

УДК 541.64:539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОГО РАЗРУШЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ СМЕСЕЙ И КОМПОЗИТОВ С УЧЕТОМ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ¹

© 2003 г. В. Г. Ошмян, С. А. Тиман, М. Ю. Шамаев

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
119991 Москва, ул. Косягина, 4

Поступила в редакцию 15.10.2002 г.
Принята в печать 26.05.2003 г.

Предложенные ранее структурно чувствительные определяющие соотношения больших деформаций полимеров использованы для моделирования влияния толщины матричной прослойки между соседними включениями (масштабного фактора) на параметры вязкого разрушения неоднородных полимерных материалов. Структурную основу модели составляет допущение о периодичности расположения фаз. Дисперсная компонента заменялась геометрически идентичной системой пор. Допущение об облегченном течении полимера вблизи свободной поверхности (межфазного слоя) явилось физической основой для моделирования масштабного фактора. Предполагается, что толщина межфазного слоя определяется природой полимера, условиями деформирования, но не зависит от содержания и размера включений. В работе не рассматривается причина проявления особых деформационных свойств межфазного слоя. Целью работы является моделирование механических следствий его формирования. Показано, что нарушение связности межфазных слоев, окружающих различные включения, является причиной вязкохрупкого перехода, что совпадает с экспериментально известным критерием.

ВВЕДЕНИЕ

Многочисленные экспериментальные результаты свидетельствуют о заметном влиянии масштабного фактора (характерного размера структуры полимерных смесей и композитов, в частности диаметра включений и расстояния между ними) на механизмы и параметры разрушения материалов. Так, показано [1–3], что хрупковязкий переход происходит не только при увеличении содержания эластомерной фазы в наполненных полимерах, но и при уменьшении среднего размера включений.

Изменение параметров разрушения при изменении масштаба наблюдается и для дисперсно наполненных композитов [4–7]. Зависимости этих параметров от размера дисперской фазы носят экстремальный характер [6]. Как и в полимерах, наполненных эластомером, увеличение размера

частиц d обусловливает вязкохрупкий переход в области больших размеров (после максимума). Однако рост d в области малых размеров (до достижения экстремума) приводит, наоборот, к хрупковязкому переходу, что скорее всего связано со снижением напряжения отслоения и, в результате, с увеличением доли отслоенных частиц к моменту пластического течения. Если допустить, что к достижению оптимального размера напряжение отслоения снизилось настолько, что к моменту пластического течения все включения оказались отслоенными, то, как и в случае полимеров, содержащих эластомер, включения (с определенными оговорками) могут быть при моделировании заменены порами. Изучение этой общей закономерности и составляет содержание данной работы. При моделировании неоднородности заменяются порами независимо от природы включений и способа формирования пор.

В работах Wu [1, 2] экспериментально показано существование единого параметра (толщины полимерной прослойки между соседними включениями), достижение которым критического значения и является условием хрупковязкого пе-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 03-03-32018, 01-03-32043 и 01-03-32237).

E-mail: oshmyan@center.chph.ras.ru (Ошмян Виктор Григорьевич).

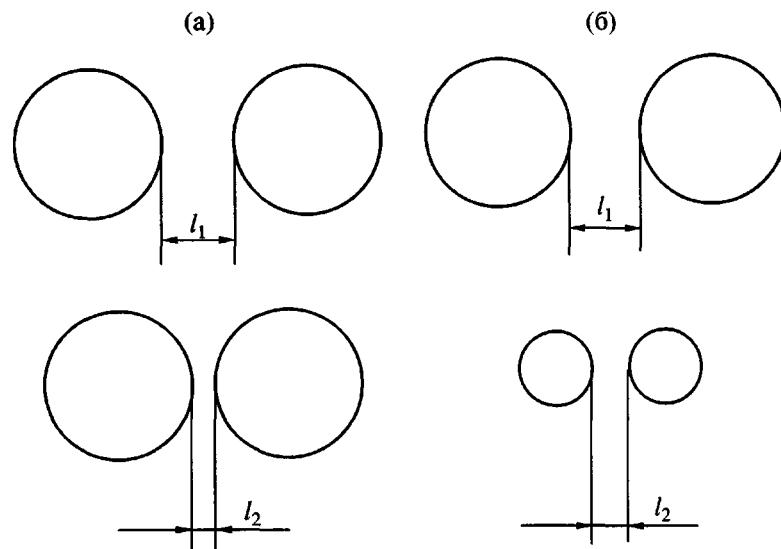


Рис. 1. Схемы уменьшения толщины полимерной прослойки вследствие увеличения содержания включений фиксированного размера (а) или уменьшения размера при фиксированном содержании (б).

рехода. Автор объясняет действенность критерия тем, что уменьшение толщины прослойки изменяет характер ее деформирования с плоскодеформированного на плосконапряженное, что, как известно, обусловливает повышение уровня неразрушающих пластических деформаций. Это качественное объяснение может быть принято, если толщина прослойки уменьшается вследствие увеличения содержания пор при сохранении их размера (рис. 1а). Однако утонение прослойки из-за уменьшения размера включений при сохранении содержания пор (рис. 1б) эквивалентно пре-

образованию подобия и в силу локальности определяющих соотношений не изменит напряженно-деформированное состояние.

Физическим обоснованием критерия Wu вязкохрупкого перехода может служить формирование межфазного слоя с повышенной по сравнению с блочным полимером способностью к пластическому течению, если толщина этого слоя не зависит от содержания и размера включений (пор). В работах [8, 9] экспериментально показано наличие межфазного слоя транскристаллической структуры, формируемого при изготовлении композитов на основе полиамидной матрицы (рис. 2). Однако проявление масштабного фактора разрушения характерно и для ряда материалов на основе стеклообразных полимеров, изменения текстуры которых (если они и имеются) не являются столь ярко выраженными. Нам представляется важным учет нелокальности уравнений, определяющих пластическое течение полимеров. В частности, близость к свободной поверхности без каких-либо изменений текстуры полимера может являться причиной облегченного (по сравнению с полимером в блоке) течения.

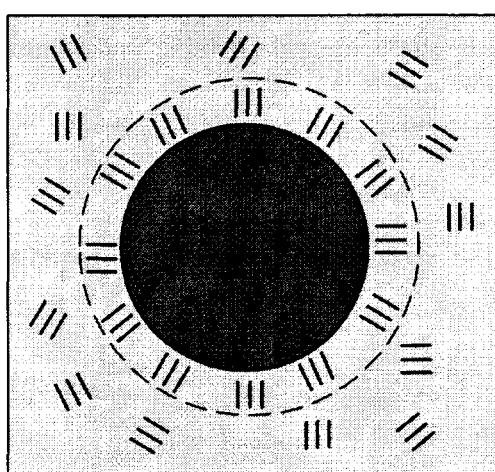


Рис. 2. Иллюстрация формирования транскристаллической морфологии ПА-6 вблизи поверхности включения, экспериментально обнаруженной в работах [8, 9].

Неоднородность морфологии ПА-6 в присутствии наполнителя учтена Tzika с сотрудниками [10] при моделировании больших деформаций композитов. При этом были применены определяющие соотношения Воусе [11] для изотропного полимера в массе и уравнения Parks [12, 13] для

сдвигового течения полимерных кристаллов для межфазного слоя специальной надмолекулярной структуры.

Описание больших деформаций и разрушения полимерных композиций, составляющее содержание настоящей работы, также использует концепцию о формировании межфазного слоя и основано на численном решении краевой задачи механики сплошной среды для представительных структурных ячеек. Необходимость другой по сравнению с рассмотренной в работе [10] модели обусловлена двумя причинами. Первая уже обсуждена и состоит в том, что текстуры блочного и межфазного полимера могут не различаться, однако близость к свободной поверхности способствует облегчению пластического течения. В данной модели и блочный, и приграничный полимеры предполагаются изотропными. Их деформирование описывается единими определяющими соотношениями [14, 15], основанными на задании текстуры распределением полимерных фрагментов по ориентациям. Различие состоит только в значениях параметра, определяющего скорость пластического течения.

Вторая причина заключается в необходимости моделирования разрушения композита. В работе [10] на основе расчета и анализа геометрии областей течения авторами сделан важный вывод о более массивном объеме текущего полимера в условиях связности межфазных областей. Однако какой-либо критерий разрушения, а, следовательно, непосредственное моделирование разрушения материалов в работе [10] отсутствует. Соответствующий критерий введен в настоящей работе. В совокупности с результатами микромеханического моделирования он использован для анализа характера разрушения композиций.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ДОПУЩЕНИЯ МОДЕЛИ

Определяющие соотношения больших деформаций полимеров

Для решения поставленной задачи используются разработанные ранее [14, 15] определяющие соотношения для больших деформаций однородного полимера и вязкого разрушения. В настоящем разделе изложены основные положения модели.

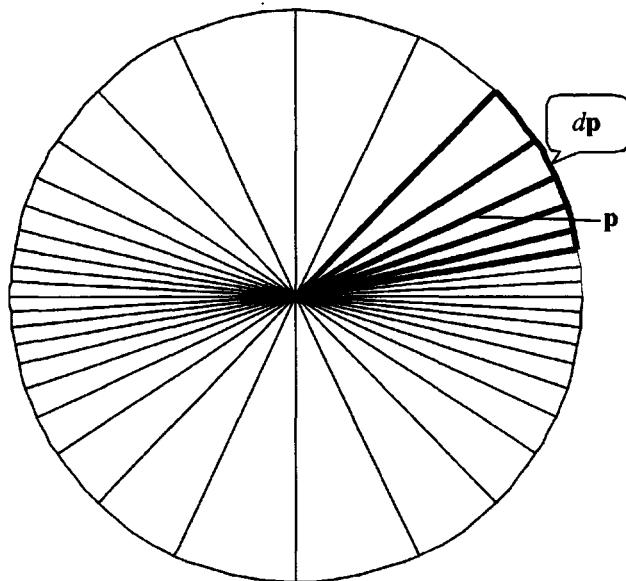


Рис. 3. Пример возможного распределения полимерных фрагментов по ориентациям. Направления полимерных фрагментов показаны радиальными отрезками единичной длины, огибающая линия указывает множество возможных направлений. Полужирными линиями выделены направления, формирующие окрестность dp направления p и их огибающая.

1. Структура полимера характеризуется распределением полимерных фрагментов по направлениям ориентации, $f(x, p)dp$, задающим долю полимерных фрагментов в данной точке x деформируемого тела, ориентированных в малой окрестности dp рассматриваемого направления p (рис. 3). Термин “полимерный фрагмент” имеет гибкий физический смысл, зависящий от типа полимера, условий и стадии деформирования. В частности, фрагмент может быть полимерным кристаллитом или сегментом цепи. Может быть введено в рассмотрение несколько типов полимерных фрагментов разной физической природы. В рамках настоящей работы проанализированы монофрагментные распределения.

2. Кинематические допущения основаны на возможности локального представления зависимости текущих x от исходных $X = x(0)$ координат точек тела $x(t, X)$ в виде композиции отображений $X_p(t, X)$ и $x(t, X_p)$: $x(t, X) = x(t, X_p(t, X))$. Первое определяет свободную от напряжений конфигурацию тела (пластические деформации) в рассматриваемый момент времени. Второе отображение описывает упругое деформирование. Возможность такого представления эквивалентна возможности

разложения полного градиента деформаций $\mathbf{F} = \frac{\partial x}{\partial X}$ на произведение упругой $\mathbf{F}_e = \frac{\partial x}{\partial X_p}$ и пластической $\mathbf{F}_p = \frac{\partial X_p}{\partial X}$ составляющих: $\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p$.

3. Упругие определяющие соотношения формулируются в терминах упругого потенциала $U_e(\epsilon)$ в текущей системе координат: величина $U_e dx$ есть доля упругой энергии, запасенной малой областью dx деформируемого тела. При этом используется логарифмическое представление тензора упругих деформаций $\epsilon = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{F}_e \mathbf{F}_e^*)$.

Упругий потенциал (по аналогии со случаем малых упругих деформаций) задается двукратной сверткой тензора упругих деформаций ϵ с тензором упругих модулей $C_{ijkl}^{(f)}$

$$U_e = \frac{1}{2} C_{ijkl}^{(f)} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl},$$

который существенно зависит от текстуры материала, т.е. от распределения по ориентациям $f(\mathbf{p})$. В рассматриваемом варианте модели принята простейшая, аддитивная зависимость, предполагающая линейный вклад в значение $C_{ijkl}^{(f)}$ значений компонент $C_{ijkl}(\mathbf{p})$ упругого тензора полимерных фрагментов, ориентированных в направлении \mathbf{p} , с весом $f(\mathbf{p})$.

4. Кинетика пластического течения определяется локально необратимым изменением конфигурации тела за малый промежуток времени Δt : $X_p(t + \Delta t, X) = X_p^a(\Delta t, X_p(t, X))$, что эквивалентно мультипликативному закону, связывающему значения градиента пластических деформаций \mathbf{F}_p в моменты времени $t + \Delta t$ и t : $\mathbf{F}_p(t + \Delta t) = \mathbf{F}_p^a(\Delta t) \mathbf{F}_p(t)$ (через $\mathbf{F}_p^a(\Delta t)$ обозначен градиент отображения X_p^a).

Формульное выражение для приращения пластического градиента $\mathbf{F}_p^a(\Delta t)$ является достаточно сложным. Оно приведено в публикациях [14, 15]. Физические предпосылки принятого закона течения сводятся к следующему. Предполагается, что необратимо только скольжение полимерных

фрагментов в направлении их ориентации. Скорость скольжения пропорциональна соответствующей сдвиговой компоненте тензора упругих деформаций. Константа пропорциональности k_p является параметром модели, регулирующим способность полимера к неразрушающим пластическим деформациям. Наибольшего значения сдвиговая компонента достигает в системе координат, повернутой на 45° относительно главных осей тензора упругих деформаций. Соответствующим образом ориентированные полимерные фрагменты привносят наибольший вклад в скорость пластического течения. Тем самым его интенсивность существенно зависит от распределения полимерных фрагментов по ориентациям. Например, в случае, когда все фрагменты ориентированы в направлении растяжения, пластического течения, согласно модели, не происходит.

5. Под эволюцией текстуры полимера в соответствии с ее определением в модели понимается кинетика изменения распределения $f(\mathbf{p})$ полимерных фрагментов по ориентациям. Точное формульное описание этого процесса также содержится в предыдущих публикациях [14, 15]. Физический смысл принятого закона проясняет приведенная на рис. 4 схема изменения текстуры $f(\mathbf{p}) \rightarrow f_e(\mathbf{p})$, обусловленная аффинным преобразованием пространства (растяжением-сжатием в λ_1 и λ_2 раз во взаимно перпендикулярных направлениях) на этапе упругого деформирования. Предполагается, что текстура полимера (распределение $f(\mathbf{p})$, рис. 4а) эволюционирует к "упругому состоянию" (к распределению $f_e(\mathbf{p})$, рис. 4б). Скорость переориентации определяется значением второго кинетического параметра модели k_o . Текстура не изменяется при всестороннем деформировании и если все полимерные фрагменты уже ориентированы в направлениях растяжения-сжатия, т.е. в тех же условиях, при которых не происходит пластического течения.

6. В качестве критерия разрушения принято локальное нарушение обратимости тензора касательных упругих модулей, связывающего приращения напряжений и упругих деформаций. Его детальное обсуждение содержится в работе [15]. Наличие пиков на деформационных диаграммах (точек нулевых значений производных) является хорошо известным критерием формирования полос сдвига, шейки и других форм потери устойчивости однородного деформирования. Однако ес-

ли при этом упругие деформации остаются стабильными, то материал, согласно модели, сохраняет способность к неразрушающим деформациям. Только локальная потеря устойчивости упругой компонентой деформирования принимается в качестве критерия разрушения материала.

Структурная модель

В данной работе решены плоские задачи механики сплошной среды. Включения одинаковой формы и размера (темные области на рис. 5) предполагаются периодически расположенными в полимерной матрице (белые и серые области на рис. 5).

Каждое включение считается окруженным слоем высокопластичного полимера (серые области на рис. 5) фиксированной толщины h , не зависящей от объемного содержания включений Φ и их размера d . При определенном соотношении между h , Φ и d происходит объединение высокопластичных слоев в связную область. Это соотношение имеет вид

$$d^2 = \alpha \Phi (d + 2h)^2$$

Параметр α определяется формой и расположением частиц. В случае, изображенном на рис. 5, $\alpha = 4/\pi$. В статье в рамках допущения о периодичности анализируются три структурные модели. На рис. 6 приведены соответствующие им ячейки периодичности. Первая (рис. 6а, 6б) предполагает квадратную форму включений и расположение их центров в узлах квадратной решетки. Вторая модель (рис. 6в, 6г) отличается от первой "шахматным" расположением центров включений. Согласно третьей модели, предполагается расположение круглых включений по углам квадрата (рис. 6д, 6е). Значение параметра α составляет 1, 2 и $4/\pi$ соответственно.

Условия нагружения, краевые задачи и методы их решения

В работе обсуждаются микро- и макромеханические аспекты деформирования композита, обусловленные одноосным растяжением с фиксированной скоростью $\dot{\epsilon}$ в направлении оси x_1 : $\lambda_1(t) = 1 + \dot{\epsilon}t$. При необходимости может быть рассмотрен любой другой режим деформирования. Деформация $\lambda_2(t)$ выбирается из условия

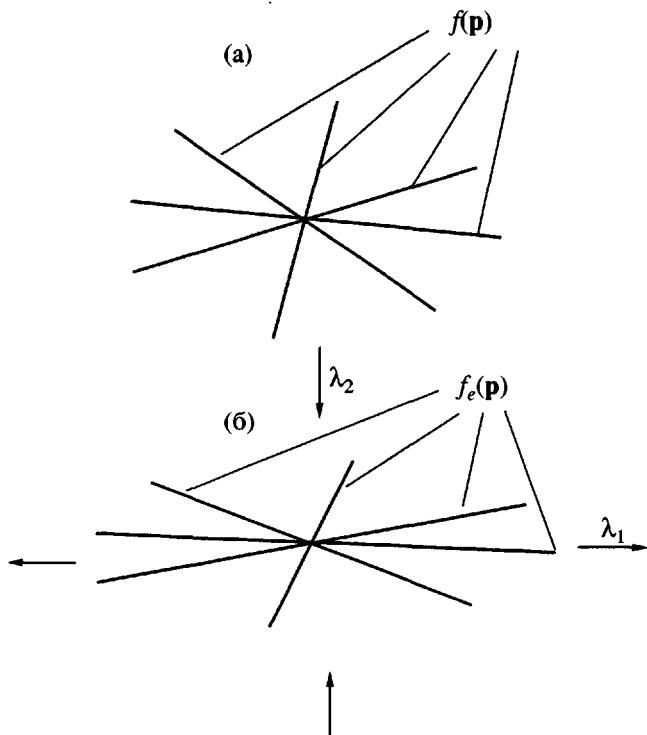


Рис. 4. Схема, поясняющая принятый в модели закон изменения текстуры полимера: распределение полимерных фрагментов по ориентациям в свободном от напряжений состоянии (а) и его изменение в результате упругого деформирования (б).

равенства нулю напряжений на площадках, перпендикулярных оси растяжения. Через $\lambda_i(t)$ обозначена макроскопическая степень вытяжки в направлении оси x_i , достигнутая к моменту времени t .

Математическая теория осреднения [16, 17] сводит описание деформирования неоднородной среды периодической структуры (рис. 5а, 5б) к решению краевой задачи на представительной ячейке периодичности (рис. 5в, 5г). Зеркальные симметрии структуры (рис. 5, 6) и режимов нагрузления относительно вертикальных и горизонтальных направлений позволяют сузить ячейку периодичности до ее четверти и упростить постановку краевых условий. Для численного решения соответствующей задачи использовалась оригинальная версия метода конечных элементов, подробно описанная в работах [15, 18]. Основу алгоритма от предыдущего шага по времени t к следующему $t + \Delta t$, составляют следующие этапы.

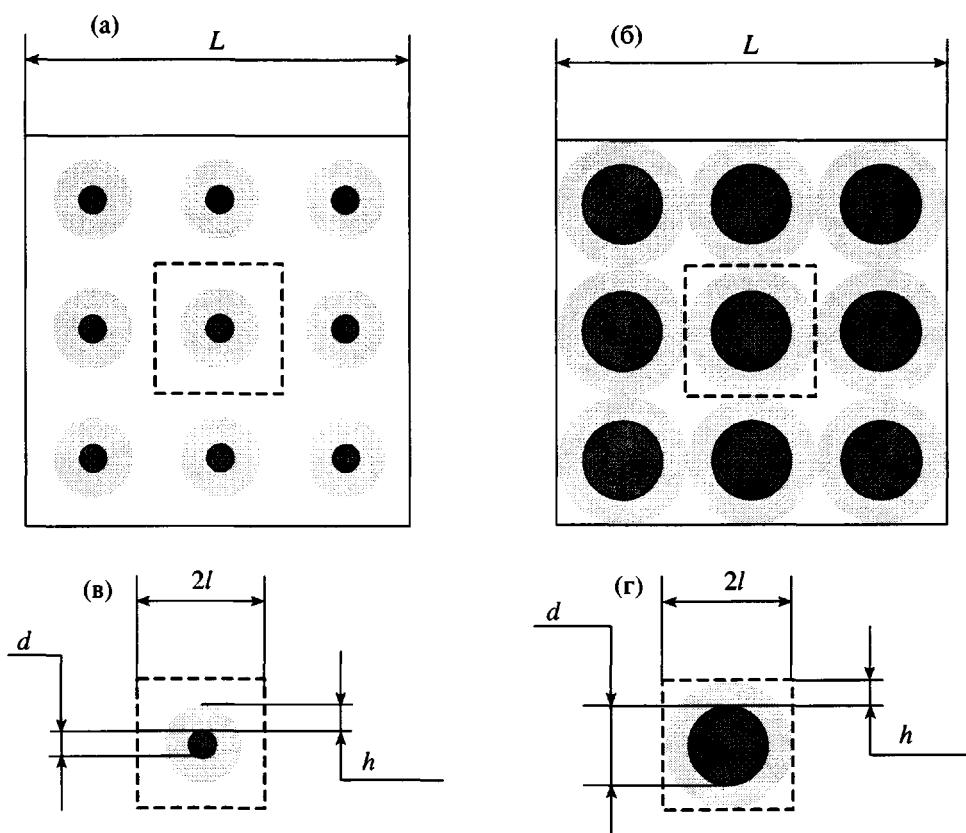


Рис. 5. Структурная модель композита (а, б) и соответствующие ячейки периодичности (в, г). Области включений, полимерной матрицы и высокопластичных межфазовых прослоек отмечены темным, белым и серым оттенками соответственно. Показаны случаи несвязных (а, в) и связных (б, г) высокопластичных областей.

1. Четверть ячейки периодичности разбивается на $n_1 \times n_2$ прямоугольников таким образом, чтобы границы прямоугольников включали межфазовые границы. Каждый прямоугольник разделяется на треугольные конечные элементы диагоналями, соединяющими нижние левые и верхние правые вершины прямоугольников. Отображения исходных координат в текущие интерполируются внутри каждого треугольника линейными функциями по значениям в узлах сетки (в вершинах конечных элементов). Линейность интерполяции обеспечивает однородность деформирования в пределах конечного элемента, в частности постоянство градиентов упругих и пластических деформаций (\mathbf{F}_e и \mathbf{F}_p) и ориентационного распределения $f(\mathbf{p})$.

2. Находятся текущие положения x узлов сетки. Наиболее сложным является решение упругой части задачи. На этом этапе градиенты пластической деформации $\mathbf{F}_p^{(k)}$ и ориентационные

распределения $f^{(k)}(\mathbf{p})$ в каждом k -м конечном элементе, достигнутые к рассматриваемому моменту времени t , считаются известными из результатов реализации предыдущих шагов алгоритма. Искомые положения узлов вычисляются из условия равенства нулю производных полной упругой энергии по всем текущим координатам узлов, за исключением тех, положение которых задается граничными условиями. С целью линеаризации полученной системы уравнений используется итерационная процедура, каждый шаг которой основан на квадратичном разложении полной упругой энергии относительно искомых в точке, вычисленной на предыдущем шаге итерации.

3. Следующий этап алгоритма состоит в определении градиента пластической деформации $\mathbf{F}_p^{(k)}(t + \Delta t)$ и ориентационного распределения $f^{(k)}(t + \Delta t)$ для каждого k -го конечного элемента в следующий момент времени при заданных теку-

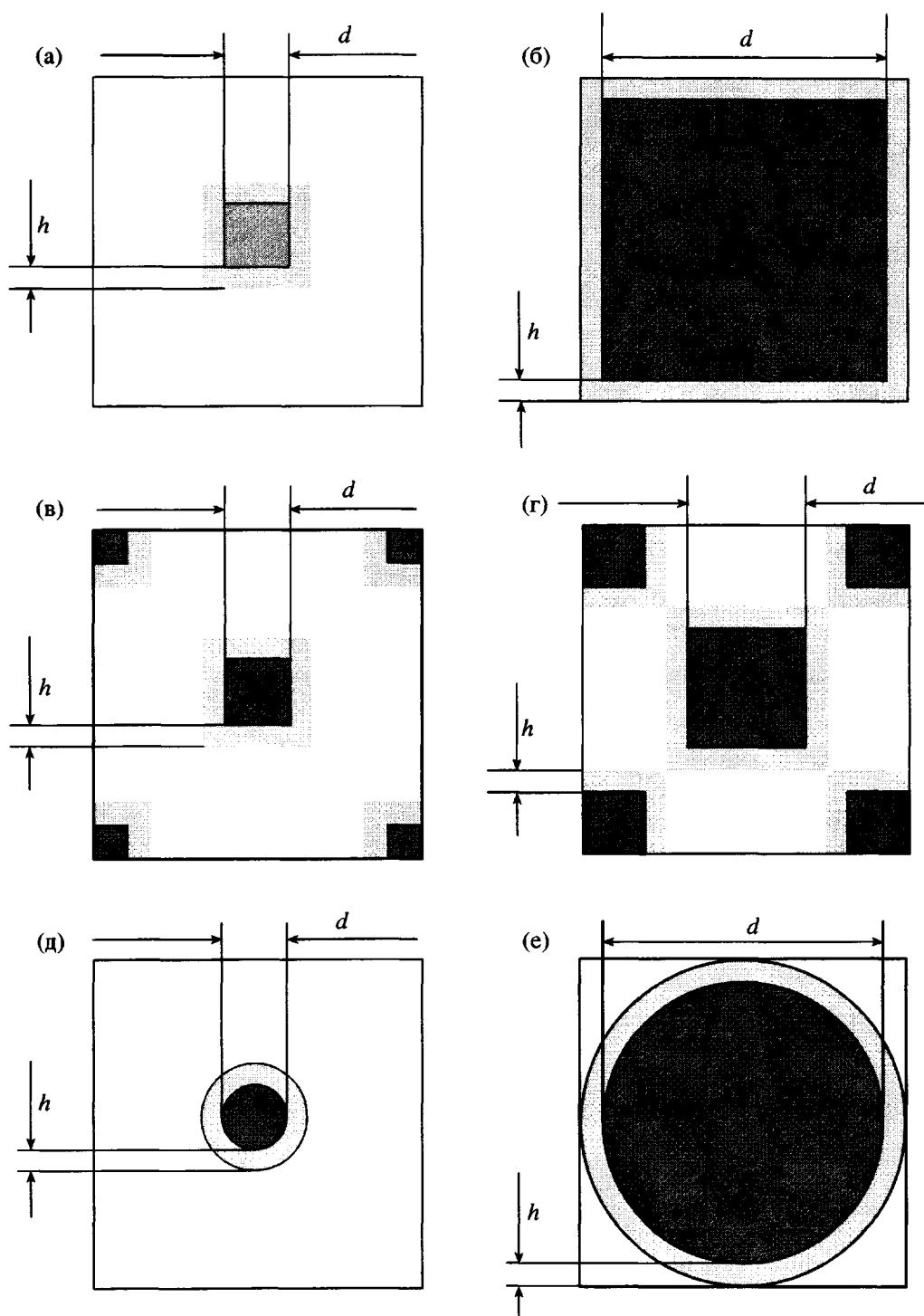


Рис. 6. Ячейки периодичности, соответствующие квадратному расположению включений квадратной формы (а, б), "шахматному" расположению квадратных включений (в, г) и размещению круглых включений в узлах квадратной решетки (д, е). Обозначения областей такие же, как и на рис. 5.

ющих координатах узлов. Эти две стадии чрезвычайно важны для описания деформационных свойств материала, но значительно менее трудоемки с вычислительной точки зрения. Соответствующие кинетические соотношения описаны выше.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Параметры модели и условия нагружения

Макроскопическая скорость растяжения принята равной $\dot{\epsilon} = 0.1$. Упругие параметры идеально

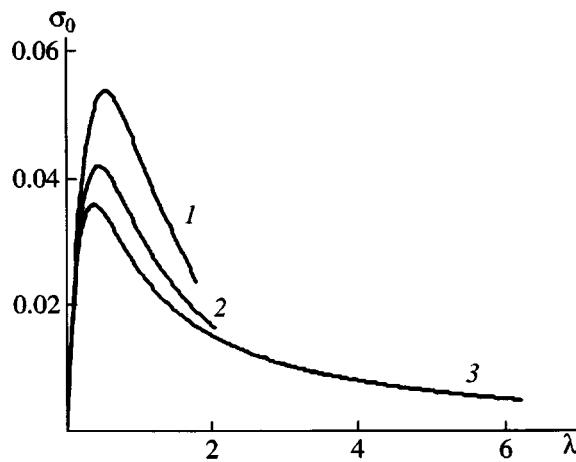


Рис. 7. Диаграммы одноосного растяжения композита квадратной структуры (рис. 6а, бб), рассчитанные в предположении об отсутствии высокопластичной прослойки, $h/d = 0$ (1) и при $h/d = 0.1$ (2), а также в случае, изображенном на рис. бб, когда вся матрица является высокопластичной (3). Объемное содержание включений $\Phi = 25\%$.

ориентированного полимера характеризовались следующими значениями модулей и их отношений: $E_{\parallel} = 2.5$ отн. ед. (модуль Юнга в направлении ориентации), $E_{\perp} = 0.025$ (модуль Юнга в трансверсальном к ориентации направлении), $v_{\perp\parallel} = 0.2$ (коэффициент Пуассона трансверсального сжатия, вызванного аксиальной вытяжкой), $G = 0.02$ (модуль сдвига). Значения модулей упругости отнесены к значению модуля Юнга изотропного полимера, рассчитанного в предположении о равномерности распределения по ориентациям.

Величина параметра модели k_o , ответственно го за скорость эволюции текстуры, составляла 0.5, как для блочного (светлые области на рис. 5, 6), так и для межфазного (серые области на рис. 5, 6) полимеров. Только параметр k_p , определяющий способность к пластическому течению, изменялся от 1.5 для полимерной матрицы вдали от свободной поверхности до 2.5 для межфазной прослойки. Результат указанного изменения проиллюстрирован приведенными на рис. 7 диаграммами деформирования композитов. Структурные предположения состоят в расположении квадратных включений в узлах квадратной решетки (рис. 6а, бб). Кривая 1 рассчитана в предположении об отсутствии высокопластичной прослойки. Напротив, кривая 3 соответствует случаю, когда весь полимер является высокопластичным. В частнос-

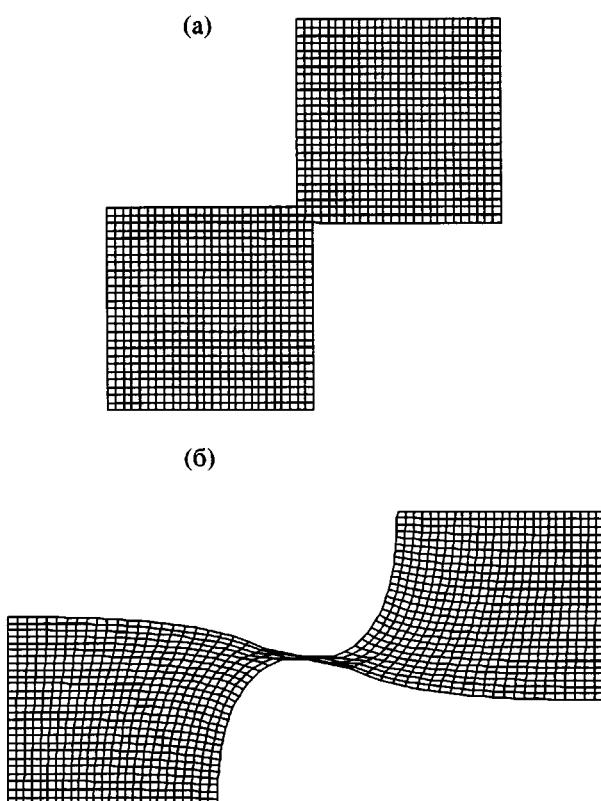


Рис. 8. Изначально квадратная сетка (а) и ее искажение (б), обусловленное вытяжкой композита шахматной структуры (рис. 6в) на 52% в горизонтальном направлении. Деформационная картина соответствует выбору высокопластичного полимера в качестве матрицы и высокой степени наполнения $\Phi = 46$ об. %.

ти, увеличение значения k_p с 1.5 до 2.5 приводит к уменьшению предела текучести с $\sigma_y = 0.55$ до $\sigma_y = 0.35$ и к увеличению удлинений при разрыве с $\lambda = 1.76$ до $\lambda = 6.2$. Степень наполнения $\Phi = 25$ об. %.

Особенности деформационного поведения

Высокая пластичность полимерной матрицы, в частности наличие развитых кластеров более пластичного полимера, должно соответствующим образом отражаться на свойствах композита. Искажение (рис. 8б) изначально квадратной сетки (рис. 8а) демонстрирует микромеханическую картину деформирования высокопластичной полимерной матрицы при шахматном расположении пор квадратной формы (рис. 6в, бг). Объемная доля наполнителя $\Phi = 46$ об. % выбрана близкой к максимальной (50 об. %, рис. 6г), так что угловые точки соседних пор в недеформированном состоянии очень близки (рис. 8а). Тем не менее,

материал способен испытывать большие деформации (52%, рис. 8б). Ясно видно сглаживание угловых точек границы (вершин квадратных включений), что приводит к снижению опасной с точки зрения разрушения концентрации напряжений.

Особенности разрушения

На рис. 9 представлены рассчитанные зависимости предельных удлинений $\lambda_{\text{пр}}$ от отношения размера включений (пор) к толщине межфазной прослойки при фиксированных, но различных значениях объемной доли включений Φ . Видно, что модель предсказывает резкое уменьшение удлинений при разрыве (мы называем это уменьшение вязкохрупким переходом). В случае квадратного расположения включений квадратной формы (рис. 9а) переход выражен наиболее резко.

Закономерности моделируемого перехода качественно совпадают с экспериментальными результатами, полученными для наполненных эластомерами ударопрочных пластиков [1–3] и дисперсно наполненных композитов [4–7]. В частности, увеличение объемной доли включений (пор) ведет к уменьшению критического размера включений. Однако проведенное моделирование больших деформаций композитов в рамках различных структурных предположений показывает, что применять критерий критической толщины прослойки для описания точки перехода следует с осторожностью. Значения относительного размера включений, соответствующие переколяции высокопластичного полимера (слиянию областей, отмеченных на рис. 5 и рис. 6 серым цветом, в связное множество), изображены на рис. 9 пунктирными линиями. Резкий вязкохрупкий переход в случае расположения включений квадратной формы в узлах квадратной решетки (рис. 9а, бб) происходит при значениях структурных параметров, в частности соответствующих слиянию высокопластичных областей (рис. 6б). Качественно такой же вывод может быть сделан и в случае круглых включений (рис. 9в). Изменение формы включений с квадратной на круглую приводит к более плавному вязкохрупкому переходу (рис. 9в). Отмеченное различие является следствием полной замены блочного полимера высокопластичным в первом случае. Для "шахматной" структуры (рис. 9б, бг) значение относительного размера включений, соответствующее вязкохрупкому переходу, заметно ниже значения,

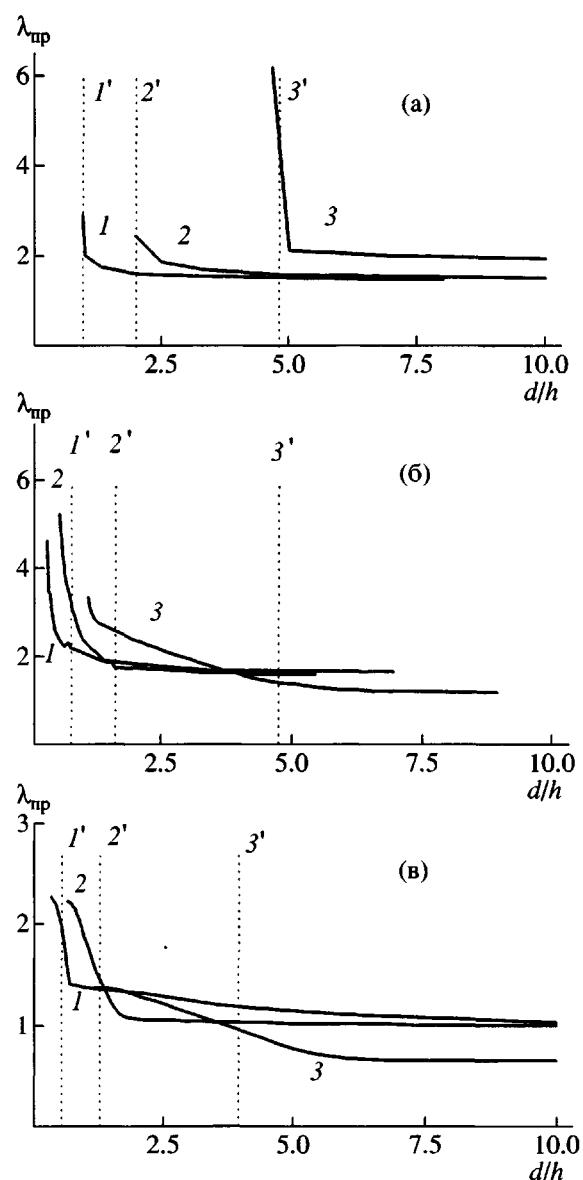


Рис. 9. Зависимости предельных удлинений от относительного размера включений (отношения размера включения к толщине межфазного слоя), для трех структурных моделей. а – расположение включений квадратной формы (рис. 6а, бб) в узлах квадратной решетки, $\Phi = 10$ (1), 25 (2) и 50% (3); б – расположение квадратных включений в шахматном порядке (рис. 6в, бг), $\Phi = 4$ (1), 10 (2) и 25% (3); в – расположение включений круглой формы (рис. 6д, бе), $\Phi = 10$ (1), 25 (2) и 50% (3). Значения относительных размеров, соответствующие слиянию высокопластичных областей в связное множество, отмечены пунктирными линиями.

отвечающего моменту слияния межфазных прослоек (рис. 9б). Отмеченная особенность, по-видимому, обусловлена очевидной неоднородностью по толщине связных межфазных прослоек в

случае "шахматной" структуры (рис. 6г). Для при-
дания композиту соответствующей структуры
высокой пластичности необходима более разви-
тая связность межфазных областей, чем та, кото-
рая образуется непосредственно за порогом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wu S. // Polymer. 1985. V. 26. № 9. P. 1855.
2. Wu S. // J. Appl. Polym. Sci. 1988. V. 35. № 3. P. 549.
3. Bartczak Z., Argon A.S., Cohen R.E., Weinberg M. // Polymer. 1999. V. 40. № 9. P. 2331.
4. Pukanszky B., Fekete E., Tudos F. // Makromol. Chem., Macromol. Symp. 1989. V. 28. № 1. P. 165.
5. Fu Q., Wang G., Shen J. // J. Appl. Polym. Sci. 1993. V. 49. № 4. P. 673.
6. Dubnikova I.L., Gorenberg A.Ya., Oshmyan V.G. // J. Mater. Sci. 1997. V. 32. № 6. P. 1613.
7. Bartczak Z., Argon A.S., Cohen R.E., Weinberg M. // Polymer. 1999. V. 40. № 9. P. 2347.
8. Muratoglu O.K., Argon A.S., Cohen R.E. // Polymer. 1995. № 5. V. 36. P. 921.
9. Muratoglu O.K., Argon A.S., Cohen R.E. // Polymer. 1995. V. 36. № 11. P. 2143.
10. Tzika P.A., Boyce M.C., Parks D.M. // J. Mech. Phys. Solids. 2000. V. 48. № 9. P. 1893.
11. Boyce M.C., Parks D.M., Argon A.S. // Mech. Mater. 1988. V. 7. № 1. P. 15.
12. Parks D.M., Ahzi S. // J. Mech. Phys. Solids. 1990. V. 38. № 5. P. 701.
13. Lee B.J., Argon A.S., Parks D.M., Ahzi S., Bartczak Z. // Polymer. 1993. V. 34. № 18. P. 3555.
14. Ошмян В.Г. // Высокомолек. соед. Б. 1995. Т. 37. № 1. С. 154.
15. Herrmann K.P., Ошмян В.Г., Тиман С.А., Шамаев М.Ю. // Высокомолек. соед. С. 2002. Т. 44. № 9. С. 1677.
16. Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. Averaging Processes in Periodic Media. Mathematical Problems in Mechanics of Composite Materials. Dordrecht: Kluwer Academic, 1989.
17. Bensoussan A., Lions J.-L., Papanicolaou G. Asymptotic Methods in Periodic Structures. Amsterdam: North-Holland, 1978.
18. Muravin D.K., Oshmyan V.G. // J. Macromol. Sci., Phys. 1999. V. 38. № 5–6. P. 749.

Modeling of Ductile Failure of Polymer Blends and Composites with Allowance for Interface Formation

V. G. Oshmyan, S. A. Timan, and M. Yu. Shamaev

Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
ul. Kosygina 4, Moscow, 119991 Russia

Abstract—The structure-sensitive constitutive equations proposed earlier for large deformations of polymers were used to model the effect of the thickness of matrix ligament between inclusions (scale factor) on the parameters of ductile failure of inhomogeneous polymer materials. The structure of the model is based on the assumption on periodic arrangement of the phases. The dispersed component was replaced by the geometrically identical system of pores. The assumption on the facilitated flow of a polymer layer near the free surface (interface) forms the physical basis for the simulation of the scale factor. It was assumed that the interfacial-layer thickness is determined by the polymer nature and deformation conditions but does not depend on the amount and size of inclusions. The reason for the appearance of special deformation properties of the interface layer is not discussed. The objective of the work was to simulate the mechanical consequences of its formation. It was shown that the debonding of interfacial layers surrounding various inclusions is responsible for the tough-to-brittle transition, which is consistent with the experimentally found criterion.