

УДК 539.3

© 2007 г. Ю.В. КУРОЧКИНА, Б.Е. ПОБЕДРЯ

ОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ В МЕХАНИКЕ НАНОКОМПОЗИТОВ

Рассматриваются композиты с компонентами, имеющими линейные размеры на порядок меньше, чем у других компонентов. Такие компоненты обычно называются нанокomпонентами. Экспериментально найти все материальные функции для компонентов с наноструктурой очень трудно, а иногда и невозможно. Предлагается способ вычисления этих материальных функций по известным эффективным характеристикам всего композита и характеристикам компонентов с наноструктурой. Приводится пример слоистого композита с изотропными упругими характеристики.

1. Введение. В последнее время широкое распространение получила так называемая нанотехнология. Некоторые авторы определяют ее как технику, основанную на манипуляции с отдельными атомами и молекулами для построения сложных структур [1]. В нанометровом масштабе возникают новые эффекты, которые описываются, в основном, квантовой механикой. Нанокomпозитами называются неоднородные конструкции, построенные методами нанотехнологии. Однако на бытовом уровне нанокomпозитами часто называют и макроконструкции, в которых отдельные компоненты по своим размерам на порядки меньше других компонентов композита. Примером таких нанокomпозитов могут служить системы “подложка-покрытие”, которые бывают и многослойными. Различают “жесткие” покрытия (когда их механические характеристики жестче характеристик подложки) и “мягкие” (когда их механические характеристики мягче характеристик подложки). Термомеханическое поведение “жестких” и “мягких” покрытий резко отличается друг от друга [2]. Их поведение также существенно зависит от технологии нанесения покрытия [3].

В данной работе остановимся на другом вопросе, важном при расчетах покрытий. Дело в том, что во многих случаях толщина этих покрытий на несколько порядков меньше толщины подложки. Поэтому их часто называют “нанопокрытиями”. Экспериментально определить механические свойства этих нанопокрытий очень трудно, а в большинстве случаев невозможно. На помощь могут прийти методы численного моделирования. Один из таких методов и обсуждается ниже.

2. Метод осреднения. Рассмотрим для простоты композит с упругими однородными компонентами [4]. Обозначим тензоры четвертого ранга модулей упругости каждого компонента $C^{(i)}$, где i – номер компонента. Пусть имеется α макрокомпонентов и β нанокomпонентов композита. Для макрокомпонентов будем считать известными все тензоры модулей упругости, которые инвариантны относительно некоторых групп преобразований [5]. Для нанокomпонентов будем считать также известными эти группы преобразований, но неизвестными численные значения этих модулей. Используя метод осреднения, подробно описанной в работе [4], можно аналитически или численно найти выражения тензора эффективных модулей упругости \mathbf{h} , инвариантного относительно группы преобразований, определяемой группами преобразований тензоров $C^{(i)}$.

Запишем условно этот тензор эффективных модулей упругости \mathbf{h} в виде тензорной функции

$$h = f(C^{(1)}, C^{(2)}, \dots, C^{(\alpha)}, C^{(\alpha+1)}, \dots, C^{(\alpha+\beta)}, \kappa_1, \dots, \kappa_n), \quad (2.1)$$

где $\kappa_1, \dots, \kappa_n$ – некоторые постоянные, определяющие структуру исследуемого композита.

Образуем какой-либо инвариант Inv тензора \mathbf{h} , например, его определитель. Обозначим этот инвариант через

$$D = \text{Inv}(h - f) \quad (2.2)$$

Пусть число независимых компонентов тензора модулей упругости $C^{(i)}$ нанокompонента i ($i = 1, 2, \dots, \beta$) равно q_i (обычно слово “компонент” композита мужского рода, а “компонента” вектора или тензора – женского).

Составим теперь систему $r = \sum_{i=1}^{\beta} q_i$ нелинейных алгебраических уравнений

$$\partial D / \partial C^{(1)} = 0, \quad \partial D / \partial C^{(2)} = 0, \quad \dots, \quad \partial D / \partial C^{(\beta)} = 0 \quad (2.3)$$

относительно r неизвестных. Эти уравнения можно решить любым пригодным для этой цели методом [6].

3. Пример решения. В качестве примера рассмотрим слоистый композит регулярной структуры, у которого “пакет” состоит из двух компонентов. Один из них – нанокompонент, другой – макрокомпонент. Положим, что каждый из этих компонентов является изотропным и рассмотрим плосконапряженное состояние. Тогда эффективный тензор модулей упругости будут зависеть от E_1 – модуля Юнга подложки, ν_1 – коэффициента Пуассона подложки, E_2 – модуля Юнга покрытия, ν_2 – коэффициента Пуассона покрытия и κ – толщины покрытия:

$$h_{ijkl} = h_{ijkl}(E_1, \nu_1, E_2, \nu_2, \kappa) \quad (3.1)$$

В этом случае эффективная (приведенная) среда является трансверсально изотропной, а тензор h_{ijkl} имеет четыре независимых компоненты [4]:

$$h_{1111} = [\kappa E_1 + (1 - \kappa)E_2] + \frac{[\kappa \nu_1 + (1 - \kappa)\nu_2]^2}{\kappa(1 - \nu_1^2)/E_1 + (1 - \kappa)(1 + \nu_2^2)/E_2} \quad (3.2)$$

$$h_{2222} = \frac{1}{\kappa(1 - \nu_1^2)/E_1 + (1 - \kappa)(1 + \nu_2^2)/E_2} \quad (3.3)$$

$$h_{1122} = \frac{[\kappa \nu_1 + (1 - \kappa)\nu_2]}{\kappa(1 - \nu_1^2)/E_1 + (1 - \kappa)(1 + \nu_2^2)/E_2} \quad (3.4)$$

$$h_{1212} = \frac{1}{2} \left[\kappa \frac{E_1}{1 + \nu_1} + (1 - \kappa) \frac{E_2}{1 + \nu_2} \right] \quad (3.5)$$

Считаем известными (определенными экспериментально) компоненты тензора модулей упругости h_{ijkl} , объемную концентрацию (толщину) покрытия κ , а также модуль

Юнга E_1 и коэффициент Пуассона ν_1 для подложки. Будем искать минимум выражения, составленного следующим образом:

$$D = \begin{vmatrix} h_{1111} & h_{1212} & 0 \\ h_{1212} & h_{2222} & 0 \\ 0 & 0 & h_{1122} \end{vmatrix} \quad (3.6)$$

Для этого составляем нелинейную систему уравнений

$$B_1 = \partial D / \partial E_2 = 0, \quad B_2 = \partial D / \partial \nu_2 = 0 \quad (3.7)$$

Решаем эту систему, используя метод Ньютона. Запишем исходную систему нелинейных уравнений $B_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = B(\bar{x}) = 0$ в виде

$$B(x^{(0)} - \Delta x) = 0, \quad (3.8)$$

где $x^{(0)}$ – некоторое приближение к корню \bar{x} , а $\Delta x = x - x^{(s)}$.

Разлагая эти уравнения в ряды и ограничиваясь первыми дифференциалами, т.е. линеаризуя функцию, получим

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial B_k(x^{(s)})}{\partial x_i} \Delta x_i^{(s)} = -B_k(x^{(s)}), \quad (i = 1, 2 \dots n) \quad (3.9)$$

или в матричной форме:

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial B_1}{\partial x_1} & \frac{\partial B_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial B_1}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial B_n}{\partial x_1} & \frac{\partial B_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial B_n}{\partial x_n} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \Delta x_1 \\ \dots \\ \Delta x_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -B_1 \\ \dots \\ -B_n \end{vmatrix}$$

Это система уравнений, линейных относительно приращения $\Delta x_i^{(s)}$. Все коэффициенты системы выражаются через последнее приближение $x^{(s)}$. Решив эту систему, найдем новое приближение $x^{(s+1)} = x^{(s)} + \Delta x^{(s)}$.

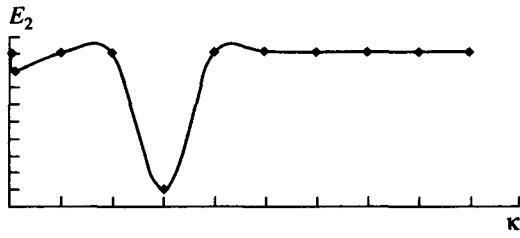
Алгоритм решения задачи обычный. Задается некоторая погрешность ε , вектор начальных приближений $x^{(0)}$ и в рассматриваемом случае значения для E_1, ν_1 и κ . В качестве начального приближения искомым значений возьмем $E_2 = E_1$ и $\nu_2 = \nu_1$. Затем решается система уравнений (12) относительно приращений Δx_j и вычисляется уточненное значение аргументов $x_{j,s+1} = x_{j,s} + \Delta x_j (j = 1, 2, \dots, n)$. Проверяется выполнение условий $|\Delta x_j / x_j| > \varepsilon$, если оно выполняется, то возвращаются к новой итерации.

Для жесткого покрытия при $E_1 = 675$ мПа, $\nu_1 = 0.32$ и $E_2 = 100000$ мПа, $\nu_2 = 0.31$ получим следующую зависимость от κ (см. фиг. 1, 2). Далее на всех графиках κ изменяется от 0 до 0.9. На фиг. 1 E_2 меняется от 999.9991 до 1000.0001, на фиг. 2 ν меняется от 0.309998 до 0.310014.

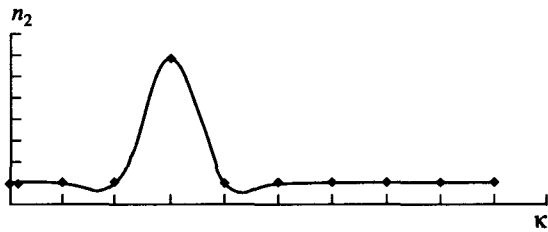
Для мягкого покрытия при $E_1 = 100000$ мПа, $\nu_1 = 0.32$ и $E_2 = 675$ МПа, $\nu_2 = 0.31$ получим зависимость от κ , показанную на фиг. 3, 4.

Здесь E_2 меняется от 674.9975 до 675.001, ν меняется от 0.3099985 до 0.3100035.

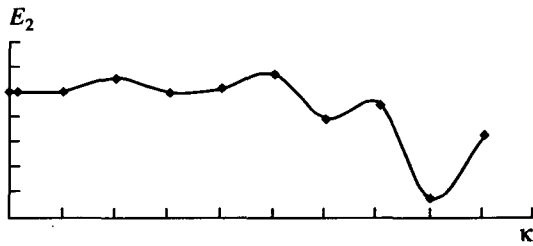
В качестве “инварианта” (3.6) можно выбрать и другое выражение. Положим, например, $h_i(x, y) = f_i$, где $h_1 = h_{1111}$, $h_2 = h_{2222}$, $h_3 = h_{1122}$, $h_4 = h_{1212}$ (см. (3.2)–(3.5)), а в качестве D вы-



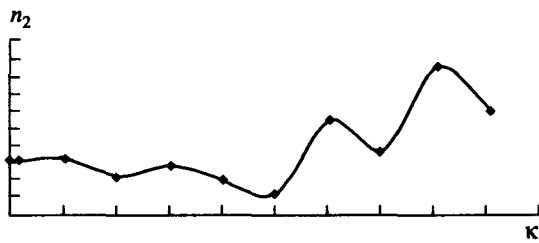
Фиг. 1



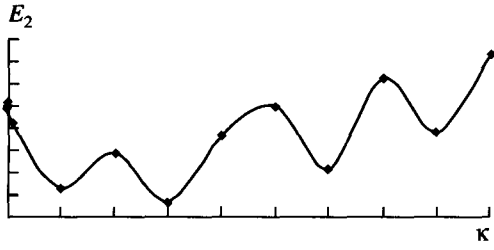
Фиг. 2



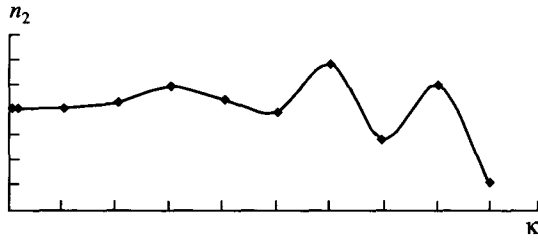
Фиг. 3



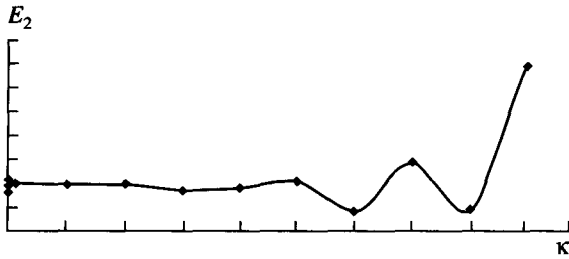
Фиг. 4



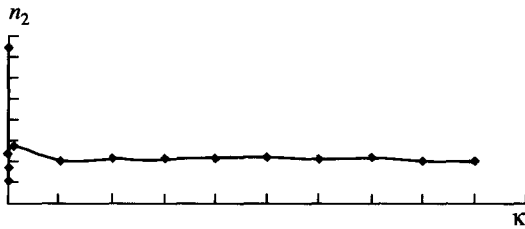
Фиг. 5



Фиг. 6



Фиг. 7



Фиг. 8

Таблица 1

к	E_1	ν_1	h_{1111}	h_{2222}	h_{1122}	h_{1212}
0.00000001	100000	0.32	746.765017	746.764	231.497	257.63396
0.1	100000	0.32	257.8	829.1	257.8	4019.7
0.2	100000	0.32	20630.7	931.8	290.7	7781.8
0.3	100000	0.32	30576	1063.75	332.954	11543.98
0.4	100000	0.32	40527.1679	1239.07	389.068	15306.095
0.5	100000	0.32	50484.70858	1483.58	467.329	19068.211
0.6	100000	0.32	60454.56883	1848.33	584.071	22830.327
0.7	100000	0.32	70448.78539	2450.88	776.929	26592.441
0.8	100000	0.32	80502.7207	3636.32	1156.35	30354.557
0.9	100000	0.32	90784.1771	7042.77	2246.64	34116.672

Таблица 2

к	E_1	ν_1	h_{1111}	h_{2222}	h_{1122}	h_{1212}
0.0001	675	0.32	110468.73	109038.49	33802.04	38164.15
0.001	675	0.32	109177.57	96527.53	29924.5	38130.03
0.01	675	0.32	103329.34	44951.118	13939.34	37788.82
0.1	675	0.32	90752.915	7086.5253	2203.909	343.7671
0.2	675	0.32	80491.327	3660.4995	1142.076	30585.49
0.3	675	0.32	70444.242	2467.5477	772.3424	26794.26
0.4	675	0.32	60453.49	1861.0381	584.366	230.0304
0.5	675	0.32	50485.728	1493.8564	470.5648	19211.81
0.6	675	0.32	40529.587	1247.6882	394.2695	15420.58
0.7	675	0.32	30580.142	1071.1729	339.5618	11629.36
0.8	675	0.32	20634.895	938.41198	298.415	7838.133
0.9	675	0.32	10692.466	834.93092	2.66343	4046.908

берем сумму квадратов $D = \sum_{i=1}^n (h_i - f_i)^2$. Используя тот же метод Ньютона, решим следующую систему уравнений:

$$B_1 = \frac{\partial D}{\partial E_2} = \sum_{i=1}^4 2(h_i - f_i) \frac{\partial h_i}{\partial E_2} = 0, \quad B_2 = \frac{\partial D}{\partial \nu_2} = \sum_{i=1}^4 2(h_i - f_i) \frac{\partial h_i}{\partial \nu_2} = 0$$

При ее решении для $E_1 = 675$ мПа, $\nu_1 = 0.32$ и $E_2 = 100000$ мПа, $\nu_2 = 0.31$ получим следующую зависимость от "объемного содержания" к, которая показана на фиг. 5, 6. Здесь E_2 меняется от 999.9999 до 1000.0003, ν меняется от 0.309999 до 0.31.

Для $E_1 = 100\ 000$ мПа, $\nu_1 = 0.32$ и $E_2 = 675$ мПа, $\nu_2 = 0.31$ получим следующие значения (см. фиг. 7, 8). Здесь E_2 меняется от 674.999 до 675.0006, ν меняется от 0.309998 до 0.3100015.

Как можно заметить из графиков, при различном выборе выражения (3.6) результат почти не меняется. Отметим также, что графики имеют условный характер и их “немонотонность” связана с тем, что тензор эффективных модулей для каждого значения k был выбран в соответствии с табл. 1 и 2.

Авторы благодарны С.В. Шешенину и П.Н. Демидовичу за предоставленную ими программу счета.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 05-01-00397а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Policy Research Project on Anticipating the Effect of New Technologies Assessing // Molecular and Atomic Scale Technologies (MAST). Austin, University of Texas, 1989.
2. *Вольнский А.Л., Баженов С.Л., Бакеев Н.Ф.* Структурно-механические аспекты деформации систем “жесткое покрытие на податливом основании” // *Росс. химич. ж.* 1998. Т. 42. № 3. С. 57–65.
3. *Шен М.* Вязкоупругая релаксация в полимерах. М.: Мир, 1974. 272 с.
4. *Победря Б.Е.* Механика композиционных материалов. М.: Изд-во МГУ, 1984. 336 с.
5. *Победря Б.Е.* Лекции по тензорному анализу. М.: Изд-во МГУ, 1986. 264 с.
6. *Победря Б.Е.* Численные методы в теории упругости и пластичности. М.: Изд-во МГУ, 1995. 366 с.

Москва

Поступила в редакцию
15.03.2007