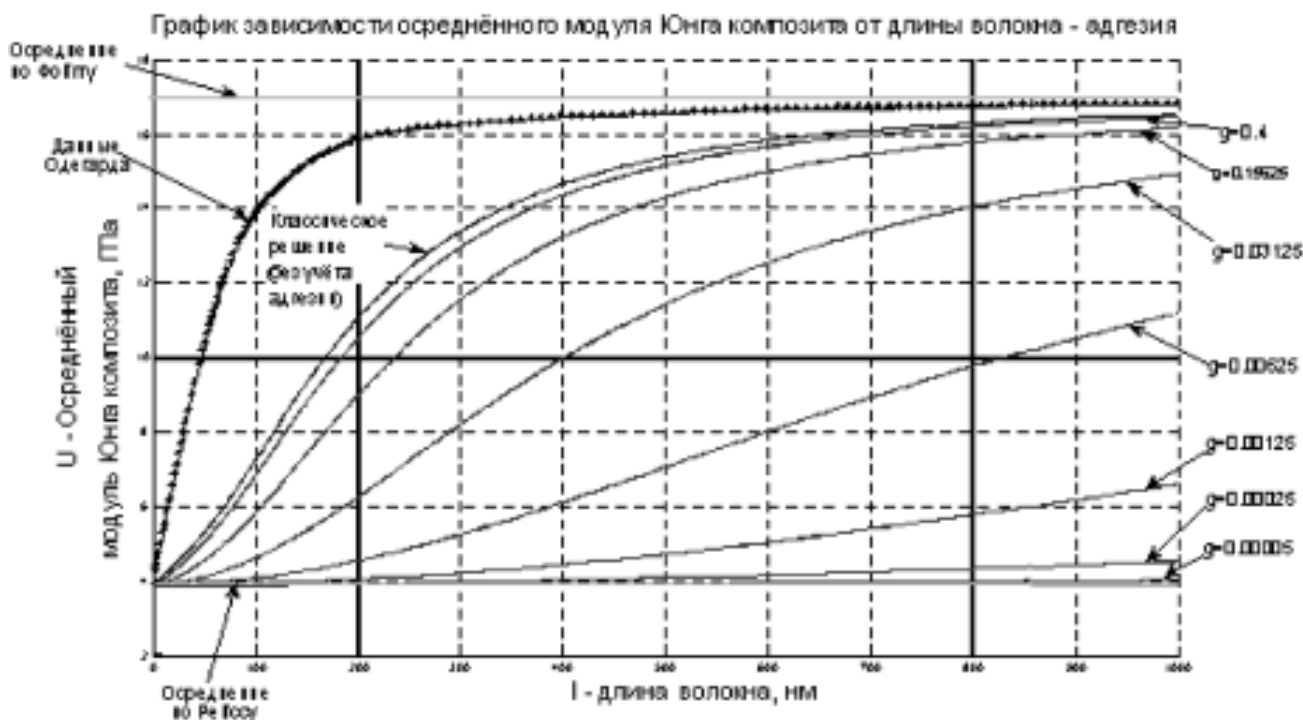


Рис. 3

3. Выводы

Полученная модель и ее решение позволяют сделать следующие выводы:

1. Адгезионный параметр g может играть роль параметра качества технологии изготовления композитов с короткими волокнами. Действительно, используя некоторые технологические приемы для повышения адгезии волокна к матрице (например, предварительно активируя поверхность волокон), можно добиться более высокого значения эффективного модуля композита при той же объёмной доле волокон. И наоборот, «загрязняя» поверхность волокон, можно свести эффект усиления к нулю, какая бы большая объёмная доля волокон не использовалась. Следовательно, при исследовании перспективных пар матрица-волокно следует иметь в виду возможность дополнительного увеличения эффективного модуля композита за счет целенаправленного увеличения адгезии волокна к матрице. Предложенная модель деформирования позволяет учесть эффект влияния адгезии как некоторую степень поврежденности границы контакта.

2. Если считать результаты исследований группы Одегарда соответствующими эксперименту, то результат, полученный в настоящей работе, не позволяет объяснить эффект аномального усиления, описанный в работе [1]. На наш взгляд, это связано не с недостатками предложенной модели, основанной на классической теории упругости, а с более общей проблемой - невозможностью классической теории упругости описать масштабные эффекты в теории композитов [3].

Библиографические ссылки

1. G.M. Odegard, T.S. Gates, K.E. Wise, C. Park, and E.J. Siochi. Constitutive modeling of anotube-reinforced polymer composites// National Aeronautics and Space Administration Langley Research Center, Hampton, VA 23681-2199.

2. Гордеев А.В. Моделирование свойств композиционного материала, армированного короткими волокнами//Механика композиционных материалов и конструкций, 2009 Т.15, №4

3. Белов П.А., Лурье С.А. «Континуальная модель микрогетерогенных сред»// ПММ, 2009. Т. 73, вып. 5., С.833-848.