

НАНОТЕХНОЛОГИИ

УДК 678.5.046

© А.А. ДУДЧЕНКО, С.А. ЛУРЬЕ, Н.П. ШУМОВА, 2009

ОСОБЕННОСТИ СВОЙСТВ МАТРИЦЫ В ОКРЕСТНОСТИ ЖЕСТКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

Александр Александрович ДУДЧЕНКО родился в 1937 г. в городе Казани. Профессор МАИ. Доктор технических наук, профессор. Основные научные интересы — в области методов расчета и проектирования конструкций из композиционных материалов, механики нанокompозитов. Автор более 90 научных работ. E-mail: a_dudchenko@mail.ru

Alexander A. DUDCHENKO, D.Sci, was born in 1937, in Kazan. He is a Professor at the MAI. His research interests are in design and analysis techniques for structures made of composite materials as well as in mechanics of nanocomposites. He has published over 90 technical papers. E-mail: a_dudchenko@mail.ru

Сергей Альбертович ЛУРЬЕ родился в 1948 г. в поселке Бухта Кожевникова Красноярского края. Главный научный сотрудник ИПРИМ РАН. Доктор технических наук, профессор. Основные научные интересы — в области моделирования свойств механики твердого деформированного тела, микро- и наномеханики. Автор более 170 научных работ. E-mail: lurie@ccas.ru

Sergey A. LURIE, D.Sci, was born in 1948, in the Krasnoyarsk Territory. He is a Major Research Associate at the Institute for Applied Mechanics (IPRIM) of the Russian Academy of Sciences. His research interests are in modeling of deformable solid bodies mechanics, micromechanics and nanomechanics. He has published more than 170 technical papers. E-mail: lurie@ccas.ru

Надежда Павловна ШУМОВА родилась в поселке Удельная Московской области. Старший научный сотрудник МАИ. Основные научные интересы — в области методов расчета и проектирования конструкций из композиционных материалов, механики нанокompозитов. Автор 25 научных работ. E-mail: a_dudchenko@mail.ru

Nadezhda P. SHUMOVA, was born in the Moscow Region. She is a Senior Research Associate at the MAI. Her research interests are in design and analysis techniques for structures made of composite materials as well as in mechanics of nanocomposites. She has published 25 technical papers. E-mail: a_dudchenko@mail.ru

Рассматривается построение формул для описания изменения модуля упругости в окрестности частицы с учетом их размера и расположения на основании расчетных методик, приведенных в статье [1], где дано построение модели межфазного слоя материала с жесткими включениями при действии растягивающей нагрузки. Здесь приводится определение переменного значения коэффициента Пуассона, модуля сдвига, оценка прочности матрицы в прилегающей к частице зоне.

Analytical expressions are derived to describe changes of elastic modulus for a media in the neighborhood of rigid nanoparticles taking into account their sizes and arrangement. These expressions are based on previous results related to a model of interphase material layer with rigid inclusions under tensile loads. Estimations are suggested for varying values of the Poisson ratio, and shear modulus as well as for a strength of resin in area adjoining to the particle.

Ключевые слова: наночастица, связующее (матрица), межфазный слой, модуль упругости, коэффициент Пуассона.

Key words: nanoparticle, resin, interphase layer, modulus of elasticity, Poisson ratio.

В предлагаемой работе рассматривается развитие расчетных методик, приведенных в статье [1], где дано построение модели межфазного слоя материала с жесткими включениями при действии растягивающей нагрузки, получены формулы для описания изменения модуля упругости в окрестности частицы с учетом их размера и расположения. Здесь приводится определение переменного значения коэффициента Пуассона, модуля сдвига, оценка прочности матрицы в прилегающей к частице зоне. Принимаем, что коэффициент Пуассона изменяется обратно пропорционально модулю упругости от значения μ_2 около жесткой частицы до значения μ_1 вне зоны влияния этой частицы по формуле

$$\mu(x, y) = e / \hat{E}_x(x, y),$$

где $\hat{E}_x(x, y)$ — безразмерная функция, соответствующая изменению модуля упругости по мере удаления материала от частицы и имеющая вид

$$\hat{E}_x = \frac{(\bar{E} - 1)}{\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y+a}{\alpha x} - \operatorname{arctg} \frac{y-a}{\alpha x} \right] + 1;$$

e — подобранная величина, которая дает значение коэффициента $\mu = \mu_1$ вне межфазной зоны и автоматически дает значение коэффициента μ_2 около частицы;

α — коэффициент, учитывающий размер локальной зоны около включения и определяющий локальные взаимодействия в окрестности границ контакта частицы с матрицей.

Подобные локальные взаимодействия будем связывать с когезионными взаимодействиями в матрице. Будем считать, что матрица остается изотропной по своим свойствам в каждой её точке. Тогда модуль сдвига G для изотропного материала будет определен по известной формуле

$$G = \frac{E_x}{2(1 + \mu)},$$

где E_x — модуль упругости материала, закон изменения которого был получен в работе [1].

Характер изменения безразмерной части модуля упругости $\tilde{E}_x(x, y) = \hat{E}_x = \left[\operatorname{arctg} \frac{y+a}{\alpha x} - \operatorname{arctg} \frac{y-a}{\alpha x} \right]$, коэффициента Пуассона в окрестности наночастицы (рис. 1 и 2) показаны на рис. 3 и 4 от сторон ab и cd вдоль оси x и вдоль оси y от оси x только для

изменяемой части $\tilde{E}_x(x, y)$ и на рис. 5 для коэффициента Пуассона.

На рис. 6 показан характер изменения модуля $\tilde{E}_x(x, y)$ в направлении y от сторон ac и bd . На рис. 7 показано влияние расстояния между частицами на величину \tilde{E}_x вдоль оси x . Все результаты получены на основании соотношений, приведенных в [1].

Из характера изменения свойств (см. рис. 5—7) видно, что изменение модуля по мере удаления от частицы велико и зависит от протяженности зоны когезионных взаимодействий (параметр α). Как показано в работах [2, 3], в районе наночастиц происходит увеличение плотности упаковки макромолекул и, следовательно, концентрации вещества,

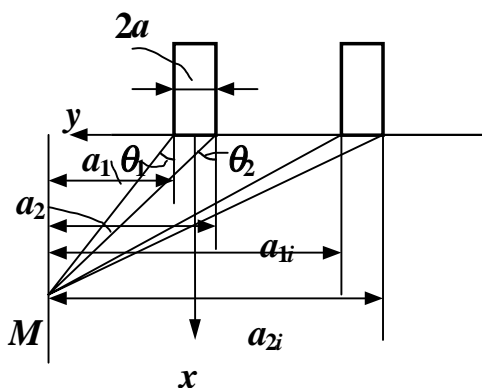


Рис. 1. Схема расположения включений

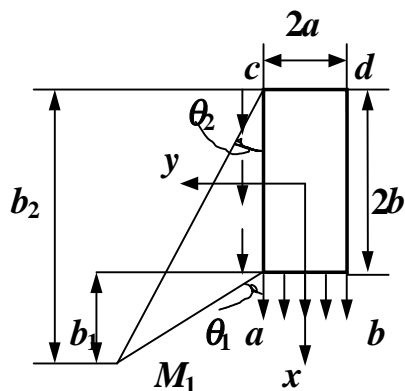


Рис. 2. Геометрические параметры включения

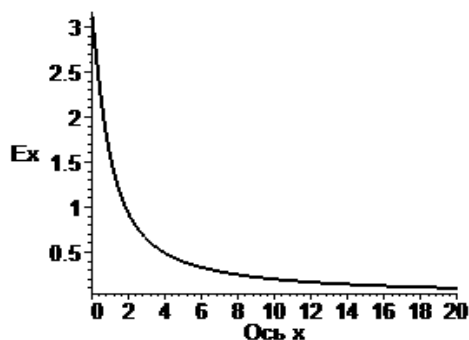


Рис. 3. Изменение затухающей части \tilde{E}_x

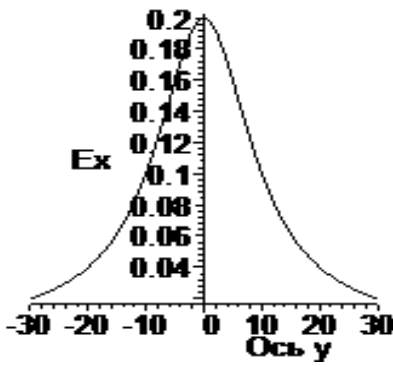


Рис. 4. Изменение \bar{E}_x вдоль оси y при $x = 10a$

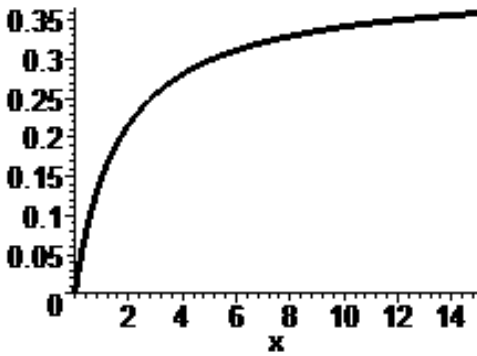


Рис. 5. Зависимость коэффициента Пуассона от наночастицы по координате x

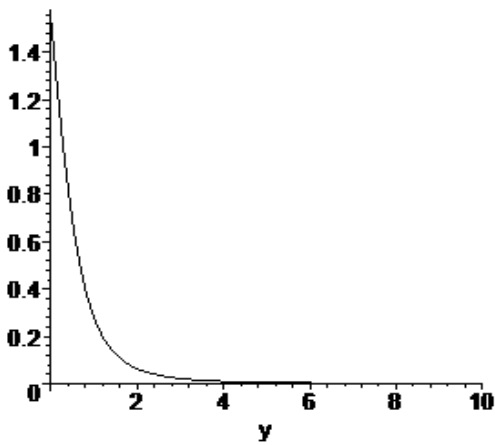


Рис. 6. Изменение \bar{E}_x вдоль оси y

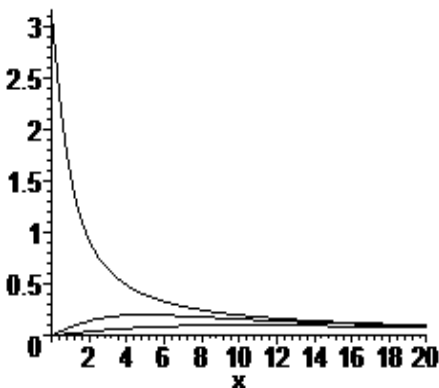


Рис. 7. Влияние расстояния между частицами на величину \bar{E}_x вдоль оси x

что приводит к увеличению модуля связующего в межфазной зоне. За счет уплотнения материала в районе частицы происходит перетекание матрицы к этой частице и уменьшение её плотности и геометрических размеров, что приведет к уменьшению рабочей площади сечения матрицы, повышению действующих локальных напряжений и определит место локального разрушения. Можно принять, что масса в межфазной зоне увеличилась пропорционально изменению модуля материала. Тогда в процессе полимеризации соответствующее уменьшение массы произойдет в зоне, прилегающей к межфазной. При использовании достаточно длинных углеродных нанотрубок в связующем (длиной 3–5 мкм) можно добиться улучшения свойств волокнистого материала поперек волокон за счет увеличения относительного объема межфазной зоны и хорошего «сцепления» активных наночастиц с волокнами.

Получим формулы, определяющие характер изменения в межфазной зоне модулей E_y , деформаций ϵ_x и ϵ_y , напряжений σ_x и σ_y , а также изменение обобщенного напряжения в окрестности наночастицы σ_i . Эти соотношения рассмотрим в окрестности только одной частицы для трехмерной задачи. Так как матрица является изотропным материалом, то при растяжении вдоль координаты x характеристики вдоль осей y и z будут одинаковыми. Следовательно, закон Гука в этом случае запишется в виде

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \bar{E}_x(\epsilon_x + 2\mu\epsilon_y); \\ \sigma_y &= \bar{E}_x[(1+\mu)\epsilon_y + \mu\epsilon_x]; \\ \sigma_z &= \bar{E}_x[(1+\mu)\epsilon_y + \mu\epsilon_x], \end{aligned} \quad (1)$$

где $\bar{E}_x = E_x / (1 - \mu^2)$.

Прежде всего, получим формулы, определяющие деформаций ϵ_x и ϵ_y для области I. Область I — это окрестность границ ab, cd , где модуль упругости вычисляется по правилу Рейсса; область II расположена вдоль границ ac, bd , где модуль упругости вычисляется согласно правилу Ройгхта (рис. 1 и 2). Из полученных ранее соотношений видно, что изменение деформации ϵ_x в этой области пропорционально изменению модуля упругости E_x . Так как в этой зоне известны величины деформаций частицы ϵ_{x2} и матрицы на бесконечности ϵ_{x1} , то можно записать:

$$\epsilon_x = \frac{\epsilon_{x1}}{(\bar{E} - 1) 2 \arctg(a / \alpha x) / \pi + 1},$$

где $\epsilon_{x1} = \sigma_0 / E_1$, $\sigma_0 = \sigma_x = \text{const}$ — значение нормального напряжения в области I.

Из первого соотношения (1) можно определить характер изменения деформации ϵ_y в области I:

$$\epsilon_y = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\sigma_0}{E_x} - \epsilon_x \right).$$

Проверка удовлетворения уравнений равновесия показывает, что касательные напряжения в этой области равны нулю. Таким образом, в этой зоне полностью известно напряженно-напряженное состояние и можно определить обобщенное напряженное состояние (интенсивность напряжений)

σ_{i1} , используя критерий Мизеса:

$$\begin{aligned} \sigma_{i1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_x - \sigma_z)^2} = \\ &= (\sigma_0 - \sigma_y) \leq \sigma_b \end{aligned}$$

и интенсивность деформаций ϵ_{i1} :

$$\begin{aligned} \epsilon_{i1} &= \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(\epsilon_x - \epsilon_y)^2 + (\epsilon_y - \epsilon_z)^2 + (\epsilon_x - \epsilon_z)^2} = \\ &= \frac{2}{3} (\epsilon_{x1} - \epsilon_{y1}), \end{aligned}$$

где $\sigma_y = \sigma_z$; $\sigma_x = \sigma_0$; σ_b — предел прочности материала; $\epsilon_y = \epsilon_z$.

Изменение модуля E_x по оси x

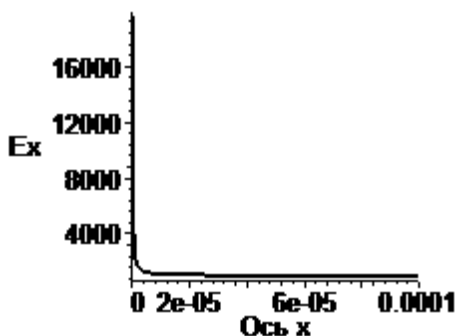


Рис. 8. Изменение модуля E_x вдоль оси x в области I, $y = 0$

Изменение коэффициента Пуассона

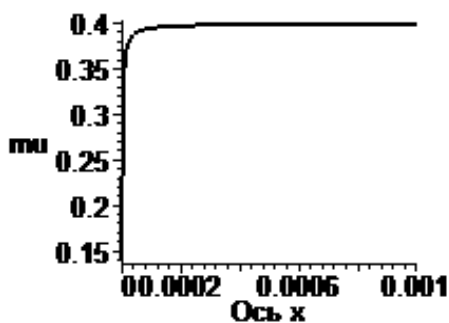


Рис. 9. Изменение коэффициента Пуассона вдоль оси x в области I, $y = 0$

Проиллюстрируем полученные соотношения для матрицы со следующими характеристиками: модуль матрицы $E_1 = 1000$ МПа, коэффициент Пуассона $\mu = 0,4$, относительный модуль $\bar{E} = 400$; полуразмеры частицы равны: $a = 0,5 \cdot 10^{-8}$ м, $b = 0,4 \cdot 10^{-7}$ м; напряжение в зоне для иллюстрации принято: $\sigma_0 = 1$ МПа; коэффициент $\alpha = 1$. Приведем графики изменения характеристик последовательно для E_{x1} , μ , σ_{y1} , ϵ_{x1} , ϵ_{y1} , σ_{i1} , ϵ_{i1} вдоль оси x при $y = 0$ (рис. 8—14).

Проводя аналогичные рассуждения и преобразования с учетом принятых допущений для области II и принятых характеристик материала, можно получить все соответствующие формулы и построить графики изменения характеристик последовательно для E_{x2} , σ_{x2} вдоль оси y при $x = 0$ (рис. 15 и 16). В этом случае деформации $\epsilon_{x2} = \text{const} = 0,001$, напряжение $\sigma_{y2} = 0$ в этой области, а деформация определяется выражением $\epsilon_{y2} = -\mu \sigma_{x2} / E_{x2}$. Выпишем формулу, характеризующую изменение модуля упругости E_{x2} , полученную в работе [1]:

$$\begin{aligned} E_{x2} &= E_1 \left(\frac{(\bar{E} - 1)}{\pi} \left[\arctg \left(\frac{x+b}{\alpha y} \right) - \arctg \left(\frac{x-b}{\alpha y} \right) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{\alpha y(x+b)}{(\alpha y)^2 + (x+b)^2} - \frac{\alpha y(x-b)}{(\alpha y)^2 + (x-b)^2} \right] + 1 \right). \end{aligned} \quad (2)$$

В этой зоне характер изменения напряжения σ_{x2} совпадает с изменением модуля упругости E_{x2}

Изменение напряжения σ_y по

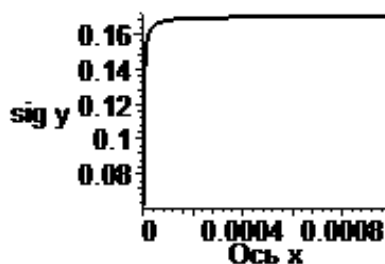


Рис. 10. Изменение напряжения σ_y вдоль оси x в области I, $y = 0$

Изменение деформации ϵ_{x1} по

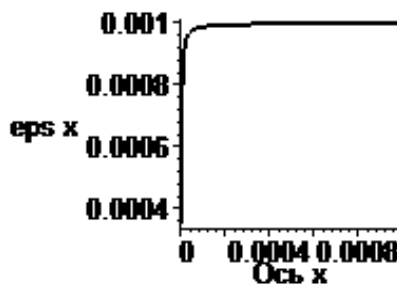


Рис. 11. Изменение деформации ϵ_{x1} вдоль оси x в области I, $y = 0$

Изменение деформации ϵ_{y1} п

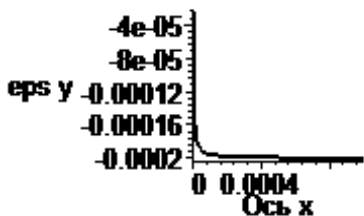


Рис. 12. Изменение деформации ϵ_{y1} вдоль оси x в области I, $y=0$

Изменение эквив. напряжения σ_i i1

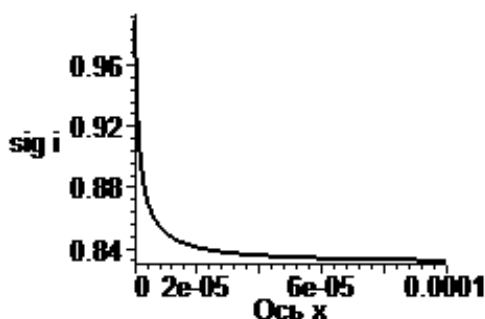


Рис. 13. Изменение напряжения σ_i вдоль оси x в области I, $y=0$

Изменение эквив. деформ. ϵ_i i1

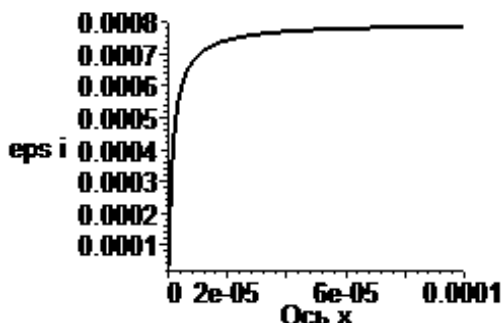


Рис. 14. Изменение деформации ϵ_i вдоль оси x в области I, $y=0$

при выполнении условия, что $\sigma_{x2} = \sigma_0$ при $x \rightarrow \infty$, и запишется в виде

$$\sigma_{x2} = \sigma_0 \left(\frac{(\bar{E} - 1)}{\pi} \left[\arctg\left(\frac{x+b}{\alpha y}\right) - \arctg\left(\frac{x-b}{\alpha y}\right) + \frac{\alpha y(x+b)}{(\alpha y)^2 + (x+b)^2} - \frac{\alpha y(x-b)}{(\alpha y)^2 + (x-b)^2} \right] + 1 \right)$$

Выводы

Полученные результаты исследования изменения характеристик и напряженно-деформированного состояния в межфазной зоне материала показывают, что при приближении к наночастице моду-

Изменение E_{x2} по оси y

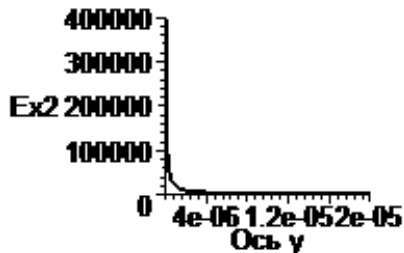


Рис. 15. Изменение модуля E_x вдоль оси y в области II при $x=0$

Напряжение σ_{x2} по оси y ($x=0$)

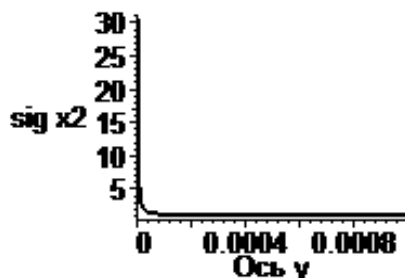


Рис. 16. Изменение напряжения σ_x вдоль оси y в области II при $x=0$

ли упругости матрицы существенно увеличиваются (рис. 8 и 15) и должна увеличиваться плотность матрицы. В области II главным выводом исследования является существенное увеличение нормальных напряжений σ_{x2} (рис. 16). Полученные результаты пока удалось подтвердить косвенным путем сравнения с некоторыми экспериментальными данными [1].

Работа выполнена при поддержке по гранту РФФИ 08—08—00940

Библиографический список

1. Дудченко А.А., Лурье С.А., Шумова Н.П. Структурная модель межфазного слоя в композитных материалах // Конструкции из композиционных материалов. 2006. № 3. С. 3—11.
2. Акатенков Р.В., Алдошин С.М., Алексакин В.Н., Аношкин И.В., Богатов В.А., Грачев В.П., Кондрашов С.В. Повышение свойств эпоксидных полимеров малыми добавками функционализированных углеродных наночастиц // Сб. тезисов секционных докладов, стендовых докладов и докладов участников конкурса научных работ молодых ученых: Rusnanotech 08 — Первый международный Форум по нанотехнологиям. Москва, 2008.
3. Хозин В.Г. Усиление эпоксидных полимеров. — Казань: Дом печати, 2004.

Московский авиационный институт
Статья поступила в редакцию 12.10.2009