

УДК 541.64:539.3

## РАСЧЕТ ЖЕСТКОСТИ КОМПОЗИТА С УЧЕТОМ ИЗГИБНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ НАПОЛНИТЕЛЯ<sup>1</sup>

© 2006 г. Ал. Ал. Берлин\*, В. Г. Ошмян\*, С. А. Патлажан\*, С. А. Тиман\*,  
М. Ю. Шамаев\*, А. Р. Хохлов\*\*

\*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук  
119991 Москва, ул. Косыгина, 4

\*\*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Физический факультет  
119992 Москва, Ленинские горы

Поступила в редакцию 23.03.2005 г.  
Принята в печать 17.08.2005 г.

Предложены модели для описания механических свойств неоднородных полимерных систем тонкой структуры, в которых асимметрия (отношение характерных размеров) одного из компонентов велика. Решение задачи традиционными методами механики композитов ограничено двумя обстоятельствами. Первое состоит в значимости изгибных деформаций тонких объектов, которые не учитывают хорошо развитые аналитические методы, основанные на приближениях самосогласования. Второе связано с тем, что сильная асимметрия структуры обуславливает значительные трудности в использовании численных методов для решения краевых задач механики композитов, поскольку малая толщина включений наряду с их большой протяженностью приводит к необходимости сильной дискретизации континуальных уравнений. В данной работе предложена основанная на теории изгиба тонких балок каркасная модель деформирования композита, содержащего жесткий кластер тонкой структуры. Разработан также новый численный метод, не требующий излишне мелкого разбиения области интегрирования. Продемонстрирована важная роль изгибных деформаций, приводящих, в частности, к заметному уменьшению упругих модулей композитов.

### ВВЕДЕНИЕ

Ряд практических важных неоднородных материалов на основе полимеров характеризуется тонкой структурой, под которой в данном контексте понимается сильная асимметрия формы одного или нескольких входящих в него компонентов. К ним прежде всего относятся нанокомпозиты, наполненные углеродными трубками нанометрового диаметра или частицами слоистых силикатов нанометровой толщины. Сильная анизотропия механических свойств одной из фаз (органические волокна) может приводить к тем же последствиям, что и геометрическая асимметрия. Другим примером тонких структур являются мембранны, в частности Nafion®, полимерный каркас которых способен нести нагрузку при малом содержании полимера. Отношения характерных

размеров асимметричных наполнителей достигают нескольких сотен.

Хорошо развитые аналитические подходы самосогласования (см., в частности, работы [1, 2]) формально применимы для описания упругих свойств композитов при любой степени асимметрии формы включений. Детальный анализ результатов применения таких подходов для описания свойств нанокомпозитов составляет содержание публикации [3]. Указанная возможность реализуема благодаря известному решению Eshelby [4] о деформировании однородно нагруженной на бесконечности упругой среды с упругим одиночным включением эллипсоидальной формы. Однако это решение гарантирует сохранение формы включения: изменяются только ориентация и размеры эллипса вопреки интуитивному ожиданию значительных изгибных деформаций в случае иглообразных либо дискообразных включений. Следовательно, предсказываемые моделями самосогласования значения эффективных модулей упругости материалов

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 02-03-32761, 03-03-32018, 04-03-32052).

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

тонкой структуры неизбежно окажутся завышенными.

Применительно к матричным композитам изгибы деформации обусловлены взаимодействием между включениями асимметричной формы. Соответственно, при решении краевых задач механики композитов они могут проявиться лишь при рассмотрении определенных представительных фрагментов структуры материала. Эти задачи, как правило, решаются лишь численными методами (в частности, методом конечных элементов), которые связаны с покрытием представительной ячейки сеткой, включающей достаточно большое число узлов, с последующей заменой континуальных упругих полей на их значения в узлах сетки. В случае материалов тонкой структуры возникает необходимость использования очень мелких сеток и, следовательно, решения очень больших систем уравнений, что может оказаться проблематичным даже при применении современных суперкомпьютеров и оптимального, специально разработанного для асимметричных включений комплекса программ [5]. Именно по этой причине авторами публикаций [6, 7] численно анализируется только случай небольшой концентрации одинаково ориентированных включений асимметричной формы. В рамках указанных ограничений удается подобрать доступную для работы реальных компьютеров систему конечных элементов, которая обеспечивает приемлемую точность расчетов при покрытии каждого включения сеткой с несколькими узлами по толщине включений.

В настоящей работе развиты аналитическая и численная модели, позволяющие описать механические взаимодействия асимметричных включений, размеры, ориентация и расположение которых детерминированы, а не усреднены, как это принято в приближениях самосогласования.

Предлагаемое аналитическое описание основано на теории изгиба тонких стержней [8] и применимо в случаях, когда жесткая компонента характеризуется тонкой структурой и образует каркас (связную область), несущий основную долю нагрузки. Пены и полимерные мембранны относятся к материалам указанного типа. Другим примером могут служить нанокомпозиты, наполненные углеродными трубками с концентрацией,

превышающей порог их переколяции и обеспечивающей формирование жесткого каркаса.

Другим методом является численное решение краевой задачи механики композитов в пределах представительной ячейки структуры. С этой целью разработан специальный алгоритм, не требующий использования конечных элементов очень малого размера и соответственно решения больших систем уравнений. Основная идея алгоритма – приближение нулевой толщины наночастиц. Показано, что решения, полученные с использованием разработанного и стандартного алгоритмов [7], хорошо согласуются в случаях осевого и трансверсального армирования.

Обе модели учитывают изгиблые деформации асимметричной компоненты тонкой структуры. Продемонстрирована важная роль изгибной модели деформирования в формировании упругих свойств материала.

## КАРКАСНАЯ МОДЕЛЬ

Очевидно, что если значения модуля упругости (в частности, модуль Юнга  $E$ ) одного из связных компонентов неоднородного материала существенно превосходят значения модуля упругости других компонентов, то сопротивление материала деформированию определяется исключительно каркасом, сформированным жестким компонентом. В настоящей работе структура такого каркаса моделируется поликристаллической системой хаотически ориентированных фрагментов, каждый из которых представляет собой кубическую решетку стержней, жестко соединенных в ее узлах. Двумерный аналог такой решетки схематически изображен на рис. 1а. Очевидно, что свойства этого материала обладают кубической симметрией. В результате тензор модулей упругости описывается тремя независимыми параметрами – модулем Юнга  $E^0$ , коэффициентом Пуассона  $\nu^0$  и модулем сдвига  $G^0$ .

В дальнейшем эффективные упругие характеристики, рассчитанные с учетом или без учета изгиба элементов каркаса, будут обозначаться волной либо чертой над рассматриваемой величиной.

Первые два параметра определяют одноосное растяжение–сжатие (рис. 1б, в). В предположении об однородном деформировании тонких стержней, соосных направлению приложения нагрузки

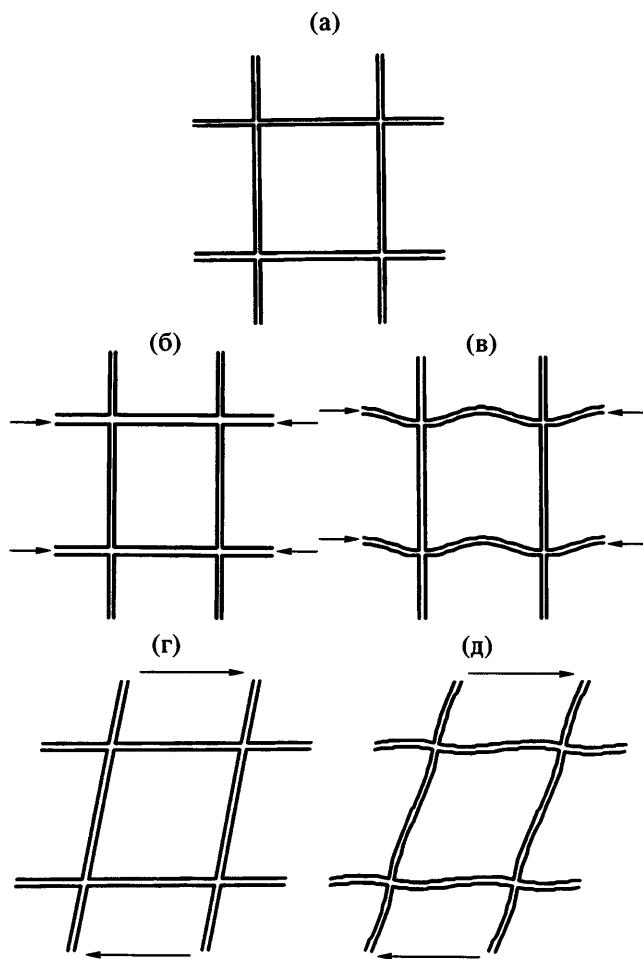


Рис. 1. Структуры исходного (а) и деформированных (б–д) состояний фрагмента каркаса в режимах одноосного сжатия (б, в) и сдвига (г, д). Изображены однородные (б, г) и изгибные (в, д) моды деформирования.

(рис. 1б), значения указанных параметров определяются выражениями

$$\bar{E}^0 = Eh^2 = E\frac{\phi}{3} \quad (1a)$$

$$\bar{v}^0 = 0, \quad (1b)$$

где  $h$  – относительная толщина (отношение толщины к длине) стержней квадратного сечения. Эта величина связана с объемным содержанием стержней  $\phi$  соотношением

$$\phi = 3h^2 \quad (2)$$

Однако хорошо известно [8], что однородное сжатие тонкого стержня (горизонтальные стерж-

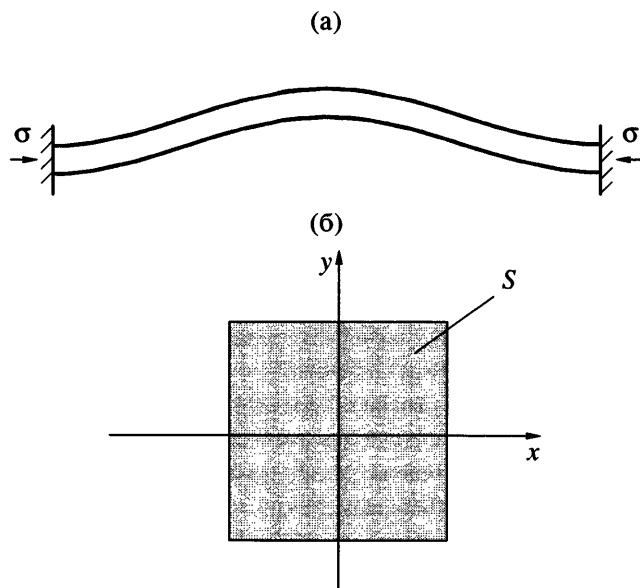


Рис. 2. Устойчивая изгибная мода сжатия стержня в условиях жесткой заделки обоих концов (а) и сечение, перпендикулярное оси  $x$  стержня (б).

ни на рис. 1б) становится неустойчивым, если прикладываемое напряжение  $\sigma$  превышает определенное (малое) критическое значение  $\sigma_{cr}$ . Поперечные смещения  $w$  средней линии стержня определяются уравнением

$$EJ \frac{d^4 w}{dx^4} + \sigma \frac{d^2 w}{dx^2} = 0 \quad (3a)$$

Здесь  $J$  – момент инерции стержня относительно оси  $z$ , перпендикулярной плоскости изгиба (рис. 2б),

$$J = \iint_S y^2 dx dy = \frac{h^4}{12} \quad (3b)$$

Второе равенство в выражении (3б) соответствует моменту инерции стержня квадратного сечения.

Условие периодичности деформирования жесткого каркаса при сжатии эквивалентно отсутствию поперечного смещения узлов, а также сохранению исходного направления в узлах каркаса (рис. 2а):

$$w|_{x=0} = w|_{x=l} = \frac{dw}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{dw}{dx}\Big|_{x=l} = 0 \quad (4)$$

Переменная  $x$  соответствует координате точки на средней линии деформируемого горизонтального стержня единичной длины. Она изменяется в пределах  $0 - \bar{l}$ , где длина горизонтальной стороны ячейки периодичности каркаса в сжатом состоянии  $\bar{l} \leq 1$ .

В условиях (4) минимальное напряжение потери устойчивости  $\sigma_{cr}$  определяется соотношением [8]

$$\sigma \geq \sigma_{cr} = 4\pi^2 EJ \quad (5)$$

Краевая задача (3), (4) описывает устойчивую изгибную моду сжатия стержня, изображенную на рис. 1в и рис. 2а, которая может быть представлена формулой [8]

$$w = b \left( 1 - \cos \left( \sqrt{\frac{\sigma}{EJ}} x \right) \right) \quad (6)$$

Значение параметра  $b$  может быть вычислено из условия сохранения длины. Величина  $\bar{l}$  задается как минимальный период решения (6),  $\bar{l} = 2\pi \sqrt{\frac{EJ}{\sigma}} < 1$  при  $\sigma > \sigma_{cr}$  и  $\bar{l} = l = 1$  при  $\sigma = \sigma_{cr}$ . Тем самым, деформация при сжатии составляет

$$\epsilon = \frac{\bar{l} - l}{l} = \bar{l} - 1 = 2\pi \sqrt{\frac{\sigma_{cr}}{EJ}} \frac{\sqrt{\sigma_{cr}} - \sqrt{\sigma}}{\sqrt{\sigma_{cr}\sigma}} \quad (7)$$

Модуль Юнга жесткого каркаса в приближении малых деформаций определяется как  $\tilde{E}^0 = -\frac{\sigma - \sigma_{cr}}{\epsilon} \Big|_{\epsilon \rightarrow 0}$ . С учетом критерия потери устойчивости (5) при однородном сжатии и формулы (7), его можно представить в виде

$$\tilde{E}^0 = \frac{2\pi^2 E\phi^2}{27} \quad (8)$$

Как и при однородном деформировании стержни, ортогональные оси сжатия остаются ненапряженными. Отсюда следует, что эффективный коэффициент Пуассона каркаса  $\tilde{\nu}^0 = 0$ .

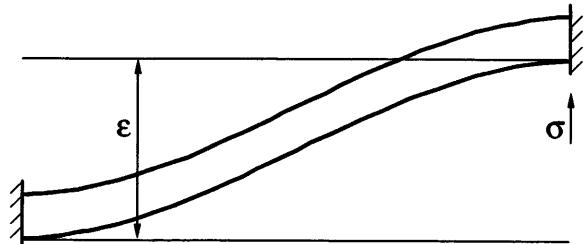


Рис. 3. Изгибная мода макроскопического сдвига тонких горизонтальных стержней регулярного каркаса.

Допущение об однородном сдвиговом деформировании составляющего каркас материала (рис. 1г) приводит к аналогичной (1а) оценке макроскопического модуля сдвига

$$\bar{G}^0 = G \frac{\phi}{3} \quad (9)$$

Для описания изгибной моды макроскопического сдвига каркаса (рис. 1д) следует воспользоваться решением задачи о вертикальном отклонении конца тонкого горизонтального стержня с жестко заделанными краями на величину  $\epsilon$  под действием вертикальной силы  $\sigma$  (рис. 3)<sup>1</sup>. Вычислив значение изгибающей силы  $\sigma = 1/2Eh^4\epsilon$  [8] и разделив его на сдвиговую деформацию  $\epsilon$ , получим аналогичную формуле (8) зависимость модуля сдвига от объемной доли жесткого каркаса:

$$\tilde{G}^0 = \frac{Eh^4}{4} = \frac{E\phi^2}{36} \quad (10)$$

Знание трех независимых параметров, определяющих упругое поведение каркаса кубической симметрии, рассчитанных как без учета ( $E^0 = \bar{E}^0$ ,  $v^0 = \bar{v}^0$ ,  $G^0 = \bar{G}^0$ , так и с учетом ( $E^0 = \tilde{E}^0$ ,  $v^0 = \tilde{v}^0$ ,  $G^0 = \tilde{G}^0$ ) изгибных деформаций составляющих его стержней, позволяет вычислить все компоненты соответствующих тензоров упругих модулей и податливостей:

<sup>1</sup> В выбранных относительных единицах размер ячейки периодичности каркаса кубической структуры и соответственно длина стержней приняты равными единице,  $l = 1$ . В этом случае вертикальное смещение совпадает с величиной сдвиговой деформации, а отклоняющая сила – с величиной сдвигового напряжения.

$$\begin{cases} C_{iiii}^0 = \frac{E^0(1-v^0)}{(1+v^0)(1-2v^0)} \\ C_{iiji}^0 = \frac{E^0 v^0}{(1+v^0)(1-2v^0)} \\ C_{ijij}^0 = G^0 \end{cases} \quad \begin{cases} J_{iiii}^0 = \frac{1}{E^0} \\ J_{iiji}^0 = -\frac{v^0}{E^0} \\ J_{ijij}^0 = \frac{1}{4G^0} \end{cases} \quad (11)$$

В произвольно ориентированной ортогональной системе координат  $\{x'_1, x'_2, x'_3\}$ , связанной с исходной системой  $\{x_1^0, x_2^0, x_3^0\}$  ортогональной матрицей  $A = [\alpha_{ij}]$ , преобразование компонент  $T_{ijkl}^0$  любого тензора  $T^0$  (в частности,  $T^0 = C^0$  или  $T^0 = J^0$ ) определяется сверткой

$$T'_{ijkl} = \alpha_{ip}\alpha_{jq}\alpha_{kr}\alpha_{ls}T_{pqrs}^0 \quad (12)$$

Ортогональное преобразование  $A$  может быть представлено последовательностью поворотов на угол  $\theta$  ( $0 - 2\pi$ ) вокруг оси  $x_1^0$  и на угол  $\theta$  ( $0 - \pi$ ) в плоскости, проходящей через ось  $x_1^0$  и составляющей угол  $\phi$  ( $0 - 2\pi$ ) с осью  $x_2^0$  (см., например, работу [9]).

Осреднение материального тензора произвольной анизотропии по равновероятным ориентациям осей симметрии

$$\langle T_{ijkl} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \iint_{\substack{0 \leq \psi \leq 2\pi \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi}} T'_{ijkl} \sin \theta d\psi d\theta d\phi \quad (13)$$

приводит к изотропному тензору, определяемому, как известно, двумя независимыми параметрами, например,  $\langle T_{1111} \rangle = \langle T_{2222} \rangle = \langle T_{3333} \rangle$  и  $\langle T_{1122} \rangle = \langle T_{1133} \rangle = \langle T_{2233} \rangle$ . В случае кубической симметрии тензора  $T^0$  интегрирование (13) приводит к формулам

$$\begin{cases} \langle T_{1111} \rangle = \frac{1}{5}(3T_{1111}^0 + 2T_{1122}^0 + 4T_{1212}^0) \\ \langle T_{1122} \rangle = \frac{1}{5}(T_{1111}^0 + 4T_{1122}^0 - 2T_{1212}^0) \end{cases} \quad (14)$$

Осреднения тензоров упругих модулей (приближение Фойхта, эквивалентное допущению об однородности деформаций в различных фрагмен-

тах структуры) или податливостей (приближение Райса, соответствующее однородности напряжений) позволяют найти верхние и нижние оценки эффективных модулей упругости [2]. В частности, для модуля Юнга получим

$$E^R \leq E^* \leq E^V \quad (15a)$$

$$E^V = \frac{\langle \langle C_{1111} \rangle - \langle C_{1122} \rangle \rangle (\langle C_{1111} \rangle + 2\langle C_{1122} \rangle)}{\langle C_{1111} \rangle + \langle C_{1122} \rangle} \quad (15b)$$

$$E^R = \frac{1}{\langle J_{1111} \rangle} \quad (15c)$$

Используя формулы (1), (8)–(11), (14) и (15), имеем

$$\frac{5\phi}{3(5+2v)} = \frac{\bar{E}^R}{E} \leq \frac{\bar{E}^*}{E} \leq \frac{\bar{E}^V}{E} = \frac{(5+2v)\phi}{3(5+4v)} \quad (16a)$$

$$\frac{10\pi^2\phi^2}{9(8\pi^2+9)} = \frac{\tilde{E}^R}{E} \leq \frac{\tilde{E}^*}{E} \leq \frac{\tilde{E}^V}{E} = \frac{2\pi^2(8\pi^2+9)}{27(16\pi^2+3)}\phi^2 \quad (16b)$$

Из соотношения (16a) видно, что для тонкого каркаса эффективный модуль упругости в отсутствие изгибной моды деформирования пропорционален объемному содержанию стержней  $\phi$ . Верхняя  $\bar{E}^V$  и нижняя  $\bar{E}^R$  оценки достаточно близки друг другу:  $1 \leq \frac{\bar{E}^V}{\bar{E}^R} \leq 1.8$  в допустимой области  $v = -1 - 0.5$  изменения коэффициента Пуассона.

Результатом учета изгибной деформации каркаса оказывается значительное уменьшение жесткости:  $\tilde{E}^* \propto \phi^2$  (см. выражение (16b)), а границы возможных значений модуля несколько шире, чем в предыдущем случае:  $\frac{\tilde{E}^V}{\tilde{E}^R} \approx 3.2$ .

## МОДЕЛЬ ТОНКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ

Очевидно, что даже в случае сильной геометрической анизотропии включений формирование ими жесткого каркаса не гарантировано: связность полимерной матрицы и дисперсность распределения включений весьма вероятны, особенно при небольших степенях наполнения. Кроме того, изгибу тонких частиц может заметно пре-

пятствовать полимерное связующее, даже несмотря на его относительную мягкость.

Адекватным описанием механических свойств таких систем может служить решение краевой задачи для системы уравнений механики сплошной среды в представительной ячейке материала неоднородной структуры (рис. 4а). Очевидна бесперспективность попыток отыскания аналитических подходов в этом направлении. В то же время использование численных методов, в частности метода конечных элементов, также сопряжено с преодолением значительных трудностей, связанных с асимметрией формы включений. Действительно, для достижения приемлемой точности численного решения каждое включение должно содержать по крайней мере десять конечных элементов в каждом направлении (см. увеличение маленького фрагмента структуры на рис. 4б, выбранного в представительной ячейке, показанной на рис. 4а). Если используется равномерная прямоугольная решетка конечных элементов, как показано на рис. 4б, то вдоль направления наибольшей протяженности частицы наполнителя должно располагаться около 1000 конечных элементов. Отношение размера представительной ячейки структуры к наибольшему размеру частиц наполнителя также не должно быть малым, иначе ячейка не будет представительной. Приняв указанное отношение равным 10, получим оценку общего числа конечных элементов в системе:  $10^8$  в двухмерном и  $10^{12}$  в трехмерном случаях. Оба эти значения недопустимо велики с точки зрения современных возможностей численного моделирования. Безусловно, размер системы может быть уменьшен путем подбора неравномерных сеток с помощью современных алгоритмов, специально разработанных для численного решения задач механики композитов [5]. Однако при большом отношении характерных размеров включений достижение приемлемых размеров системы конечных элементов останется проблематичным. Случай ориентации включений, согласованной с направлениями решетки конечных элементов, наиболее удобен для непосредственного применения стандартных кодов, что и было использовано авторами работы [6].

В настоящей статье предлагается новый конечноэлементный алгоритм, непосредственно предназначенный для анализа свойств компози-

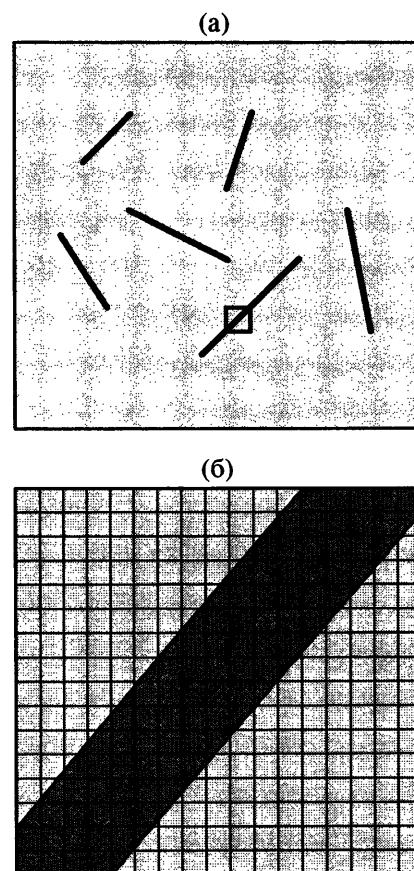
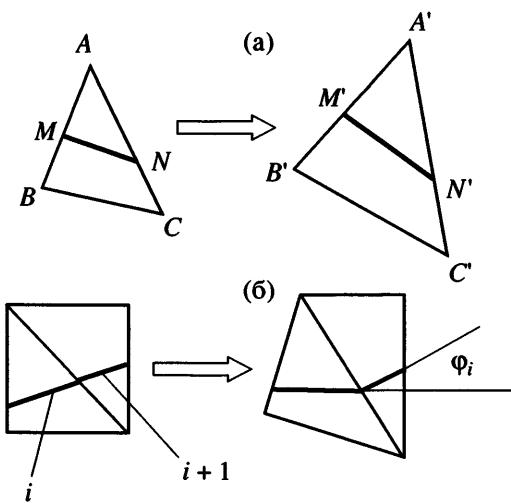


Рис. 4. Представительная ячейка структуры композита, наполненного включениями сильно анизотропной формы (а), и увеличенный прямоугольный фрагмент с квадратной решеткой узлов (б).

тов, наполненных тонкими включениями. Он основан на применении общепринятой процедуры линейной интерполяции смещений независимо от того, содержит рассматриваемый треугольный элемент линейный фрагмент включения (например, соответствующий отрезок его средней линии) (рис. 5а) или нет. Это означает, что отношения  $AM/AB$ ,  $AN/AC$  остаются неизменными в процессе деформирования:  $\frac{AM}{AB} = \frac{A'M'}{A'B'}, \frac{AN}{AC} = \frac{A'N}{A'C'}$ .

Накопленная конечным элементом упругая энергия определяется суммой энергий деформирования треугольного конечного элемента со свойствами матрицы

$$W_{ABC \rightarrow A'B'C'}^m = U_{ABC \rightarrow A'B'C'}^m S_{ABC} \quad (17a)$$



**Рис. 5.** Аффинная деформация треугольного конечного элемента с линейным фрагментом тонкого включения (а) и изгиб двух соседних участков, моделируемый в численном приближении изломом первоначально прямой линии (б).

( $U^m_{ABC \rightarrow A'B'C}$  – плотность упругой энергии,  $S_{ABC}$  – площадь треугольника) и линейного фрагмента наполнителя

$$W_{MN \rightarrow M'N}^f = \frac{\bar{E}^f (\varepsilon^f)^2}{2} M'N, \quad (176)$$

где  $\bar{E}^f = E'h$  – редуцированный на одномерное растяжение–сжатие модуль наполнителя,  $h$  – толщина включения, а величина продольной деформации  $\varepsilon^f = \frac{M'N - MN}{MN}$  (рис. 5а).

Для численного решения краевой задачи минимизировалась сумма энергий деформирования всех конечных элементов, входящих в представительную структурную ячейку (рис. 4а):

$$\sum_{ABC} W_{ABC} = \sum_{ABC} (W^m_{ABC \rightarrow A'B'C} + W_{MN \rightarrow M'N}^f) \quad (18)$$

Оригинальный численный алгоритм решения сформулированной задачи был разработан ранее и описан в предыдущих публикациях [10].

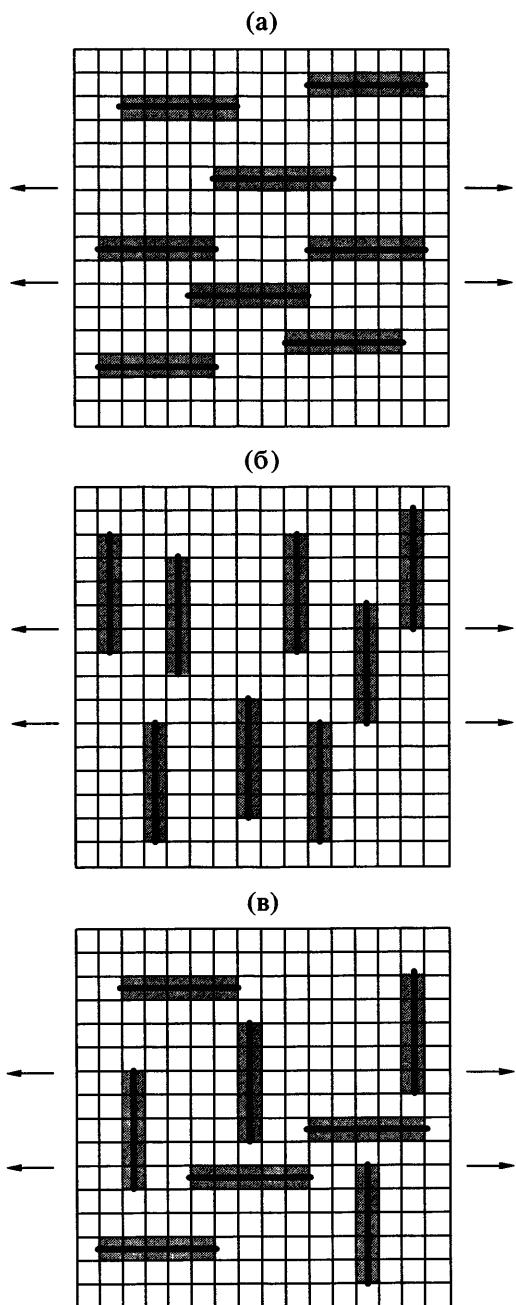
Видно, что толщина частиц  $h$  учитывается только при расчете редуцированного линейного модуля  $\bar{E}^f$  в выражении (176). По этой причине условимся далее называть предлагаемое приближение моделью тонких включений. Общеприня-

тое конечноэлементное приближение краевых задач механики композитов (будем называть его в дальнейшем моделью конечноэлементных включений) подразумевает разбиение областей обеих фаз на полномерные конечные элементы. Наиболее важной чертой модели тонких включений является предоставляемая ею возможность использовать регулярное или близкое к регулярному разбиение области решения на конечные элементы, аналогично случаю однородного или регулярно-неоднородного материала с изодиаметрической формой включений.

Очевиден следующий недостаток предложенного варианта модели тонких включений. Он состоит в пренебрежении сопротивлением тонких частиц изгибу (рис. 5б). Чем тоньше включение (чем больше характерное отношение  $\alpha$  наибольшего размера к наименьшему), тем более обоснованным оказывается пренебрежение энергией изгиба. Однако отмеченный недостаток в дальнейшем будет устранен добавлением в соотношение (18) слагаемых, зависящих от углов изгиба  $\Phi_i$  между соседними звеньями частиц, входящих в соседние конечные элементы.

Данные, полученные с использованием моделей тонких и конечноэлементных включений, сравниваются далее между собой на примере трех типов структурной организации. Частицы с характерным отношением размеров  $\alpha = 10$  случайно располагали вдоль (рис. 6а), поперек (рис. 6б) и продольно-поперечно (рис. 6в, 50% продольно, 50% поперечно) по отношению к направлению макроскопического растяжения, изображенного стрелками на рис. 6. Тонкие включения располагали вдоль средних линий конечноэлементных включений: соосно либо перпендикулярно направлению растяжения. Использовали треугольную систему конечных элементов. Ее формировали разбиением квадратов диагоналями, которые не показаны на рис. 6 во избежание его загромождения.

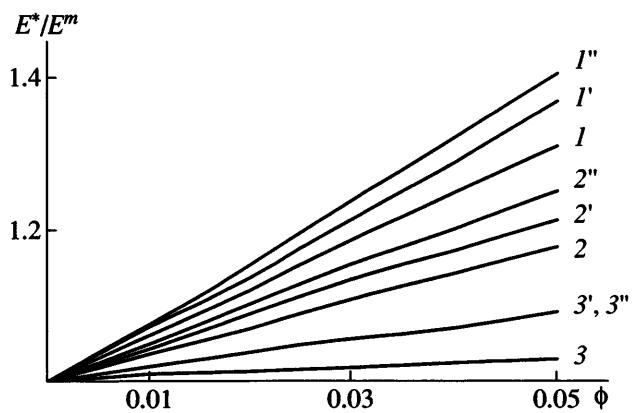
Относительный модуль Юнга составлял в численных расчетах  $E^f/E^m = 100$  (кривые 1'-3') и  $10^6$ , т.е. рассматривали также недеформируемые включения (кривые 1"-3"). Коэффициенты Пуассона фаз приняты равными  $v^f = 0.25$  и  $v^m = 0.2$  (индексы  $f$  и  $m$  соответствуют включениям и матрице).



**Рис. 6.** Схемы продольного (а), поперечного (б) и смешанного (50% продольно, 50% поперечно) (в) расположения тонких включений в конечноэлементной модели. Соответствующие конфигурации тонких включений показаны полужирными линиями.

Результаты, полученные с использованием моделей тонких и конечноэлементных включений, сопоставлены между собой на рис. 7. Из данных графиков видно следующее.

Эффективные модули нанокомпозитов, наполненных включениями сильно анизодиаметри-



**Рис. 7.** Концентрационные зависимости коэффициентов усиления нанокомпозитов, рассчитанные с использованием моделей тонких (1–3), конечноэлементных (1'–3') включений и в предположении об абсолютной жесткости включений (1''–3''). Характерное отношение размеров составляет  $\alpha = 10$ . Проанализированы продольная (1, 1', 1'', рис. 6а), поперечная (2, 2', 2'', рис. 6б) и смешанная (3, 3', 3'', рис. 6в) схемы армирования.

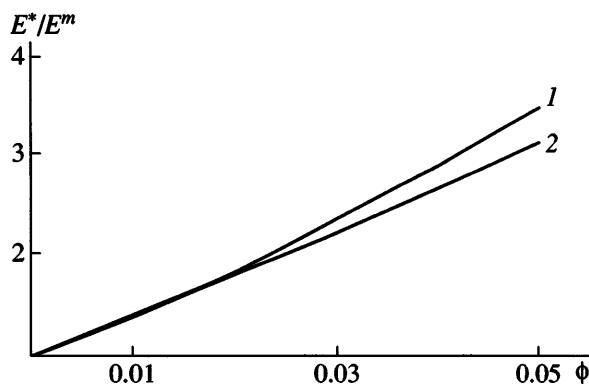
ческой формы, резко (по сравнению со случаем дисперсно наполненных композитов) возрастают с увеличением степени наполнения по крайней мере при продольном и смешанном армировании.

Продольное и поперечное расположения включений являются соответственно наиболее и наименее эффективными с точки зрения продольного усиления материала.

Модель конечноэлементных включений предсказывает большие значения жесткостей, чем модель тонких включений, хотя различие между ними не слишком велико.

Значения модулей, рассчитанные с использованием модели конечноэлементных включений при  $E^*/E^m = 100$  меньше, но близки к верхним границам, достижимым при наполнении полимера абсолютно жесткими включениями.

Первые два вывода вполне ожидаемы и, безусловно, подтверждают экспериментально наблюдаемые закономерности. Третий и четвертый выводы очень важны прежде всего как обоснование применимости модели тонких включений для описания механического поведения нанокомпозитов в случаях, когда модель конечноэлементных включений оказывается бессильной. Они реализуются при больших отношениях характерных размеров включений и(или) при сильной анизотропии механических свойств в условиях их случайной ориентации и распределения в пространстве.

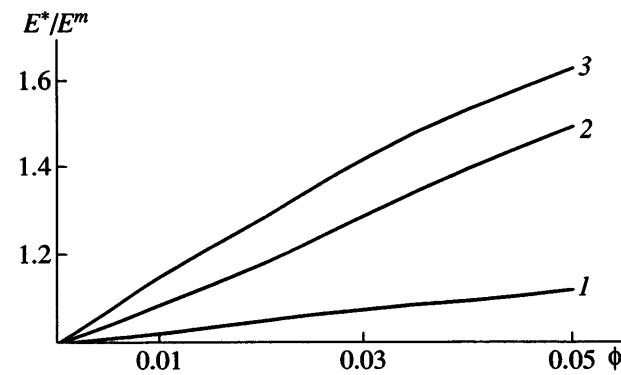


**Рис. 8.** Сравнение концентрационных зависимостей коэффициентов усиления нанокомпозитов наполнителем различного максимального размера  $l_i = 0.1l_c$  (1) и  $0.2l_c$  (2), рассчитанных с использованием модели тонких включений. Ориентация частиц продольная,  $\alpha = 100$ .

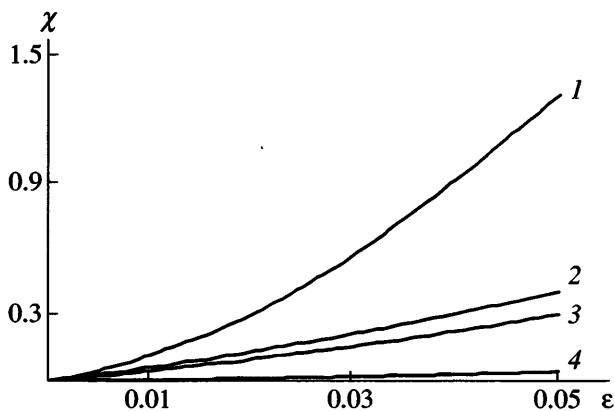
Некоторое превышение значений модулей упругости, рассчитанных с использованием модели конечноэлементных включений, тем более в предположении об абсолютной жесткости наполнителя, скорее всего, связано с затруднением и невозможностью реализации в последнем случае изгибных деформаций. Как уже отмечалось, рассматриваемая версия модели тонких включений предполагает их абсолютную гибкость. Следует отметить, что приближения самосогласования [1] также не допускают изгибных деформаций частиц ни при каких характерных отношениях, что аналогично приведет к завышению оценок эффективных модулей.

Второе обоснование применимости модели жестких включений представлено на рис. 8. Расчеты выполнены с использованием сетки конечных элементов размером  $100 \times 100$ . В основной части численных экспериментов длина анизотропных включений  $l_i$  составляла десятую часть размера  $l_c$  представительной ячейки структуры:  $l_i = 0.1l_c$ . Однако результаты моделирования не должны заметным образом зависеть от сделанного выбора, если рассматриваемый фрагмент структуры остается представительным. Сравнение концентрационных зависимостей эффективного модуля упругости, рассчитанных при  $l_i = 0.1l_c$  и  $l_i = 0.2l_c$  ( $\alpha = 100$ ), подтверждает сформулированное утверждение (рис. 8).

Известно, что чем выше характерное отношение размеров включений, тем больше жесткость композита. Указанная тенденция сохра-



**Рис. 9.** Концентрационные зависимости коэффициентов усиления нанокомпозитов при  $\alpha = 10$  (1), 50 (2) и 100 (3). Рассмотрено случайное расположение и ориентация включений.



**Рис. 10.** Изменение средней кривизны тонких включений в процессе растяжения при наполнении  $\phi = 2$  об. %,  $\alpha = 100$ . Рассмотрены четыре схемы армирования: случайная (1), продольная (2), смешанная (3) и поперечная (4).

няется и при учете изгиба, что подтверждает рис. 9, на котором продемонстрирована зависимость модуля упругости от отношения характерных размеров.

С целью оценить роль изгибных деформаций в формировании механических свойств нанокомпозитов рассчитывали и анализировали локальные  $\chi$  и средние  $\langle\chi\rangle$  значения кривизны включений. Средняя кривизна определялась соотношением

$$\langle\chi\rangle = \frac{\sum_i \int \chi dl}{\sum_i l_i} \quad (19)$$

Зависимости средней кривизны от степени вытяжки представлены на рис. 10 для композитов, содержащих 2% включений, ориентированных случайно, в направлении нагружения, параллельно-перпендикулярно ему и перпендикулярно ему. Видно, что степень искривления может быть значительной и резко возрастает по мере растяжения. Наиболее искривленными оказываются случайно расположенные включения, что обусловлено их сильным механическим взаимодействием. Наименьший изгиб реализуется при трансверсальном армировании, поскольку в этом случае передача напряжений от одного включения к другому через мягкую полимерную матрицу является наименее эффективной. Наиболее эффективно напряжения передаются аксиально ориентированными включениями. Однако основную роль в этой передаче играют не изгибные, а осевые деформации включений. По данной причине среднее искривление включений выше, чем при поперечном армировании, но ниже, чем при случайному. Смешанное расположение характеризуется меньшей долей включений, эффективно передающих нагрузку, но большей ролью изгибных деформаций в указанной передаче за счет подключения к ней трансверсально ориентированных частиц.

Авторы искренне благодарны Л.И. Маневичу за интерес к работе, полезные дискуссии и консультации.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mori T., Tanaka K. // *Acta Metall.* 1973. V. 21. № 5. P. 571.
2. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977.
3. Fornes T.D., Paul D.R. // *Polymer.* 2003. V. 44. № 17. P. 4993.
4. Eshelby J.D. // *Proc. Roy. Soc. A.* 1957. V. 241. P. 376.
5. Gusev A.A. // *Macromolecules.* 2001. V. 34. № 9. P. 3081.
6. Sheng N., Boyce M.C., Parks D.M., Rutledge G.C., Abes J.I., Cohen R.E. // *Polymer.* 2004. V. 45. № 2. P. 487.
7. Zhu Linjie, Narh K.A. // *J. Polym. Sci., Polym. Phys.* 2004. V. 42. № 12. P. 2391.
8. Тимошенко А.В. Устойчивость упругих систем. Л.: Наука, 1973.
9. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1966.
10. Herrmann K.P., Ошмян В.Г., Тиман С.А., Шамаев М.Ю. // Высокомолек. соед. С. 2002. Т. 44. № 9. С. 1677.

## Calculating the Rigidity of a Composite with Allowance for Flexural Deformations of the Filler

Al. Al. Berlin\*, V. G. Oshmyan\*, S. A. Patlazhan\*, S. A. Timan\*,  
M. Yu. Shamaev\*, and A. R. Khokhlov\*\*

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

\*\*Faculty of Physics, Moscow State University,  
Leninskie gory, Moscow, 119992 Russia

**Abstract**—Models for describing the mechanical properties of inhomogeneous fine-structure polymer systems with marked asymmetry (large aspect ratio) of one of their components are proposed. Solution of this problem by traditional methods of composite mechanics is limited by two circumstances. The first consists in marked flexural deformations of the fine objects, which are not taken into account in the well-developed analytical techniques based on self-consistency approximations. The second is that the marked structural asymmetry causes significant difficulties in the use of numerical techniques for solving boundary-value problems of composite mechanics because the small thickness of the inclusions (along with their great length) necessitates strong discretization of the continual equations. The backbone deformation model proposed in this study for a composite containing a fine-structure rigid cluster is based on the theory of bending of thin beams. A new numerical technique, which does not require overly fine partition of the integration domain, is developed as well. An important role of flexural deformations is demonstrated; among other things, they lead to a significant decrease in the elastic moduli of the composites.