ANMERKUNGEN ZUM SEMINARVORTAG POBEDRIA AM 20.10.1006

Über Rechnerische Mechanik der Komposite

Pobedria B. E.

In letzter Zeit ist viel die Rede von Nanostrukturen und Nanotechnologien. Manchmal sind dies Gespräche spekulativer Art aber oft sind sie durchaus gehaltvoll. Den Terminus „Nanotechnologie" schlug 1974 der japanische Wissenschaftler Norio Taniguti vor zur Beschreibung des Herstellungsprozesses neuer Objekte und Materialien mit Hilfe von Manipulationen mit einzelnen Atomen. Im Nanometermaßstab entstehen neue Effekte, die vor allem durch die Quantenmechanik beschrieben werden. Als Nanokomposite bezeichnet man inhomogene Gebilde, die nach Methoden der Nanotechnologie konstruiert worden sind.

Die Mechaniker bevorzugen hierbei die phänomenologische Vorgehensweise. Diese besteht in der Annahme der Postulate der Kontinuumsmechanik und der Analyse der sich daraus ergebenden Folgen. Die Einführung des Kontinuums gestattet die Nutzung des mathematischen Apparates der Differential- und Integralrechnung. Zur Beschreibung der Eigenschaften von Kompositen müssen Konstitutivgleichungen mit in den Koordinaten unstetigen Materialfunktionen betrachtet werden. Zur Lösung von Aufgaben der Kompositmechanik wird in letzter Zeit häufig die *Methode der Mittelbildung* [1] verwendet. Ihr Wesen besteht in der asymptotischen Entwicklung der gesuchten Funktionen nach einem bestimmten kleinen Parameter α, der sich aus dem Verhältnis des Durchmessers einer Strukturzelle des Komposits zum Durchmesser des betrachteten Körpers ergibt.

Durch Reihenentwicklung nach dem kleinen Parameter α kann ein gegebenes Problem in zwei rekurrente Problemfolgen zerlegt werden. Dabei werden die Konstitutivgleichungen im Sinne einer Momententheorie dargestellt, in welcher der Spannungstensor vom Tensor der Distorsion (des Verschiebungsgradienten) und von Distorsionstensoren mit zunehmender Ordnung abhängen.

In der *ersten* dieser rekurrenten Folgen wird das Problem für einen homogenen Körper gelöst, mit reduzierten (effektiven) Konstitutivbeziehungen. Jede Aufgabe dieser rekurrenten Folge unterscheidet sich von der vorhergehenden nur durch die veränderten „Eingangsdaten" (d. h. durch die rechten Seiten der Dgln.): Massen- und Oberflächenkräfte.

Um zur *zweiten* rekurrenten Problemfolge zu kommen, betrachten wir die klassische Methode des kleinen Parameters – die „Momenten"-Konstitutivbeziehungen werden auf gewöhnliche zurückgeführt. Im Ergebnis werden die Probleme für das inhomogene Kontinuum im Bereich eines Strukturelementes des Komposits gelöst. Jede Aufgabe dieser rekurrenten Folge unterscheidet sich von der vorhergehenden (ebenso wie in der ersten rekurrenten Folge) wiederum nur durch die „Eingangsgrößen". Durch Lösung jeder dieser Aufgaben finden wir lokale Funktionen, durch welche sich die durch die Inhomogenität der Struktur bedingten Veränderungen des Spannungs-Deformationszustandes und des Temperaturfeldes im Komposit beschreiben lassen.

Nach der Methode der Mittelbildung und unter Nutzung weiterer numerischer Methoden der Mechanik [2] können Mikrospannungen und Mikrotemperaturen mit beliebiger Genauigkeit berechnet werden. Für Schichtkomposite mit elastischen, linear-viskoelastischen und auch elastisch-plastischen Komponenten lassen sich die effektiven Charakteristiken in bestimmten Fällen auch analytisch bestimmen [1].

Als Beispiel betrachten wir ein Schichtkomposit mit elastischen Komponenten, bei denen die Dicken einiger Schichten um mehrere Größenordnungen kleiner sind als die Dicken der anderen. Die extrem dünnen Komponenten wollen wir als Nanokomponenten bezeichnen. Ihre mechanischen Eigenschaften lassen sich experimentell sehr schwer bestimmen, in den meisten Fällen ist dies praktisch unmöglich. Wir bezeichnen die vierstufigen Tensoren der Elastizitätsmoduli einer jeden Komponente mit $\underset{\sim}{C}^{(i)}$, wobei i – Nummer der Komponente. Angenommen, wir haben α Makrokomponenten (deren Elastizitätsmoduli aus Versuchen bestimmt werden können) und β Nanokomponenten. Wir setzen voraus, dass alle Elastizitätstensoren invariant in Bezug auf bestimmte Transformationsgruppen [3] sind.

Den in [1] eingeführten Tensor der effektiven Moduli $\underset{\sim}{h}$ schreiben wir als Tensorfunktion

$$\underset{\sim}{h} = \underset{\sim}{f}\left(\underset{\sim}{C}^{(1)},\underset{\sim}{C}^{(2)},....\underset{\sim}{C}^{(\alpha)};\underset{\sim}{C}^{(\alpha+1)},....\underset{\sim}{C}^{(\alpha+\beta)};\kappa_1,\kappa_2,....\kappa_n\right),$$

wobei $\kappa_1,...\kappa_n$ – Konstanten, welche den Aufbau des untersuchten Komposits kennzeichnen. Wir bilden irgendeine *Invariante des Tensors* $\underset{\sim}{h}$, die wir mit D bezeichnen: $D = Inv(\underset{\sim}{h} - \underset{\sim}{f})$. Die Zahl der unabhängigen Komponenten des Elastizitätstensors $\underset{\sim}{C}^{(i)}$ einer Nanokomponente sei q_i $(i = 1,2,\ldots, ß)$. Wir bilden nun ein System von $r = \sum_{i=1}^{q} q_i$ nichtlinearen algebraischen Gleichungen mit r Unbekannten:

$$\frac{\partial D}{\partial \underset{\sim}{C}^{(1)}} = 0, \quad \frac{\partial D}{\partial \underset{\sim}{C}^{(2)}} = 0,.......\frac{\partial D}{\partial \underset{\sim}{C}^{(r)}} = 0\,.$$

Diese Gleichungen lassen sich mit einer geeigneten Methode [2] lösen.

Als theoretische Grundlage der Nanomechanik kann ein Zweiniveau-Kontinuum dienen. Für seinen Aufbau wird jedes Teilchen des Mediums als Kontinuum des zweiten Niveaus (Mikrokontinuum) aufgefasst. Der einfachste Fall eines solchen Mikrokontinuums ist das *Modell von Cosserat* [4]. Bei diesem Modell ist der Spannungstensor σ_{ij} nicht mehr symmetrisch und es wird der ebenfalls nichtsymmetrische Tensor der Momentenspannungen μ_{ij} eingeführt.

Angemerkt sei, dass die Momentenmechanik des Kontinuums auf natürliche Weise bei der oben beschriebenen Methode der Mittelbildung in Erscheinung tritt. Die Konstitutivgleichungen werden hier durch Operatoren angegeben, welche die Tensoren σ_{ij} und μ_{ij} mit den kinematischen Tensoren verbinden: mit der Distorsion $u_{i,j}$ (Gradient des Verschiebungsvektors u_i) und der Krümmung κ_{ij}. Für ein elastisches Medium schreibt man diese Gleichungen in der Form

$$\sigma_{ij} = A_{ijkl}u_{k,l} + B_{ijkl}\kappa_{kl};$$
$$\mu_{ij} = B_{ijkl}u_{k,l} + D_{ijkl}\kappa_{kl}.$$

Die vierstufigen Materialtensoren $A_{ijkl}, B_{ijkl}, D_{ijkl}$ müssen experimentell bestimmt werden. Bisher aber sind solche Experimente in der Literatur nicht beschrieben.

Die Methode der Mittelbildung [1] ermöglicht eine theoretische Bestimmung der fehlenden Materialtensoren. Dazu wird ein sogenannter *Strukturvektor* des Komposits $\vec{\varphi}$ eingeführt mit den Komponenten

$$\varphi_i(\xi) = \alpha\xi_i\left(1 + \alpha a_j\xi_j + \alpha^2 b_{jk}\xi_j\xi_k + \ldots\right),$$

wobei $a_j, b_{jk}, \ldots$ bekannte Größen und ξ_i – sogenannte „schnelle" Koordinaten darstellern, die mit den globalen Koordinaten x_i über die Formel $\xi_i = x_i / \alpha$ verbunden sind. In der Arbeit [5] findet man die nach der Theorie der nullten Näherung [1] bestimmten Materialtensoren $A_{ijkl}, B_{ijkl}, D_{ijkl}$.

Für die Entwicklung des Apparates der rechnerischen Mechanik der Nanokomposite ist die Problemformulierung „in den Spannungen" von Bedeutung. Die Grundaufgabe der Mechanik des deformierbaren festen Körpers hängt nämlich mit dem Problem der Materialzerstörung zusammen. Bei der Lösung „in den Verschiebungen" ergibt sich die Notwendigkeit des numerischen Differenzierens, was bekanntlich die Genauigkeit der Lösung um eine Größenordnung vermindert. In der Arbeit [6] wird die korrekte Problemstellung nach der Momententheorie der Elastizität angegeben, die auf 18 Verträglichkeitsgleichungen bezüglich der 18 unabhängigen Tensorkomponenten σ_{ij} und μ_{ij} führt, bei Berücksichtigung der klassischen Randbedingungen und der auf den Körperrand bezogenen Gleichgewichts-gleichungen.

Die rechnerische Mechanik der Nanokomposite ist stark in Entwicklung, parallel zur Entwicklung der Rechentechnik und der Methoden der mathematischen Modellierung.

Bibliografische Verweise

1. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. М.: Изд-во МГУ, 1984.
2. Победря Б.Е. Численные методы в теории упругости и пластичности. М.: Изд-во МГУ, 1995.
3. Победря Б.Е. Лекции по тензорному анализу. М.: Изд-во МГУ, 1986.
4. Cosserat E., Cosserat F. Theorie des corps deformables. Paris, Hermann, 1909.
5. Победря Б.Е., Омаров С.Е. Определяющие соотношения моментной теории упругости// Вестн. МГУ. Матем. Механ. (2007) 3. С. 56-58.
6. Победря Б.Е. Статическая задача несимметрической теории упругости для изотропной среды// Вестн. МГУ. Матем. Механ. (2005) 1. С. 54-59.