МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА, АРМИРОВАННОГО КОРОТКИМИ ВОЛОКНАМИ. КОГЕЗИОННАЯ МОДЕЛЬ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ.

Белов П.А.*, Лурье С.А., Гордеев А.В.

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

РЕЗЮМЕ

В работе дается сравнительный анализ возможностей модели классической теории упругости и прикладной модели сред с сохраняющимися дислокациями дать соответствующий эксперименту прогноз свойств волокнистого композита при растяжении. Для обеих моделей выбирается одна и та же расчетная схема, так называемая биплоская 2D-постановка, которая реализуется методом В.З. Власова. Дается оценка эффективных свойств эквивалентного гомогенного материала; приводится сравнение результатов расчета эффективного модуля Юнга в рамках рассмотренных моделей с результатами других авторов.

В работах [2], [3] показано, что классическая модель не дает возможности моделирования свойств композита, соответствующим экспериментальным данным. И, напротив, предложенная в этой работе прикладная модель сред с сохраняющимися дислокациями (когезионная модель межфазного слоя), позволяет дать адекватный эксперименту прогноз эффективных свойств композита, что обусловлено учётом масштабных эффектов.

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 наиболее адекватными для описания поведения таких композитов, однако к недостаткам подобных методов следует отнести многообразие сценариев моделирования, которые определяются субъективными пристрастиями исследователя, потребность в значительных вычислительных ресурсах, а также сложность применения подобных методов для инженерных вычислений. В этой связи возникла потребность в простых инженерных методиках, основанных на методах механики сплошной среды. В данной работе будет предложена одна из таких моделей, построенная в рамках теории межфазного слоя [4]. Проведено сравнение с результатами, полученными с помощью моделей молекулярной динамики, а также сделаны выводы о применимости модели для расчетов параметров композита.

1. КОГЕЗИОННАЯ МОДЕЛЬ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ.

В работах [2-3] было показано, что классическая модель композита не позволяет получить результаты, подтвержденные экспериментом [1]. Положение не спасает ни учет краевых эффектов вдоль оси волокна, ни учет адгезионных взаимодействий между волокном и матрицей.

Поэтому, для описания композита полимерная матрица/нановолокно, в работе использована когезионная модель межфазного слоя [4]. Рассмотрим модель, учитывающую когезионные взаимодействия.

1.1. Постановка задачи.

Исходная постановка взята из работы [4]:

$$L = A - \frac{1}{2}\iiint [C^{11}_{ijnm}\frac{\partial R_n}{\partial x_m}\frac{\partial R_i}{\partial x_j} - 2C^{12}_{ijnm}\frac{\partial R_n}{\partial x_m}d^{\Xi}_{ij} + C^{22}_{ijnm}d^{\Xi}_{nm}d^{\Xi}_{ij} + C^{33}_{ijnm}\Xi_{ij}\Xi_{nm}]dV \qquad (1)$$

где:

R_i - вектор перемещений,

d^0_{ij} - тензор стесненной дисторсии (интегрируемой дисторсии) $\frac{\partial d^0_{in}}{\partial x_m}Э_{nmj} = 0$,

d^{Ξ}_{ij} - тензор свободной дисторсии (неинтегрируемой дисторсии) $\frac{\partial d^{\Xi}_{in}}{\partial x_m}Э_{nmj} \neq 0$,

$\Xi_{ij} = \frac{\partial d^{\Xi}_{in}}{\partial x_m}Э_{nmj}$ - тензор дислокаций Де Вита,

$C^{pq}_{ijnm} = \lambda^{pq}\delta_{ij}\delta_{nm} + (\mu^{pq} + \chi^{pq})\delta_{in}\delta_{jm} + (\mu^{pq} - \chi^{pq})\delta_{im}\delta_{jn}$ - тензоры модулей дефектной среды. Для построения прикладной градиентной модели используется обобщение гипотезы Аэро-Кувшинского:

$$d^{\Xi}_{ij} = a_{ijnm}\frac{\partial R_n}{\partial x_m}, \qquad (2)$$

где $a_{ijnm} = a\delta_{ij}\delta_{nm} + (b+c)\delta_{in}\delta_{jm} + (b-c)\delta_{im}\delta_{jn}$ - неклассические параметры дефектной среды, определяемые по компонентам тензоров C^{12}_{ijnm} и C^{22}_{ijnm}. Параметры $(2b+3a), b, c$ можно трактовать как «выключатели» трех типов дислокаций, введенных в [4]. Тензор Де Вита с учетом (2) принимает вид:

$$\Xi_{ij} = \frac{\partial d^{\Xi}_{in}}{\partial x_m}Э_{nmj} = \frac{\partial}{\partial x_m}(a_{inpq}\frac{\partial R_p}{\partial x_q})Э_{nmj} = a_{inpq}Э_{nmj}\frac{\partial^2 R_p}{\partial x_m \partial x_q} \qquad (3)$$

Подставляя (2) и (3) в лагранжиан (1), получим:

$$L = A - \frac{1}{2}\iiint \{[C^{11}_{pqrs} - 2(C^{12}_{ijrs}a_{ijpq}) + (C^{22}_{ijnm}a_{nmrs}a_{ijpq})]\frac{\partial R_r}{\partial x_s}\frac{\partial R_p}{\partial x_q} +$$

$$+ C^{33}_{ijnm}(a_{ipab}Э_{pcj}\frac{\partial^2 R_a}{\partial x_c \partial x_b})(a_{nqdf}Э_{qgm}\frac{\partial^2 R_d}{\partial x_g \partial x_f})\}dV$$

Введём обозначения:

$$C_{rspq} = C^{11}_{pqrs} - 2(C^{12}_{ijrs} a_{ijpq}) + (C^{22}_{ijnm} a_{nmrs} a_{ijpq}) = C_{pqrs}$$
$$C_{abcdfg} = C^{33}_{ijnm} a_{ipab} Э_{pcj} a_{nqdf} Э_{qgm} = C_{dfgabc} \qquad (4)$$

Тогда лагранжиан (1) приводится к виду лагранжиана среды Тупина [5]:

$$L = A - \frac{1}{2}\iiint [C_{ijnm} \frac{\partial R_i}{\partial x_j}\frac{\partial R_n}{\partial x_m} + C_{ijknml} \frac{\partial^2 R_i}{\partial x_k \partial x_j}\frac{\partial^2 R_n}{\partial x_l \partial x_m}] dV \qquad (5)$$

Полученное выражение для лагранжиана записано только относительно перемещений. Таким образом, и уравнения Эйлера и краевая задача будут сформулированы только относительно перемещений. После решения этой краевой задачи поле свободной дисторсии d^{Ξ}_{ij} и тензор плотности дислокаций Ξ_{ij} могут быть определены дифференцированием.

В общем случае тензор моментных модулей C_{ijknml} для сред Тупина содержит одиннадцать независимых модулей. В модели (5) их два. Можно упростить структуру тензора C_{ijknml}, вводя упрощающую «гипотезу пропорциональности» моментных модулей:

$$C_{ijknml} = \frac{1}{C} C_{rijk} C_{rnml} \qquad (6)$$

В результате, получена когезионная модель межфазного слоя, которая содержит лишь один неклассический механический параметр для каждой из фаз - параметр C.

1.2 Биплоская 2D постановка.

Рассмотрим фрагмент композиционного материала, показанный на рис.1. Этот фрагмент нагружается, как показано на рис. 2. Будем использовать 2D постановку биплоской задачи для лагранжиана L, в которой мы полагаем, что поле перемещений R_i имеет только одну компоненту R. Причем R - функция двух координат x, y. Корректность применения биплоской 2D-постановки рассмотрена в [2].

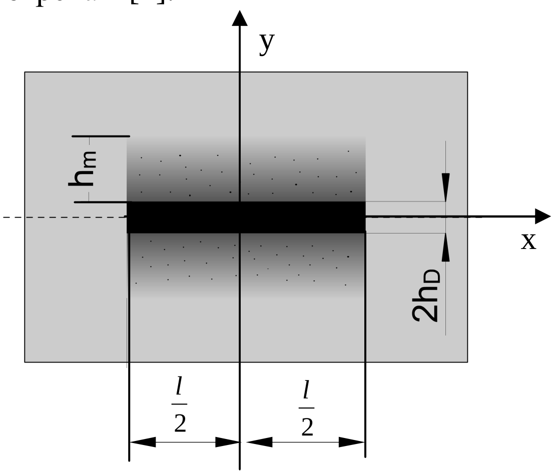

Рис. 1
Фрагмент композита
с продольным расположением
волокон

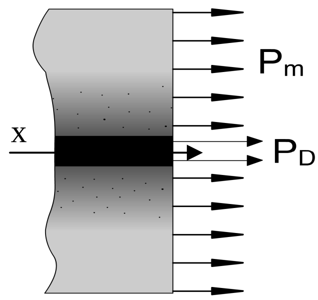

Рис. 2
Схема нагружения

Лагранжиан (5) с учетом (6) для биплоской 2D-постановки имеет вид:

$$L = A - \frac{1}{2}\iint \{E\frac{\partial R}{\partial x}\frac{\partial R}{\partial x} + G\frac{\partial R}{\partial y}\frac{\partial R}{\partial y} + \frac{1}{C}(E\frac{\partial^2 R}{\partial x \partial x} + G\frac{\partial^2 R}{\partial y \partial y})^2\}dxdy \tag{7}$$

Искомое решение так же, как и в [2-3], строится методом Власова, и распределение перемещений выбирается тоже в виде $R(x, y) = xr(y)$. Тогда лагранжиан (7) может быть преобразован к виду:

$$L = A - \frac{1}{2}\iint \{Err + Gx^2 r'r' + \frac{G^2}{C}x^2 r''r''\}dxdy$$

После внутреннего интегрирования по координате x, лагранжиан принимает вид:

$$L = A - \frac{1}{2}\int_0^{h_D+h_M} \{Elrr + \frac{Gl^3}{12}r'r' + \frac{G^2}{C}\frac{l^3}{12}r''r''\}dy \tag{8}$$

Вариационное уравнение получено в соответствии с принципом Лагранжа:

$$\begin{gathered}\delta L = l\int_0^{h_D+h_M} \{p - Er + G\frac{l^2}{12}r'' - \frac{G^2}{C}\frac{l^2}{12}r''''\}\delta r dy - \\ - l\{(G\frac{l^2}{12}\frac{G}{C}r'')\delta r' + (G\frac{l^2}{12}r' - \frac{G^2}{C}\frac{l^2}{12}r''')\delta r\}\Big|_{y=h_D} = 0\end{gathered} \tag{9}$$

Вариационное уравнение определяет соответствующие уравнения равновесия и весь спектр граничных условий. Уравнения равновесия являются неоднородными дифференциальными уравнениями четвертого порядка для каждой из фаз:

$$\frac{G^2}{C}\frac{l^2}{12}r'''' - G\frac{l^2}{12}r'' + Er = p \tag{10}$$

Внеинтегральные члены вариационного уравнения определяют граничные условия на осях симметрии волокна и матрицы, а так же условия контакта для волокна и для матрицы. Таким образом, формулировка граничных условий будет следующей:

$$G_D r_D'(0) = 0$$

$$G_D r_D'(0) - \frac{G_D^2}{C_D}r_D'''(0) = 0$$

$$\begin{cases} r_D(h_D) = r_M(h_D) \\ G_D r_D'(h_D) = G_M r_M'(h_D) \\ G_D r_D'(h_D) - \frac{G_D^2}{C_D}r_D'''(h_D) = G_M r_M'(h_D) - \frac{G_M^2}{C_M}r_M'''(h_D) \\ \frac{G_D}{C_D}r_D''(h_D) = \frac{G_M}{C_M}r_M''(h_D) \end{cases} \tag{11}$$

$$G_M r_M'(h_D + h_M) = 0$$

$$G_M r_M'(h_D + h_M) - \frac{G_M^2}{C_M}r_M'''(h_D + h_M) = 0$$

Характеристические уравнения для уравнений равновесия будут выглядеть следующим образом:

$$\left[\ \frac{G}{C}k^4 - k^2 + \frac{12E}{l^2 G}\ \right]_{D,M} = 0 \tag{12}$$

Корни характеристических уравнений имеют вид:

$$k_{1,2,3,4D,M}=\pm\sqrt{\frac{1\pm\sqrt{1-48\frac{E}{Cl^2}}}{2\frac{G}{C}}} \quad (13)$$

Обратим внимание на то, что первая пара корней характеристического уравнения приближенно совпадает с корнями характеристического уравнения классической постановки.

$$k_{1,2,3,4D,M}\approx\begin{cases}\pm\frac{1}{l}\sqrt{\frac{12E}{G}}=\pm b\\ \pm\sqrt{\frac{C}{G}}\end{cases}$$

Заметим, что корни становятся кратными, если $C=48E/l^2=4Gb^2$, а при $C<48E/l^2$ - комплексно- сопряженными. Приведем решение для случая, когда $k_{1,2,3,4D,M}=\pm\alpha_{D,M}\pm i\beta_{D,M}$ комплексно сопряжённые корни характеристического уравнения:

Для волокна $0\le y\le h_D$:

$$r_D(y)=\frac{P_D}{E_D}+C_{D1}ch(\alpha_D y)\cdot\cos(\beta_D y)+C_{D2}sh(\alpha_D y)\cdot\sin(\beta_D y)$$

Для матрицы $h_M\le y\le h_M+h_D$:

$$r_M(y)=\frac{P_M}{E_M}+C_{M1}ch(\alpha_M(y-h_M-h_D))\cdot\cos(\beta_M(y-h_M-h_D))+$$
$$+C_{M2}sh(\alpha_M(y-h_M-h_D))\cdot\sin(\beta_M(y-h_M-h_D))$$

Эта система уравнений позволяет определить постоянные интегрирования в решении дифференциальных уравнений $C_{D1},C_{D2},C_{M1},C_{M2}$ и построить решение в целом. Численно решая систему (11) относительно $C_{M1},C_{M2},C_{D1},C_{D2}$ были найдены искомые перемещения и напряжения композита.

1.3. Определение модуля Юнга эквивалентного материала

В соответствии с теоремой Клапейрона вычисление потенциальной энергии составного фрагмента дает:

$$U=\frac{1}{2}A=\frac{1}{2}l\int_0^{h_D+h_M}Pr(y)dy=$$
$$=\frac{1}{2}lP_D\int_0^{h_D}\left(\frac{P_D}{E_D}+C_{D1}ch(\alpha_D y)\cdot\cos(\beta_D y)+C_{D2}sh(\alpha_D y)\cdot\sin(\beta_D y)\right)dy+$$
$$+\frac{1}{2}lP_M\int_{h_D}^{h_D+h_M}\left(\frac{P_M}{E_M}+C_{M1}ch(\alpha_M(y-h_M-h_D))\cdot\cos(\beta_M(y-h_M-h_D))\right)dy+ \quad (14)$$
$$+\frac{1}{2}lP_M\int_{h_D}^{h_D+h_M}(C_{M2}sh(\alpha_M(y-h_M-h_D))\cdot\sin(\beta_M(y-h_M-h_D)))dy$$

Чтобы найти модуль Юнга эффективного континуума, сравним потенциальную энергию (14) с потенциальной энергией U_0 для эквивалентного гомогенного фрагмента с модулем E:

$$U_0 = 0{,}5l \cdot p_x^{\;2}\,(h_D + h_M)/E\,. \qquad (15)$$

Из равенства потенциальных энергий гомогенного эквивалентного материала (15) и фрагмента композиционного материала (14) получим выражение для модуля Юнга эффективного континуума E:

$$E = p_x\,(h_D + h_M)\Bigg/\Bigg[\int_0^{h_D}\left(\frac{P_D}{E_D} + C_{D1}ch(\alpha_D y)\cdot\cos(\beta_D y) + C_{D2}sh(\alpha_D y)\cdot\sin(\beta_D y)\right)dy +$$

$$+\int_{h_D}^{h_D+h_M}\left(\frac{P_M}{E_M} + C_{M1}ch(\alpha_M\,(y - h_M - h_D))\cdot\cos(\beta_M\,(y - h_M - h_D))\right)dy +$$

$$+\int_{h_D}^{h_D+h_M}\left(C_{M2}sh(\alpha_M\,(y - h_M - h_D))\cdot\sin(\beta_M\,(y - h_M - h_D))\right)dy\Bigg]$$

Далее, для нахождения значений эффективного модуля E, полученное уравнение решалось численно, поэтому аналитическая формула не приводится.

2.3 Анализ полученных результатов

Значения параметров модели выбраны аналогично [1-3]. Зависимость эффективного модуля от когезионного модуля волокна такова, что когезионный модуль жёсткой фазы практически не оказывает влияние на решение. Этот вывод соответствует выводу, полученному в [2]: «жесткая фаза выталкивает межфазный слой в матрицу». Зависимость эффективного модуля от когезионного модуля матрицы при этом существенна. На рисунке (рис.5) показана тенденция графика при изменении когезионного модуля матрицы. Когезионный модуль матрицы изменялся от 0,0001ГПа/нм^2 до 0,005ГПа/нм^2 с шагом 0,0007ГПа/нм^2, при этом с увеличением значения модуля, решение становилось все ближе и ближе к классическому. Как видно на рис.5, существуют такие значения когезионного модуля, при которых решение будет близко к значениям, полученным в работе [1].

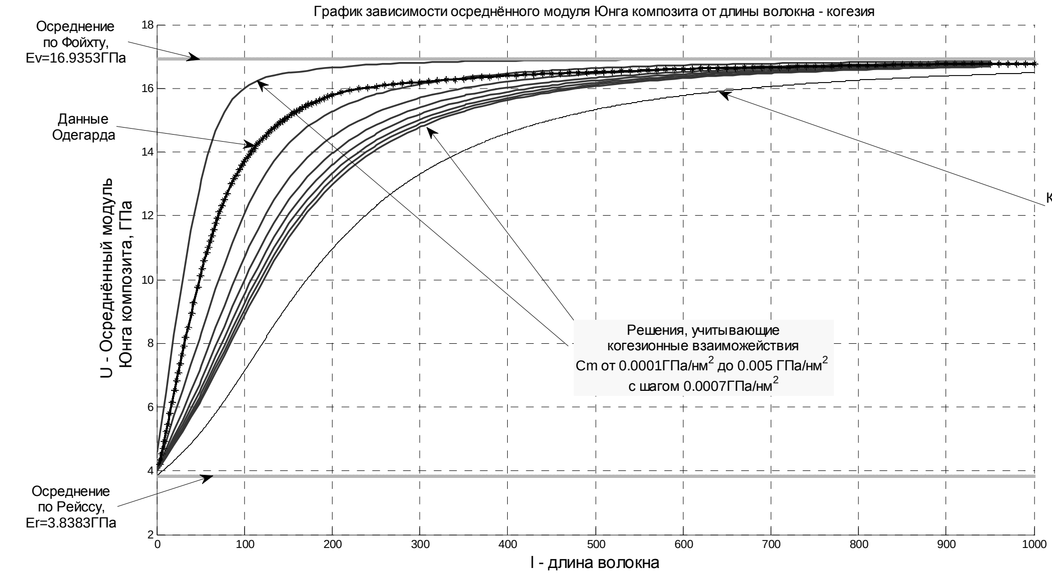

Рис. 5 (C_M от 0,0001 ГПа/нм^2 до 0,005ГПа/нм^2 с шагом 0,0007 ГПа/нм^2)

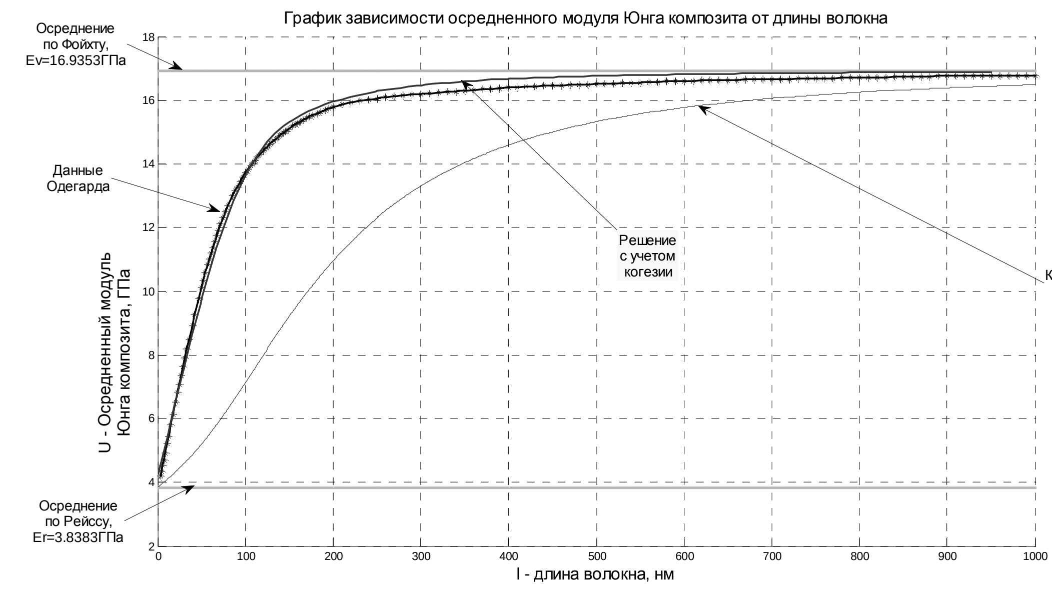

Рис.6 (C_M = 0,0004 ГПа/нм^2)

На рис. 6 показано решение, наиболее близкое к значениям, полученным группой Г.М. Одегарда в работе [1]. Этому решению соответствует когезионный модуль матрицы C_M =0,0004 ГПа/нм^2.

2. ВЫВОДЫ

Если считать результаты группы Одегарда соответствующими эксперименту, то можно сделать вывод о том, что классическая модель композита, не позволяет объяснить эффект усиления, описанный в работе [1]. Напротив, результат, полученный с использованием когезионной модели межфазного слоя, близок к экспериментальным данным. Анализируя полученные данные, можно говорить о том, что при одной и той же расчетной схеме (биплоская 2D-постановка) классическая модель не позволяет описать, а когезионная модель межфазного слоя успешно описывает эффект группы Одегарда.

ЛИТЕРАТУРА

1. G.M. Odegard, T.S. Gates, K.E. Wise, C. Park, and E.J. Siochi: Constitutive modeling of nanotube-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, 2010, Т.16, №1
3. Белов П.А., Лурье С.А., Гордеев А.В. Моделирование свойств композиционного материала, армированного короткими волокнами. Учёт адгезионнных взаимодействий волокна и матрицы//Композиты и наноструктуры, 2010, №1.
4. Лурье С.А., Белов П.А., Криволуцкая И.И. О некоторых классах моделей тонких структур// Конструкции из композиционных материалов, ВИМИ, 2000, вып.2, 29-40.
5. Toupin R.A. Elastic materials with couple-stresses//Arch. Ration. Mech. And Analysis, 1962, 11.