

О.К. Гаришин, А.Л. Свистков

Институт механики сплошных сред УрО РАН

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ СИЛИКАТНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ И ПОЛИОЛЕФИНОВОЙ МАТРИЦЫ

Abstract

The phenomenological model of the macro-isotropic medium describing its mechanical behavior at nonlinear elastic-plastic final deformations is constructed. The additive decomposition of the rate of deformation tensor in elastic and plastic parts is taken instead of multiplicative decomposition of a deformation gradient commonly used in the literature. One of the evident merits of the given technique is the ability to describe not only hardening of a material at plastic flow, but also its softening (that is a descending branch of a stress-strain curve). The given approach was used for concrete applications for description of mechanical properties of polymeric nano-composites consisting of a mix of filler particles of laminated clay minerals (smectites) and a polyolefine matrix. The received results have shown adequacy and effectiveness of the proposed model that opens good perspectives for its further development.

В данной работе предложена феноменологическая модель упруго-пластической среды, предназначенная для описания механических свойств материалов, способных испытывать значительные нелинейно-упругие и пластические деформации (до нескольких сотен процентов).

В работе использована идея Пальмова [1–3] об аддитивном разложении тензора скоростей деформирования среды, которое несовместимо с мультипликативным разложением деформационного градиента на упругую и пластическую составляющие (разложение Ли). Поэтому последнее в модели не использовали, и в определяющих уравнениях фигурирует только деформационный градиент всей среды \mathbf{F} . Для отдельных же элементов схемы это понятие в качестве внутренних переменных не рассматривается.

Двухэлементная дифференциально-феноменологическая модель упругопластической сплошной среды

При моделировании механического поведения материала с нелинейными упруго-пластическими свойствами использовали двухэлементную символьную схему, которая показана на рис. 1. В соответствии с этой схемой узел A определяет общее механическое поведение материала, B – связывает упругий и пластический элементы, C – неподвижно закреплен. Тогда для упругого (№ 1) и пластического (№ 2) элементов тензоры скоростей деформации будут равны,

$$\mathbf{D}_1 = \mathbf{D}_A - \mathbf{D}_B = \mathbf{D} - \mathbf{D}_2, \quad \mathbf{D}_2 = \mathbf{D}_B - \mathbf{D}_C, \quad (1)$$

где \mathbf{D} – тензор скоростей деформаций всей среды. В отличие от тензоров скоростей для элементов и внутренних узлов он может быть выражен через деформационный градиент среды \mathbf{F} . Симметричный тензор \mathbf{D} записывали в следующем виде [4]:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left[\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} + (\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1})^T \right], \quad (2)$$

где $\dot{\mathbf{F}}$ – материальная производная от \mathbf{F} по времени.

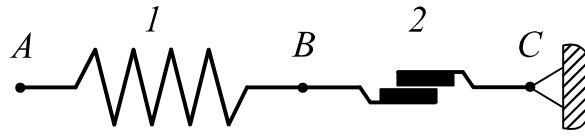


Рис. 1. Расчетная символьная схема упруго-пластической модели

В схеме последовательного соединения элементов напряжения (усилия) в них должны быть одинаковы. Следовательно, во всех элементах должен действовать один и тот же тензор напряжений \mathbf{T} :

$$\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2 = \mathbf{T}. \quad (3)$$

Механические свойства нелинейно-упругого элемента

Для вычисления тензора напряжений Коши в упругом элементе \mathbf{T}_1 использовали известные уравнения нелинейной теории упругости. Считали, что объем тела и температура в процессе деформации не меняются. Объемную плотность свободной энергии записывали в виде потенциала Трелоара w_T , который выражается через левый тензор растяжения упругого элемента \mathbf{V}_1 как

$$w_T = C_T (\text{tr } \mathbf{V}_1^2 - 3), \quad (4)$$

$$\mathbf{V}_1 = \sum_{k=1}^3 \lambda_k^{(1)} \mathbf{n}_k^{(1)} \otimes \mathbf{n}_k^{(1)}, \quad (5)$$

где C_T – это константа материала, которая по своему физическому смыслу равна 1/6 от начального модуля Юнга [5], $\mathbf{n}_k^{(1)}$ – ортонормированная тройка собственных векторов тензора \mathbf{V}_1 , $\lambda_k^{(1)}$ – соответствующие кратности удлинений (индекс элемента при компонентах указан в скобках, чтобы не путать с показателем степени). С учетом формул (3–5) можно записать следующее выражение для тензора напряжений:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_1 = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial w_T}{\partial \lambda_k^{(1)}} \lambda_k^{(1)} \mathbf{n}_k^{(1)} \otimes \mathbf{n}_k^{(1)} + p^{(1)} \mathbf{I} = 2C_T \mathbf{V}_1^2 + p^{(1)} \mathbf{I}, \quad (6)$$

где \mathbf{I} – единичный тензор, $p^{(1)}$ – неопределенный множитель Лагранжа, введенный для учета несжимаемости среды.

Деформацию нелинейно-упругого элемента определяли с помощью эволюционного уравнения (7) через материальную производную от левого тензора Коши – Грина $\mathbf{B}_1 = \mathbf{V}_1^2$.

$$\frac{D\mathbf{B}_1}{Dt} = \dot{\mathbf{B}}_1 + \mathbf{B}_1 \mathbf{W}_R - \mathbf{W}_R \mathbf{B}_1 = 2\mathbf{V}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{V}_1, \quad (7)$$

где $\mathbf{W}_R = -\mathbf{W}_R^T = \dot{\mathbf{R}} \mathbf{R}^T$, причем \mathbf{R} – это тензор поворота из полярного разложения деформационного градиента среды $\mathbf{F} = \mathbf{V} \mathbf{R}$. В соответствии с (7) материальную производную от тензора \mathbf{B}_1 вычисляли как

$$\dot{\mathbf{B}}_1 = \mathbf{B}_1 \mathbf{W}_R^T + \mathbf{W}_R \mathbf{B}_1 + 2\mathbf{V}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{V}_1. \quad (8)$$

Девиаторы тензоров напряжений и скоростей деформации рассчитывали по формулам (9) и (10) соответственно, причем в выражении (10) учтено, что в несжимаемой среде $\text{div } \mathbf{D}_1 = \mathbf{D}_1$, так как в этом случае $\text{tr } \mathbf{D}_1 \equiv 0$.

$$\text{dev } \mathbf{T} = \text{dev } \mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_1 - \frac{1}{3}(\text{tr } \mathbf{T}_1)\mathbf{I} = 2C_T \left[\mathbf{V}_1^2 - \left(\frac{1}{3} \text{tr } \mathbf{V}_1^2 \right) \mathbf{I} \right], \quad (9)$$

$$\text{dev } \mathbf{D}_1 = \mathbf{D}_1 - \frac{1}{3}(\text{tr } \mathbf{D}_1)\mathbf{I} = \mathbf{D}_1. \quad (10)$$

Механические свойства пластического элемента

По аналогии с основными уравнениями пластического течения Прандтля–Рейсса [6] связь между девиатором тензора напряжений Коши пластического элемента \mathbf{T}_2 и его тензором скоростей пластической деформации \mathbf{D}_2 записывали в виде

$$\text{dev } \mathbf{D}_2 = \sqrt{\frac{\text{dev } \mathbf{D}_2 \cdot \text{dev } \mathbf{D}_2}{\text{dev } \mathbf{T}_2 \cdot \text{dev } \mathbf{T}_2}} \text{dev } \mathbf{T}_2, \quad (11)$$

где $\text{dev } \mathbf{T}_2 = \mathbf{T}_2 - (1/3 \text{tr } \mathbf{T}_2)\mathbf{I}$, а $\text{dev } \mathbf{D}_2 = \mathbf{D}_2$, если рассматриваемая среда предполагается несжимаемой. Выражение (11) содержит неопределенность. Фактически это равенство двух векторов единичной длины в девятимерном векторном пространстве – $\text{dev } \mathbf{D}_2 / |\text{dev } \mathbf{D}_2| = \text{dev } \mathbf{T}_2 / |\text{dev } \mathbf{T}_2|$. Для раскрытия неопределенности была введена еще одна зависимость между \mathbf{D}_2 и \mathbf{D} , которую задавали в следующем виде:

$$\sqrt{\text{dev } \mathbf{D}_2 \cdot \text{dev } \mathbf{D}_2} = \kappa \sqrt{\text{dev } \mathbf{D} \cdot \text{dev } \mathbf{D}}, \quad (12)$$

где κ – неотрицательный параметр. Если $\kappa = 0$, то материал ведет себя как чисто упругий, при $0 < \kappa < 1$ – как упруго-пластический с упрочнением, случай когда $\kappa = 1$ соответствует идеальной пластичности и, наконец, при $\kappa > 1$ кривая нагружения становится ниспадающей, т.е. наблюдается разупрочнение материала. Из формулы (13) видно, что параметр κ связывает выражения, аналогичные классическим интенсивностям тензора напряжений или тензора малых деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}$ ($\sigma_{\text{int}} = \sqrt{3/2 \text{dev } \mathbf{T} \cdot \text{dev } \mathbf{T}}$, $\varepsilon_{\text{int}} = \sqrt{2/3 \text{dev } \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \text{dev } \boldsymbol{\varepsilon}}$). В модели этот параметр задавали через функцию текучести Φ_2 как

$$\kappa = \begin{cases} 0, & \Phi_2(\mathbf{V}, \dots) < q_2, \\ \zeta(q_2), & \Phi_2(\mathbf{V}, \dots) = q_2, \end{cases} \quad (13)$$

$$q_2 = \max \Phi_2(\mathbf{V}, \dots),$$

В выражении (13) фигурирует левый тензор растяжения для всей среды \mathbf{V} ,

$$\mathbf{V} = \sum_{k=1}^3 \lambda_k \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_k, \quad (14)$$

где λ_k – кратности удлинений для всего материала, \mathbf{n}_k – соответствующая ортонормированная тройка собственных векторов. Параметр q_2 – это аналог параметра упрочнения Одквиста из классической теории пластичности [7] (он характеризует накопленную пластическую деформацию). Считали, что функция текучести Φ_2 для пластического элемента, с помощью которой формируется критерий развития в среде пластических деформаций, зависит только от тензора \mathbf{V} (зависимости от других параметров состояния среды в этой работе не рассматривались). Пластическое деформирование среды происходит в том и только в том случае, когда Φ_2 имеет максимальное значение за всю предыдущую историю ее существования. В качестве Φ_2 был взят параметр V_{int} , введен-

ный по аналогии с ε_{int} (и названный соответственно интенсивностью тензора \mathbf{V}). В главных удлинениях выражение для Φ_2 имеет вид

$$\Phi_2 = V_{\text{int}} = \sqrt{\text{dev } \mathbf{V} \cdot \text{dev } \mathbf{V}} = (1/\sqrt{3}) \sqrt{(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + (\lambda_2 - \lambda_3)^2 + (\lambda_3 - \lambda_1)^2}. \quad (15)$$

Для одноосного растяжения несжимаемой среды формула (15) приводится к виду (λ – кратность удлинения вдоль оси растяжения)

$$V_{\text{int}} = \sqrt{2/3} (\lambda - 1/\sqrt{\lambda}). \quad (16)$$

Следовательно, для описания пластического поведения материала надо знать зависимость $\zeta(q_2)$. Ее получали из анализа экспериментальных кривых нагружения.

Алгоритм расчета

При расчетах моделировали одноосное растяжение образца из несжимаемого упруго-пластического материала вдоль первой оси прямоугольной декартовой системы координат, т. е. вектор \mathbf{n}_1 и орт первой оси совпадали по направлению. При таком нагружении все главные оси постоянны и одинаково направлены, следовательно, $\mathbf{W}_R = \mathbf{0}$. При нагружении модельного «образца» увеличивали его кратность удлинения вдоль первой оси от 1 до λ_{max} . В начальный момент времени $t = t_0$ $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1$ (в теле нет деформаций), при $t > t_0$ $\lambda_1 = \lambda$, $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda^{-1/2}$.

В соответствии с соотношением (1) символьной схемы на каждом шаге нагружения вычисляли тензор $\mathbf{D}_1 = \mathbf{D} - \mathbf{D}_2$ для упругого элемента, исходя из уже вычисленных на этом шаге тензоров скоростей деформации для пластического элемента \mathbf{D}_2 и для всей системы \mathbf{D} . Далее находили левый тензор Коши – Грина для упругого элемента $\mathbf{V}_1(t + dt)$ через значения, вычисленные на предыдущем шаге $\mathbf{V}_1(t)$,

$$\mathbf{V}_1(t + dt) = \mathbf{V}_1(t) + \dot{\mathbf{V}}_1 dt,$$

где $\mathbf{V}_1(t = t_0) = \mathbf{I}$, а $\dot{\mathbf{V}}_1 = 2\mathbf{V}_1\mathbf{D}_1\mathbf{V}_1$. Зная \mathbf{V}_1 , вычисляли $\mathbf{V}_1 = \mathbf{V}_1^{1/2}$, необходимый для определения тензора напряжений \mathbf{T} .

При расчете механических характеристик пластического элемента основная проблема упирается в определение вида зависимости параметра κ от функции текучести V_{int} . Эту зависимость определяли из анализа экспериментальных кривых нагружения материала следующим образом: вся исследуемая экспериментальная кривая разбивалась на $n-1$ участков с разделителями $\lambda = 1, \lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_n^*$. Из решения вышеописанной задачи на каждом отрезке $\lambda \in [\lambda_{i-1}^*, \lambda_i^*]$ подбирались такие значения κ_i^* , при которых можно добиться наилучшего совпадения опытных и расчетных данных. При одноосном нагружении между V_{int} и λ существует простая функциональная связь (16). Поэтому по полученным при обработке графика парам значений κ_i^* и λ_i^* можно построить искомую функцию (13), инвариантную к способу приложения нагрузки и которую уже можно использовать в определяющих соотношениях. Чем больше количество отрезков разбиения, тем точнее можно аппроксимировать экспериментальную кривую.

Полученные результаты

Предлагаемый подход был использован при моделировании упруго-пластического поведения нанокompозитов на основе полиолефинов и слоистых глинистых минералов (смектитов). Это перспективные материалы, сочетающие такие ценные качества, как

улучшенные эксплуатационные свойства, экологическую чистота и относительная дешевизна производства. В настоящее время они являются объектом интенсивных фундаментальных и прикладных исследований [8]. По своей структуре глинистые нанокompозиты представляет собой смесь множества тонких силикатных пластинок толщиной около 1 нм и поперечным размером от 30 нм до нескольких микрон, размещенных в полиолефиновой матрице. Эти частицы могут образовывать отдельные кристаллиты – тактоиды – из нескольких (порядка десятка) параллельно расположенных пластинок или располагаться по объему материала хаотично. В первом случае нанокompозиты называются интеркалированными, во втором – эксфолиированными.

Работы по синтезу и экспериментальному исследованию механических свойств таких композитных материалов были выполнены В.А. Герасиным и М.А. Гусевой в Институте нефтехимического синтеза РАН (Москва). Эти результаты были взяты как исходные опытные данные для теоретических исследований с помощью вышеописанного подхода. На рис. 2 представлены экспериментальные кривые одноосного растяжения для интеркалированных нанокompозитов с разным объемным наполнением ϕ . Наполнителем служил модифицированный натриевый монтмориллонит. В качестве полимерного связующего использовали полиэтилен высокой плотности.

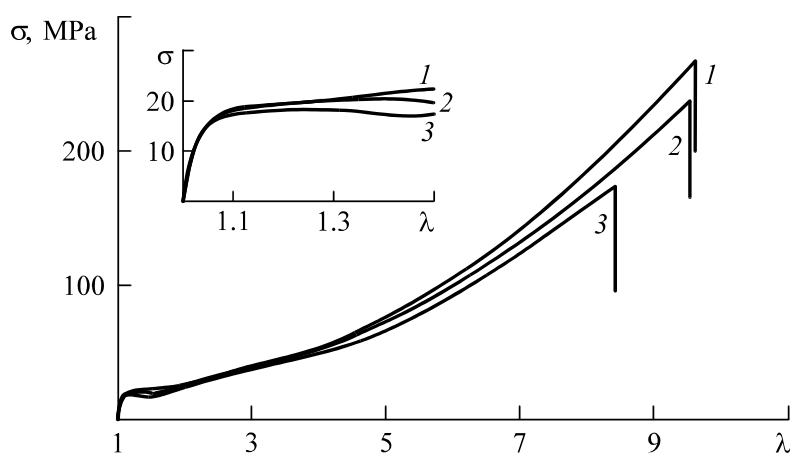


Рис. 2. Опытные кривые растяжения нанокompозитов типа «интеркалированный наполнитель в полиэтиленовой матрице»: σ – истинное напряжение, λ – кратность удлинения образца, 1 – $\phi = 0,0\%$, 2 – $11,61\%$, 3 – $18,95\%$

Анализ опытных данных и расчеты показали, что упругая константа в потенциале Трелоара C_T оказалась довольно слабо зависящей от наполнения. Ее значения лежали в диапазоне (80 ± 10) МПа, что соответствует начальному модулю примерно в 500 МПа.

На рис. 3 показаны зависимости параметра k от интенсивности тензора растяжения V , построенные с помощью данной модели для нанокompозитных систем с наполнителем интеркалированного типа. В случае одноосного растяжения V_{int} и λ связаны зависимостью (16), которая при достаточно больших удлинениях становится практически линейной.

Расчеты на модели показали, что для всех рассматриваемых в данной работе материалов чисто упругое деформирование наблюдалось только на самом начальном участке нагружения (при деформации не выше 1.5%). Потом происходило быстрое развитие пластического течения, что соответствовало резкому росту параметра k , стремившемуся к единице. При дальнейшем увеличении V_{int} значения k лежали поблизости друг от друга независимо от типа наполнителя и его концентрации. При более сильных растяжениях кривые $k(V_{int})$, соответствующие различным наполнениям, начинали расходиться, причем чем большее количество глинистых частиц содержал нанокompозит, тем выше лежали значения параметра k .

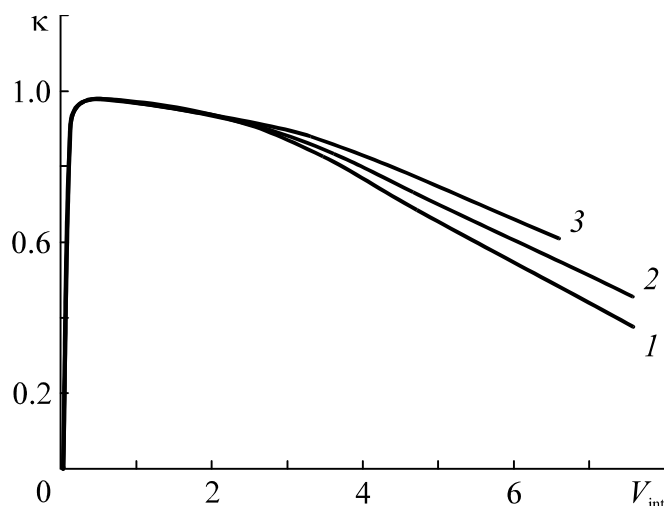


Рис. 3. Зависимость параметра κ от V_{int} для интеркалированных нанокompозитов:
 1 – $\varphi = 0\%$, 2 – 11,5%, 3 – 18,95%

В качестве возможных объяснений полученных результатов можно сделать следующие предположения.

1. Слабая зависимость начального модуля нанокompозита от наполнения объясняется тем, что упругие свойства материала формируются в первую очередь за счет деформирования ламелей в полиэтиленовой матрице, а частицы наполнителя на этот процесс особого влияния не оказывают.

2. Расхождение кривых $\kappa(V_{int})$ с разным наполнением при больших вытяжках можно объяснить тем, что ламели в полиэтиленовой матрице и интеркалированные пачки частиц достигают максимальной ориентации вдоль оси внешней вытяжки, т.е. дальнейшее течение материала происходит за счет изменения положения центров масс частиц. Отсюда и возникает зависимость κ от степени наполнения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Гранты № 05-08-33361 и № 06-03-32461).

Библиографический список

1. Пальмов, В.А. Колебания упруго-пластических тел / В.А. Пальмов. – М.: Наука, 1976. – 328 с.
2. Palmov, V.A. Large strains in viscoelastoplasticity / V.A. Palmov // Acta Mechanica. – 1997. – Vol. 125. – P. 129–139.
3. Palmov, V. A. Comparison of different approaches in viscoelastoplasticity for large strain / V.A. Palmov // ZAMM. – 2000. – Vol. 80. – P. 801–806.
4. Трусделл, К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред / К. Трусделл. – М.: Мир, 1975. – 592 с.
5. Гуль, В.Е. Структура и механические свойства полимеров / В.Е. Гуль, В.Н. Кулезнев. – М.: Высшая школа, 1972. – 320 с.
6. Рейсс, Э. Учет упругой деформации в теории пластичности / Э. Рейсс // Теория пластичности. – М.: ИЛ, 1948. – С. 202–222.
7. Одквист, Э. Упрочнение стали и подобных ей материалов / Э. Одквист // Теория пластичности. – М.: ИЛ, 1948. – С. 283–290.
8. Fengge, G. Clay/polymer composites: the story / G. Fengge // Materials Today. – 2004. – № 11. – P. 50–55.

Получено 5.07.2006.