УДК 539.3

С.А. Лурье, Ю.О. Соляев

Институт прикладной механики РАН (г. Москва)

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ЭШЕЛБИ В ЗАДАЧЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ СО СФЕРИЧЕСКИМИ МИКРО- И НАНОВКЛЮЧЕНИЯМИ

The modified Eshelby method for identification of effective properties of composites structures with scale and adhesion effects is developed. The three-phase method (Eshelby method) using integral Eshelby representations plays a fundamental role in the mechanics of composites, because it provides an effective tool for determining the averaged properties of filled composites. The proposed modification opens the possibility of using methods of estimates of the averaged characteristics of micro- and nanostructured materials in frames of gradient theories.

Интегральные соотношения Эшелби играют фундаментальную роль в механике композиционных материалов, так как являются эффективным инструментом при определении осредненных свойств дисперсно-наполненных композиционным материалов. Их использование, например, в рамках самосогласованного метода осреднения фактически дает окончательное и достаточно точное решение проблемы определения эффективных физико-механических свойств наполненных композитов вплоть до больших относительных содержаний включений и почти для всех соотношений характеристик фаз композита.

Метод трёх фаз (метод Эшелби) был предложен в работах [1–4] и рассматривался в работах [5–10]. В дальнейшем этот метод был распространён для любого числа слоёв сферических [6] и цилиндрических [3] включений. Оказалось, что метод интегральных условий согласованности, основанный на вычислении приращения энергии деформации (метод Эшелби), дает вполне адекватные результаты даже для больших объёмных долей включений [9]. Необходимость решения задач с многослойными включениями указана в работе [11]. Кроме этого в задачах с микро- и наноструктурами надо учитывать масштабные эффекты. Однако непосредственное использование градиентных моделей приводит к значительным сложностям, связанным с повышенным порядком разрешающих уравнений [12, 13].

В данной работе дается обобщение интегральных представлений Эшелби на градиентную теорию упругости путем развития приближенной схемы учета масштабных эффектов, а также поверхностных свойств на границе контакта фаз в композитном материале, армированном сферическими включениями. Тем самым открывается возможность использования эффективных методов оценок осредненных характеристик микро- и наноструктурированных материалов в рамках градиентных теорий, которые позволяют корректно учесть масштабные эффекты и поэтому находят все большие приложения при описании процессов механики и физики.

В данной работе предлагается использовать технологию метода трёх фаз, но в качестве характеристик промежуточного слоя подставлять характеристики межфазного слоя, полученные из решения одномерной задачи. Характеристики межфазного слоя на одномерном уровне учитывают масштабный эффект, так как в решении присутствует масштабный параметр, и межфазный слой затрагивает обе фазы. Задача в рамках предлагаемого метода содержит меньше параметров по сравнению с классической постановкой.

1. Описание модели

Для учёта изменённой морфологии контактирующих фаз в окрестности границ предлагается методика, основанная на реализации классической схемы, которая требует решения классической задачи о сферическом включении, погружённом в матрицу. С целью учёта специальных свойств межфазного слоя в направлении нормали к поверхности контакта фаз будем считать, что включение окружено дополнительным промежуточным (межфазным) слоем (рис. 1). Свойства этого дополнительного слоя будем определять из градиентного решения, построенного в рамках соответствующей одномерной задачи (растяжение или сдвиг). Для одномерной задачи градиентной теории упругости возможно аналитическое представление решения с учётом локальных эффектов, возникающих в окрестности границ, что, во-первых, существенно облегчает задачу определения свойств межфазного слоя и уменьшает число параметров задачи, а, во-вторых, обеспечивает аналитический учёт масштабных эффектов.

В связи с этим предлагается следующий алгоритм. Строится одномерное решение задачи градиентной теории упругости для составного фрагмента отдельно на растяжение и сдвиг. При этом в случае идеального контакта в задаче возникает один дополнительный параметр, определяющий протяжённость межфазного слоя. Проблема оценки эффективных свойств композита строится с использованием процедуры Эшелби для трехслойного включения. Для этого в исходном двухфазном фрагменте включение-матрица выделяется дополнительный промежуточный слой, обладающий собственным упругим модулем и размером (протяженность межфазного слоя – протяженность зоны измененной морфологии). Полученные из градиентной модели характеристики межфазного слоя подставляются в качестве характеристик межфазного слоя в трехслойном сферическом включении.

Для определения эффективных свойств композита используется предложенный Эшелби метод трёх фаз. В соответствии с этим методом будем считать, что вокруг многослойного включения и слоя матрицы находится внешний бесконечно протяженный слой, обладающий эффективными свойствами (рис. 1) рассматриваемого композита.

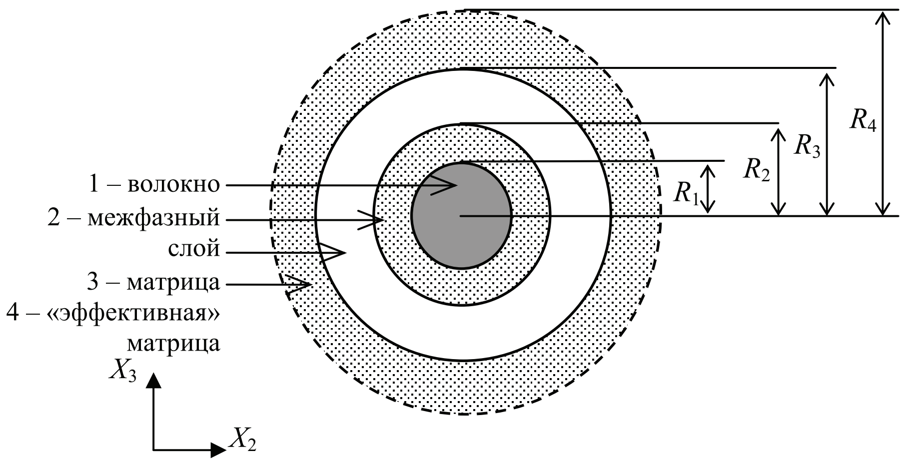

Рис. 1. Включение, окруженное дополнительным межфазным слоем

2. Оценка механических свойств межфазного слоя

Будем считать, что матрица и включения изотропны и для них известны значения модуля Юнга и модуля сдвига. Исходными параметрами задачи являются также ширина межфазного слоя (величина ($R_2 - R_1$), определяемая, как будет показано далее, через градиентный параметр C), объёмное содержание включений в матрице $f = \dfrac{R_1}{R_3}$ и радиус включения R_1. Требуется определить эффективный модуль Юнга композита и эффективный модуль сдвига. Для этого предварительно определим механические характеристики и ширину межфазного слоя из известных аналитических решений, полученных в рамках градиентной когезионно-адгезионной модели межфазного слоя [12, 13]. Будем считать, что средний слой в сферической задаче является изотропным, следовательно, для него требуется определить модули Юнга и сдвига и его ширину. Характеристики модели определяются из решения одномерной задачи на растяжение и на сдвиг.

Двухфазная модель в задаче на растяжение в рамках одномерной постановки градиентной модели (рис. 2) полностью определяется функционалом следующего вида:

$\delta L = 0$:

$$\delta L = \delta A_в - \int_0^{R_1} \left[E_1 r_1'' - \frac{E_1^2}{C} r_1^{\mathrm{IV}} \right] \delta r_1 \, dx + \int_{R_1}^{R_3} \left[E_3 r_3'' - \frac{E_3^2}{C} r_3^{\mathrm{IV}} \right] \delta r_3 \, dx -$$
$$- \left(E_1 r_1' - \frac{E_1^2}{C} r_1''' \right) \delta r_1 \Big|_{x=0}^{x=R_1} - \left(E_3 r_3' - \frac{E_3^2}{C} r_3''' \right) \delta r_3 \Big|_{x=R_1}^{x=R_3} - \qquad (1)$$
$$- \left(\frac{E_1^2}{C} r_1'' + A_1 r_1' \right) \delta r_1' \Big|_{x=0}^{x=R_1} - \left(\frac{E_3^2}{C} r_3'' + A_3 r_3' \right) \delta r_2' \Big|_{x=R_1}^{x=R_3},$$

где $\delta A_в$ – вариация работы внешних сил, $E_{1,2}$ – модули Юнга фаз, $E_{1,2} = \lambda_{1,2} + 2\mu_{1,2}$; r_1 – перемещения во включении, $r_1 = r_1(x)$; r_3 – перемещения в матрице, $r_3 = r_3(x)$; f – объемная доля включений; C – градиентный параметр модели, который характеризует протяжённость локального поля вблизи границы среды, вызванного, например, локальным изменением морфологии матрицы; $A_1 = A_3 = A$ – адгезионные параметры контактирующих поверхностей, которые можно считать равными, так в решении эти два параметра будут везде входить в виде суммы. В рамках данной постановки, параметр A будет определять степень повреждённости контакта между матрицей и включением [12, 13].

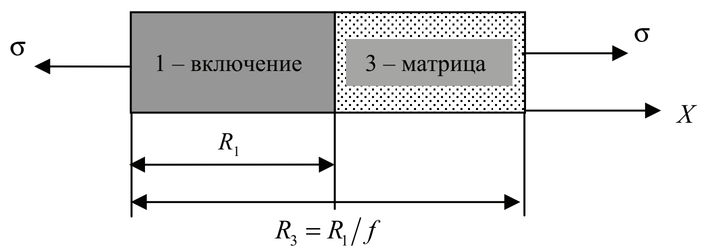

Рис. 2. Задача о растяжении двухфазного фрагмента в одномерной постановке

Градиентная модель (1) отличается от классической постановки задачи теории упругости повышенным (четвёртым) порядком разрешающих уравнений и расширенным списком естественных граничных условий. Краевая задача здесь содержит неклассические граничные условия при вариации производной от перемещений, которые по своему физическому смыслу являются условиями равенства градиентных силовых факторов – моментов и углов поворота на границе контакта. Используемая модель является следствием градиентной теории межфазного слоя, изложенной в работах [12, 13].

Можно показать, что эффективный модуль одномерного фрагмента без учёта адгезии ($A = 0$) может быть преобразован к следующему виду:

$$E_{eff} = \left\{ \frac{R_1(1-s_1)}{E_1} + \frac{(R_3-R_1)(1-s_3)}{E_3} + \frac{\left[s_1 R_1 + s_3(R_3-R_1)\right]}{E_f} \right\}^{-1},$$

где

$$E_f = \frac{E_3 a_1\ cth(a_1 R_1) + E_1 a_3\ cth\left(a_3(R_3-R_1)\right)}{a_1\ cth(a_1 R_1) + a_3\ cth\left(a_3(R_3-R_1)\right)}. \tag{2}$$

$$a_1 = \sqrt{\frac{C}{E_1}},\quad a_3 = \sqrt{\frac{C}{E_3}},$$

$$s_1 = \frac{th\,(a_1 R_1)}{a_1 R_1},\qquad s_3 = \frac{th\left(a_3(R_3-R_1)\right)}{a_3(R_3-R_1)}. \tag{3}$$

Отметим, что для эффективного модуля при $C \to \infty$ имеет место переход к классической формуле Рейса.

Величины s_1, s_3 имеют смысл протяжённости локального поля (межфазного слоя) в матрице и включении соответственно.

Модуль сдвига межфазного слоя G_2 определяется из решения, получаемого в рамках градиентной модели в задаче чистого сдвига двухфазного фрагмента:

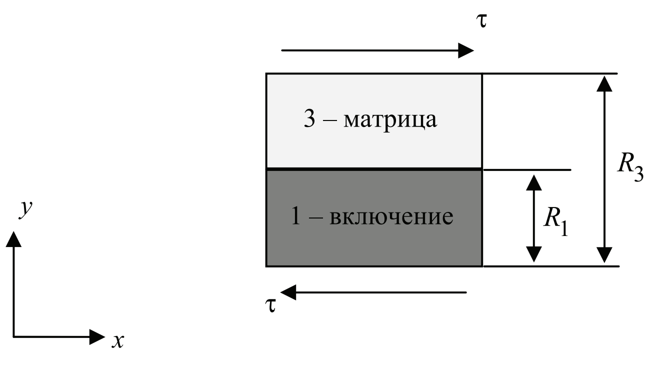

Рис. 3. Задача чистого сдвига двухфазного фрагмента
в одномерной постановке

Постановка задачи чистого сдвига (рис. 3) полностью аналогична постановке задачи о растяжении одномерного двухфазного фрагмента (1) при замене модулей Юнга на модули сдвига и перемещений на угловые перемещения. Кроме этого в задаче сдвига будет иным модуль адгезии.

Модуль сдвига межфазного слоя

$$G_f = \frac{G_3 b_1\ cth\left(b_1 R_1\right) + G_1 b_3\ cth\left(b_3\left(R_3 - R_1\right)\right)}{b_1\ cth\left(b_1 R_1\right) + b_3\ cth\left(b_3\left(R_3 - R_1\right)\right)}, \tag{4}$$

где G_1, G_3 – модули сдвига включения и матрицы, $b_1 = \sqrt{\frac{C}{G_1}}, \quad b_3 = \sqrt{\frac{C}{G_3}}.$

Протяжённость межфазного сдвигового слоя во включении и в матрице определяется по формулам:

$$d_1 = \frac{th\left(b_1 R_1\right)}{b_1 R_1},\ d_3 = \frac{th\left(b_3\left(R_3 - R_1\right)\right)}{b_3\left(R_3 - R_1\right)}. \tag{5}$$

Коэффициент Пуассона и объёмный модуль межфазного слоя определяются по классическим формулам:

$$\nu_f = \frac{E_f - 2G_f}{2G_f}, \quad k_f = \frac{E_f\, G_f}{9G_f - 3E_f}. \tag{6}$$

Все характеристики (модуль Юнга, модуль сдвига и ширина) межфазного слоя вычисляются через градиентный параметр *C*, модули упругости, матрицы, включения, объёмную долю включений и по адгезионным параметрам.

3. Определение эффективного модуля объемной деформации

Предполагается, что эффективная среда является изотропной и характеризуется двумя модулями. Решение этой проблемы рассматривается в [4, 6]. Для такой составной области (включение с четырьмя слоями) отдельно решаются задачи объёмной деформации и чисто сдвиговая задача для многослойных включений по методу Эшелби [6].

Рассмотрим последовательно эти решения. Решение для объёмной деформации дается в работе [6], где находится значение эффективного модуля объёмной деформации:

$$k_{\text{eff}} = k_3 + \frac{C_1}{C_2},$$

$$C_1 = \left(3k_3 + 4\mu_3\right)R_2^3\left(\left(k_1 - k_2\right)R_1^3\left(3k_3 + 4\mu_2\right) + \left(k_2 - k_3\right)R_2^3\left(3k_1 + 4\mu_2\right)\right), \tag{7}$$

$$C_2 = 3\left(k_2 - k_1\right)R_1^3\left(R_2^3\left(3k_3 + 4\mu_2\right) + 4R_3^3\left(\mu_3 - \mu_2\right)\right) +$$

$$+\left(3k_1 + 4\mu_2\right)R_2^3\left(3R_2^3\left(k_3 - k_2\right) + R_3^3\left(3k_2 + 4\mu_3\right)\right),$$

где k_{eff} – эффективный объёмный модуль композита; $k_1, k_2, k_3, \mu_1, \mu_2, \mu_3$ – объёмные модули и модули сдвига исходных компонентов; R_1, R_2, R_3 – радиусы включения, промежуточного слоя и матрицы соответственно.

В соответствии с предлагаемой методикой характеристики второго промежуточного слоя полностью определяются характеристиками межфазного слоя, полученными из одномерной задачи и соотношений (2–4):

$$k_2 = E_f,\ \mu_2 = G_f,\ R_2 - R_1 = s_1 + s_2. \tag{8}$$

В результате по формулам (7), (8) через геометрические и механические характеристики межфазного слоя определяется эффективный модуль объемного деформирования.

4. Определение эффективного модуля сдвига

Эффективный модуль сдвига μ_{eff} находится из соответствующего решения задачи о чистом сдвиге (см. [6]). Отметим, что в работе [6] приводятся прямые аналитические решение, но, по всей видимости, в этих соотношениях содержатся алгебраические ошибки. Поэтому воспользоваться этими соотношениями не удаётся. Повторим процедуру определения модуля сдвига, изложенную в работе.

Рассматривается задача чистого сдвига. Решение в сферических координатах (r, θ, φ) имеет вид:

$$\begin{gathered}
u_r^{(i)} = \left(A_i r - 6\frac{\nu_i}{1-2\nu_i} B_i r^3 + 3\frac{C_i}{r^4} + \frac{5-4\nu_i}{1-2\nu_i}\frac{D_i}{r^2} \right) \sin^2\theta \cdot \cos 2\varphi, \\
u_\theta^{(i)} = \left(A_i r - \frac{7-4\nu_i}{1-2\nu_i} B_i r^3 - 2\frac{C_i}{r^4} + 2\frac{D_i}{r^2} \right) \sin\theta \cdot \cos\theta \cdot \cos 2\varphi, \\
u_\varphi^{(i)} = -\left(A_i r - \frac{7-4\nu_i}{1-2\nu_i} B_i r^3 - 2\frac{C_i}{r^4} + 2\frac{D_i}{r^2} \right) \sin\theta \cdot \sin 2\varphi, \\
(i = 1 \ldots 4),
\end{gathered} \tag{9}$$

где A_i, B_i, C_i, D_i – неизвестные коэффициенты.

Чтобы решение оставалось регулярным во всех внутренних точках включения, необходимо принять: $C_1 = 0, D_1 = 0.$ На бесконечности задана единичная деформация сдвига. Во внешнем слое эффективной матрицы предполагается однородное поле напряжений, поэтому: $B_4 = 0, C_4 = 0,\ D_4 = 0.$

Условия контакта на всех граничных поверхностях слоистой структуры записываются следующим образом:

$$\begin{cases} u_r^{(i)}\left(R_i\right)=u_r^{(i+1)}\left(R_i\right), \\ u_\theta^{(i)}\left(R_i\right)=u_\theta^{(i+1)}\left(R_i\right), \\ \sigma_{rr}^{(i)}\left(R_i\right)=\sigma_{rr}^{(i+1)}\left(R_i\right), \\ \sigma_{r\theta}^{(i)}(R_i)=\sigma_{r\theta}^{(i+1)}(R_i), \end{cases} \quad i=1,2,3. \tag{10}$$

Для замыкания системы уравнений относительно неизвестных A_i, B_i, C_i D_i в (9) и модуля сдвига эффективной среды Эшелби предложил вычислять приращение энергии деформации, связанное с привнесением включения в однородный материал матрицы, полагая затем, что для эффективной среды это приращение энергии должно быть принято равным нулю. В рассматриваемом случае интегральное замыкающее соотношение Эшелби является нелинейным (квадратичным) и имеет следующий вид:

$$\begin{gathered} \int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \left(u_r^{(3)}\left(R_3\right)\sigma_{rr}^{(4)}\left(R_3\right)-u_r^{(4)}\left(R_3\right)\sigma_{rr}^{(3)}\left(R_3\right)+\right. \\ \left.+u_\theta^{(3)}\left(R_3\right)\sigma_{r\theta}^{(4)}\left(R_3\right)-u_\theta^{(4)}\left(R_3\right)\sigma_{r\theta}^{(3)}\left(R_3\right)\right)d\varphi\, d\theta=0. \end{gathered} \tag{11}$$

Подстановка решения (9) в граничные условия (10) и в соотношение Эшелби (11) даёт замкнутую систему уравнений относительно неизвестных констант и эффективного модуля сдвига. Все уравнения даются в аналитической форме, кроме замыкающего уравнения (11).

Модуль сдвига среднего слоя определяется через характеристики межфазного слоя из решения одномерной градиентной задачи по формулам (4–6):

$$\mu_2=G_f,\ \nu_2=\nu_f,\ R_2-R_1=d_1+d_2. \tag{12}$$

В результате решения системы (10)–(12) определяется эффективный модуль сдвига. Решение этой системы легко получить численно.

По известным значениям эффективного модуля объёмных деформаций и эффективного модуля сдвига определяется эффективный модуль Юнга композита по формуле

$$E_{\text{eff}}=\frac{9k_{\text{eff}}\,\mu_{\text{eff}}}{3k_{\text{eff}}+\mu_{\text{eff}}}.$$

Здесь важно следующее обстоятельство. В то время как в классическом подходе эффективные характеристики композита определяются только физическими модулями компонент и отношением радиусов слоёв, в предлагаемом модифицированном подходе эффективные характеристики зависят также от радиуса самого включения, как от параметра. Это определяется градиентным решением, использованным для определения характеристик межфазного слоя (E_f, G_f, s_1, s_2, d_1, d_2 зависят от радиуса включения).

Результаты и выводы

В качестве примера рассмотрим композит на основе эпоксидного связующего с наполнителем из стеклянной дроби $\left(E_1 = 85\text{ ГПа}, G_1 = 20\text{ ГПа},\right.$ $\left. E_3 = 3{,}5\text{ ГПа}, G_3 = 1\text{ ГПа}\right)$. На рис. 4 представлена зависимость эффективного модуля Юнга композита от объёмной доли включений в случае различных размеров включений. На рис. 5 продемонстрирована возможность учёта масштабных эффектов в рамках модели (зависимость от радиуса включений). И на рис. 6 представлен характер влияния адгезионных параметров модели на эффективный модуль Юнга.

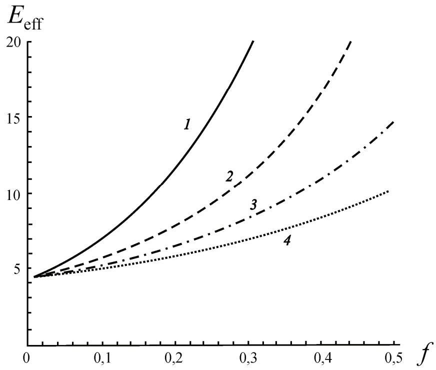

Рис. 4. Зависимость эффективного модуля Юнга от объёмного содержания включений при значении градиентного параметра $C = 0{,}01\ \text{Н}/\text{м}^3$: *1* – R_1 = 30 нм, *2* – R_1 = 60 нм, *3* – R_1 = 70 нм, *4* – R_1 = 70 нм, $C = \infty$ (классическое решение)

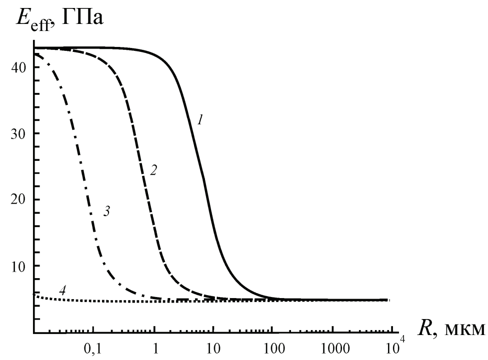

Рис. 5. Зависимость эффективного модуля Юнга от размера включений: *1* – $C = 0{,}01\ \text{Н}/\text{м}^3$, *2* – $C = 1\ \text{Н}/\text{м}^3$, *3* – $C = 100\ \text{Н}/\text{м}^3$, *4* – $C = \infty$ (классическое решение – нет зависимости от радиуса)

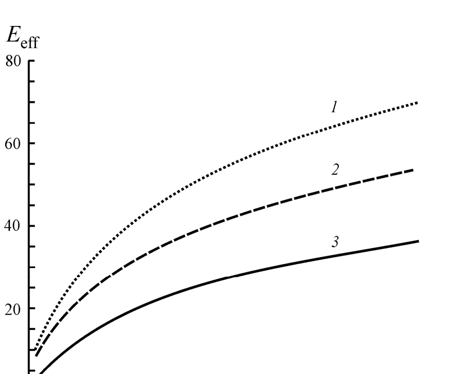

Рис. 6. Уменьшение эффективного модуля при учёте «повреждённой» адгезии (влияние параметра адгезии A): *1* – $A = 0$, *2* – $A = 20\ \text{Н}/\text{м}$, *3* – $A = 40\ \text{Н}/\text{м}$

Для сравнительной оценки предлагаемой методики сравним полученные результаты с результатами, найденными для модели композита с дополнительным слоем. В часто используемой модели с дополнительным слоем, без учёта адгезионных параметров, имеется три дополнительных параметра: модуль упругости, модуль сдвига и толщина слоя. Отметим, что встречаются работы (см. например, [11]), в которых для учета изменения морфологии матрицы в окрестности включения предлагается вводить дополнительные слои с трансверсально-изотропными свойствами. Это приводит к появлению дополнительных физических параметров и делает трудной проблему корректного решения задачи идентификации.

Предлагаемая же методика имеет всего один дополнительный градиентный параметр, что существенно упрощает решение задачи идентификации. Кроме того, имеет место качественное различие между решением проблем осреднения. Решение, полученное в рамках предлагаемой методики, позволяет учесть масштабный параметр (т.е. размер включений), что важно для сред с микро- и наноструктурой. Это решение дает аналитические зависимости характеристик межфазного слоя от масштабного параметра и фактически позволяет приближенно учитывать масштабные и адгезионные эффекты в рамках классической схемы Эшелби.

Достоинством предложенного подхода является также возможность учета адгезионных эффектов в рамках градиентных моделей межфазного слоя. Предложенная модель основана на синтезе метода Эшелби и градиентной модели и дает в результате распространение классической техники определения эффективных характеристик на задачи определения характеристик наноструктурированных сред, где масштабные параметры являются порой определяющими. Недостатком модели является то, что решение является, несомненно, приближённом. В частности, в межфазном слое не учитываются эффекты Пуассона. Несомненно, было бы интересным сравнить полученное решение с полным решением градиентной модели.

Предлагаемый подход очевидным образом обобщается на случай включений произвольной формы, в частности, предложенная процедура определения эффективных свойств оказывается весьма эффективной и даёт аналитические оценки в случае цилиндрических включений.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ N 09-01-00060, 09-01-13533-офиц и гранта П-21.

Библиографический список

1. Kerner E.H. The elastic and thermoelastic properties of composite media // Proc. Phys. Soc. – 1956. – Vol. 69. – P. 808.

2. Van der Pol C. On the rheology of concentrated dispersions // Rheol. Acta. – 1958. – Vol. 1. – P. 198.

3. Christensen R.M.. Lo K.H. Solutions for effective shear properties in three phase and cylinder models // J. Mech. And Phys. Solids. – 1979. – № 27. – P. 315–330.

4. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. – М: Мир, 1982. – 335 с.

5. Christensen R.M. Critical evaluation for a class of micro-mechanics models // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 1990. – Vol. 38, I. 3. – P. 379–404.

6. Herve E., Zaoui A. N-layered inclusion-based micromechanical modelling // Int. J. Engng Sci. – 1993. – Vol. 31, № 1. – P. l–10.

7. Christensen R.M. Two Theoretical Elasticity Micromechanics Models // Journal of Elasticity. – 1998. – Vol. 50, I. 1. – P. 15–25.

8. Zheng Q.-S., Du D.-X. An explicit and universally applicable estimate for the effective properties of multiphase composites which accounts for inclusion distribution // J. Mech. Phys. Solids. – 2001. – Vol. 49, № 11. – P. 2765–2788.

9. Christensen R.M. Two Theoretical Elasticity Micromechanics Models // Journal of Elasticity. – 1998. – Vol. 50, I. 1. – P. 15–25.

10. Gusev A.A., Lurie S.A. Loss amplification effect in multiphase materials with viscoelastic interfaces // Macromolecules. – 2009. – Vol. 42, I. 14. – P. 5372–5377.

11. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nanoinhomogeneities with interface stress / H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, B.L. Karihaloo // J. Mech. Phys. Solids – 2005. – Vol. 53. – P. 1574–1596.

12. Predicting the properties of micro- and nanocomposites: from the microwhiskers to the bristled nano-centipedes / I.A. Guz, A.A. Rodger, A.N. Guz, J.J. Rushchitsky // Phil. Trans. R. Soc. A – 2008. – Vol. 366. – P. 1827–1833.

13. Advanced theoretical and numerical multiscale modeling of cohesion/adhesion interactions in continuum mechanics and its applications for filled nanocomposites / S.A. Lurie, D.B. Volkov-Bogorodsky, V.I. Zubov, N.P. Tuchkova // Comp. Mat. Science – 2009. – Vol. 45, I. 3. – P. 709–714.

14. Лурье С.А., Белов П.А., Соляев Ю.О. Адгезионные взаимодействия в механике сплошных сред // Математическое моделирование систем и процессов: сб. науч. тр. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2008. – № 16. – С. 75–85.

Получено 12.07.2010