УДК 539

Силовые упругие поля локальных микродефектов в напряженных полимерах и композитах на их основе

© А.А. Валишин[1], Т.С. Миронова[2]

[1] МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия
[2] Московский государственный университет тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, 119234, Россия

Статья посвящена описанию механизма упругого взаимодействия локальных микродефектов, называемых дырками, которые образуются и накапливаются в зоне вынужденной эластичности перед фронтом трещины разрушения в полимерах. Рассчитаны упругие поля дырок, их собственная упругая энергия, энергия взаимодействия дырок и сила их парного взаимодействия. Показано, что взаимодействие дырок приводит к тому, что каждая дырка окружена скоплением более мелких дырок.

Ключевые слова: *упругие поля, локальные микротрещины, напряженные полимеры и композиты.*

Введение. Разрушение твердых тел, в частности полимеров и композитов на их основе, представляет собой процесс накопления внутренних микроповреждений до некоторого критического состояния [1–7]. Этот процесс локализован преимущественно в слабых местах структуры материала, где возникают очаги перенапряжений, в которых механическое напряжение значительно больше, чем вдали от них. Такими очагами прежде всего являются микро- и макротрещины [8–10]. В температурном диапазоне между температурой хрупкости и температурой квазихрупкости в линейных полимерах перед фронтом трещины под влияниям высоких напряжений развивается вынужденная эластическая деформация и образуется зона вынужденной эластичности. Локальные микроповреждения в первую очередь накапливаются в этой зоне.

Локальные микродефекты упругих полимеров. Как было показано в работе [7], при элементарном акте разрыва в месте происшествия возникает локальная элементарная деформация типа расширения, а при элементарном акте рекомбинации — элементарная деформация типа стягивания. Элементарная деформация локализована в малом объеме v_0 около точки происшествия. По порядку величины объем v_0 равен объему, занимаемому кинетической единицей, участвовавшей в элементарном акте, т. е. объему одной или нескольких химических связей, если флуктуационный элементарный акт был групповой. Определим упругое состояние, возникающее вследствие происшествия одного элементарного акта. Поместим начало координат в точку происшествия и сделаем простейшее естественное предположение, что упругое поле смещений, порождаемое элементарным актом, сферически симметрично. Это означает, что вектор смещения

$$\mathbf{u}(r) = u_r(r)\frac{\mathbf{r}}{r}, \tag{1}$$

т. е. зависит только от расстояния r до центра и направлен вдоль радиуса-вектора. При этом для элементарного акта разрыва функция $u_r(r) > 0$, а для акта рекомбинации — $u_r(r) < 0$. Для определения поля смещений воспользуемся уравнением равновесия упругой среды, записанным в перемещениях [11, 12]:

$$\left(K + \frac{1}{3}G\right)\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{u} + G\Delta\mathbf{u} = 0, \tag{2}$$

где K — модуль объемного сжатия; G — модуль сдвига; Δ — оператор Лапласа. Подставляя в уравнение (2) выражение (1), после преобразований получаем

$$r^2\frac{d^2u_r}{dr^2} + 2r\frac{du_r}{dr} - 2u_r = 0. \tag{3}$$

Уравнение (3) представляет собой известное уравнение Эйлера. Его общее решение имеет вид

$$u_r(r) = \frac{C_1}{r^2} + C_2 r.$$

При $r \to \infty$ функция $u_r(r) \to 0$, следовательно, константа $C_2 = 0$, т. е. имеем

$$u_r(r) = \frac{C}{r^2} \tag{4}$$

и, значит, вектор смещения

$$\mathbf{u}_r(r) = \frac{C}{r^3}\mathbf{r} \tag{5}$$

или

$$\mathbf{u}(r) = -C\operatorname{grad}\frac{1}{r}.$$

Элементарные акты разрушения (разрыва и рекомбинации) вызывают дополнительные силы, действующие со стороны возникшего дефекта на ближайшее окружение. С макроскопической точки зрения это эквивалентно наличию некоторой объемной силы, приложенной в месте расположения дефекта. Чтобы найти объемную плотность $\mathbf{f}$ этих сил, воспользуемся уравнением равновесия

$$\left(K+\frac{1}{3}G\right)\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{u}+G\Delta\mathbf{u}+\mathbf{f}=0. \qquad (6)$$

Подставляя в уравнение (6) выражение (5), после преобразований получаем

$$\mathbf{f}=-4\pi C\left(K+\frac{4}{3}G\right)\operatorname{grad}\delta(\mathbf{r}). \qquad (7)$$

Здесь использовано соотношение

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(\mathbf{r}), \qquad (8)$$

где $\delta(\mathbf{r})$ — трехмерная дельта-функция.

Константа C в формуле (7) является мерой мощности сингулярности, порождаемой элементарным актом, которая полностью определяется величиной объемом v_0. Действительно, изменение объема среды, вызванное полем смещения (5),

$$v_0=\int\operatorname{div}\mathbf{u}\,dV=-C\int\operatorname{div}\operatorname{grad}\frac{1}{r}\,dV=-C\int\Delta\left(\frac{1}{r}\right)dV=$$

$$=C\int 4\pi\delta(\mathbf{r})\,dV=4\pi C. \qquad (9)$$

Интегрирование уравнения (9) проводится по всему объему среды, в данном случае по объему зоны вынужденной эластичности. Но поскольку поле смещений (4) быстро убывает с расстоянием от центра, то фактически интегрирование распространяется только на ближайшую окрестность центра. Следовательно, объем v_0 — объем сферы действия элементарного акта, т. е. можно сказать, что v_0 — объем одного элементарного акта (разрыва или рекомбинации). Тогда из формулы (9) следует, что константа C с точностью до множителя равна объему элементарного акта, т. е.

$$C=\frac{1}{4\pi}v_0. \qquad (10)$$

Таким образом, элементарные акты разрыва и рекомбинации локально изменяют объем окрестности места происшествия. Подставив теперь константу C в (10), получим

$$\mathbf{u}(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi}\frac{v_0}{r^3}\mathbf{r} \qquad (11)$$

или

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} u_0 \operatorname{grad} \frac{1}{r},$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = -v_0 \left(K + \frac{4}{3} G \right) \operatorname{grad} \delta(\mathbf{r}).$$

При элементарном акте рекомбинации созданная им деформация связана со смещением ближайших атомов навстречу один другому, стремясь как бы «залечить» образовавшийся дефект. При элементарном акте разрыва, наоборот, смещение ближайших атомов направлено от центра вследствие декомпенсации сил межатомного притяжения. Иными словами, при элементарном акте разрыва константу C и элементарный объем v_0 нужно считать положительными, а при акте рекомбинации — отрицательными.

Локальное поле упругого смещения, возникающее при элементарных актах, порождает такие же локальные поля деформаций и перемещений. Локальная деформация, возникающая при элементарных актах, определяется через поле смещений обычным образом [2, 13]:

$$\eta_{ik} = \frac{1}{2} \left(\nabla_i u_k + \nabla_k u_i \right), \tag{12}$$

где символом ∇ обозначен оператор дифференцирования по пространственным координатам; $\nabla_i = \dfrac{\partial}{\partial x_i}$. Подставляя в формулу (12) выражение (11), получаем

$$\eta_{ik} = \frac{v_0}{4\pi} \left(\frac{\delta_{ik}}{r^3} - 3 \frac{x_i x_k}{r^5} \right). \tag{13}$$

Здесь δ_{ik} — символ Кронекера (единичный тензор второго ранга); x_i — координаты радиуса-вектора $\mathbf{r}$, направленного из места происшествия элементарного акта в точку наблюдения. Из формулы (13), в частности, следует, что след тензора элементарной деформации $\eta_{kk} = 0$, значит, эта деформация представляет собой чистый сдвиг. Для того чтобы получить элементарный тензор напряжений, воспользуемся законом Гука:

$$T_{ik} = K \eta_{ll} \delta_{ik} + 2G \left(\eta_{ik} - \frac{1}{3} \eta_{ll} \delta_{ik} \right). \tag{14}$$

Подставив в формулу (13) выражение (14), получим тензор напряжений

$$T_{ik} = \frac{v_0}{2\pi} G \left(\frac{\delta_{ik}}{r^3} - 3\frac{x_i x_k}{r^5} \right). \tag{15}$$

Из формулы (15) также следует, что поле напряжений чисто сдвиговое.

Необходимо сделать два важных замечания. Во-первых, упругое состояние элементарного акта (т. е. поля смещений, деформаций и напряжений) локально, т. е. сосредоточено в малой окрестности точки его происшествия. Во-вторых, локальные акты разрыва и рекомбинации происходят флуктуационно, т. е. случайно. Из этого следует, что возникающие упругие поля смещений, деформаций и напряжений также случайно флуктуируют во времени и пространстве.

В теории упругости источник упругого состояния, описываемый приведенными выше формулами (плотность объемных сил, смещения, деформации и напряжения) называют центром дилатации [14, 15]. Каждый элементарный акт разрушения создает случайный временный центр дилатации, имеющий некоторое конечное время существования.

Упругое взаимодействие дырок. Дырки в зоне вынужденной эластичности возникают в результате флуктуационного распада слабых узлов несущего каркаса и являются стабильными дефектами, создавая собственное упругое поле [2]. Слабый узел, расположенный в некоторой точке M, т. е. потенциальная дырка в этой точке, содержит $\delta n_0(M) = \Omega\rho_0(M)\delta V(M)$ несущих элементов, каждый из которых при элементарном акте разрыва создает центр дилатации. Поэтому дырка эквивалентна скоплению δn_0 точечных центров дилатации. Их упругие поля, т. е. смещения, деформации и напряжения, аддитивно суммируются. При этом дырка может иметь неправильную форму, необязательно сферическую. Если поместить начало координат в какую-либо геометрическую точку дырки — «центр» дырки, упругое поле смещений, создаваемое дыркой, будет описываться соотношением

$$u_i(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} v_0 \delta n_0 \Omega_{ik} \nabla_k \left(\frac{1}{r} \right). \tag{16}$$

Здесь симметричный тензор $\Omega_{ik} = \Omega_{ki}$ — форм-фактор дырки — определяет ее геометрическую форму. Как и всякий симметричный тензор второго ранга, он может быть приведен к главным осям. Направление главных осей и главные значения тензора Ω_{ik} характеризуют отличие формы дырки от сферической. Для симметричной сферической дырки все три главных значения равны и форм-тензор Ω_{ik} в любой системе координат пропорционален единичному тензору, т. е. $\Omega_{ik} = \delta_{ik}$. Различные случаи неравенства главных значений определяют разную степень отличия дырки от сферической формы. В принципе дырка может иметь сколь угодно сложную форму, вплоть до чечевицеобразной внутренней субмикротрещины.

Чтобы получить собственное поле деформаций дырки, подставим формулы (16) в выражение типа (12), тогда

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{4\pi} v_0 \delta n_0 \left(\frac{\Omega_{ik}}{r^3} - 3\Omega_{ij} \frac{x_j x_k}{r^5} \right).$$

Собственное поле напряжений, согласно закону Гука, определяется следующим соотношением:

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{4\pi} v_0 \delta n_0 \left\{ \left[\left(K - \frac{2}{3} G \right) \Omega_{nn} \delta_{ik} + 2G\Omega_{ik} \right] \frac{1}{r^3} - \right.$$
$$\left. -3 \left[\left(K - \frac{2}{3} G \right) \Omega_{lj} \delta_{ik} + 2G\Omega_{ik} \delta_{lk} \right] \frac{x_j x_k}{r^5} \right\}. \qquad (17)$$

След тензора деформации дырки

$$\varepsilon_{kk} = \frac{1}{4\pi} v_0 \delta n_0 \left(\frac{\Omega_{kk}}{r^3} - 3\Omega_{kj} \frac{x_j x_k}{r^5} \right), \qquad (18)$$

след тензора напряжений

$$\sigma_{kk} = \frac{3K}{4\pi} v_0 \delta n_0 \left(\frac{\Omega_{kk}}{r^3} - 3\Omega_{jk} \frac{x_j x_k}{r^5} \right).$$

Неравенство нулю следа тензора деформаций говорит о том, что, в отличие от упругого поля одиночного центра дилатации, собственное упругое поле несимметричной (несферической) дырки не является чисто сдвиговым — в каждой точке области своего действия это поле вызывает изменение объема упругой среды. След тензора напряжений определяет в каждой точке среднее гидростатическое давление

$$p_0 = -\frac{1}{3}\sigma_{kk} = -\frac{K}{4\pi} v_0 \delta n_0 \left(\frac{\Omega_{kk}}{r^3} - 3\Omega_{jk} \frac{x_j x_k}{r^5} \right).$$

Отличие тензора напряжений (17) от этого выражения свидетельствует о наличии в среде сдвиговых напряжений, создаваемых дыркой. Если дырка симметричная (сферическая), то $\Omega_{ij} = \delta_{ij}$ и

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{4\pi} v_0 \delta n_0 \left(\frac{\delta_{ik}}{r^3} - 3\frac{x_i x_k}{r^5} \right),$$
$$\sigma_{ik} = \frac{1}{2\pi} G v_0 \delta n_0 \left(\frac{\delta_{ik}}{r^3} - 3\frac{x_i x_k}{r^5} \right). \qquad (19)$$

В этом случае собственное упругое поле дырки чисто сдвиговое: $\varepsilon_{kk} = \sigma_{kk} = 0,$ и вызывает в каждой точке только изменение формы, но не объема. Таким образом, сферическая дырка эквивалентна центру дилатации, только увеличенной мощности.

Мы установили, что дырка является источником собственного упругого поля, которое описывается приведенными ранее формулами для смещений, деформаций и напряжений. Упругое поле дырки формируется по мере распада соответствующего слабого узла несущего каркаса. Дырка является стабильным дефектом, ее упругое поле стабильно и не подвержено случайным флуктуациям.

Вычислим энергию собственного упругого поля дырки. Ограничимся симметричной (сферической) дыркой. При рассмотрении общего случая несимметричной дырки резко усложняются промежуточные алгебраические преобразования, которые не вносят ничего нового в окончательные выводы. Как известно, плотность упругой энергии деформированного тела

$$\varphi = \frac{1}{2}\varepsilon_{ik}\sigma_{ik}. \qquad (20)$$

Подставив в формулу (20) выражение (19), после преобразований получим

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{3}{8\pi^2} v_0^2 (\delta n_0)^2 \frac{G}{r^6}.$$

Ясно, что плотность упругой энергии поля дырки быстро убывает с расстоянием от нее. Кроме того, она сильно зависит от мощности слабого узла, на месте которого возникла. Теперь, проинтегрировав по всему окружающему дырку объему, определим полную энергию собственного упругого поля дырки:

$$\Phi = \int \varphi(\mathbf{r})\, dV = \frac{3}{8\pi^2} v_0^2 (\delta n_0)^2 G \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_a^{\infty} \frac{dr}{r^4} =$$

$$= \frac{1}{2\pi}(v_0 \delta n_0)^2 \frac{G}{a^3}.$$

Здесь интегрирование ведется по сферическим координатам; a — диаметр дырки. Из этих формул следует, что 90 % энергии собственного поля дырки сосредоточено в ее окрестности радиусом, равным удвоенному диаметру дырки $2a$. Это означает, что сфера влияния дырки простирается не более чем на два ее диаметра. Этот вывод остается в силе и для дырки произвольной формы.

Итак, мы установили, что дырка является источником внутренних напряжений. С макроскопической точки зрения она эквивалентна распределению объемных сил плотностью

$$f_i = -\left(K + \frac{4}{3}G\right) v_0 \delta n_0 \, \Omega_{ik} \nabla_k \delta(\mathbf{r}), \tag{21}$$

для сферической дырки плотность

$$f = -\left(K + \frac{4}{3}G\right) v_0 \delta n_0 \, \mathrm{grad}\, \delta(\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, направленный в точку наблюдения из некоторого центра дырки, куда помещено начало координат.

Свойство дырки играть роль источника упругого поля является основным при описании в дальнейшем взаимодействия дырок. Для этого необходимо переписать формулу (21), перейдя в ту систему координат, в которой мы рассматриваем зону вынужденной эластичности. В этой системе начало координат находится в вершине трещины, а ось абсцисс направлена перпендикулярно фронту трещины. Если дырка находится в некоторой точке M, ее положение определяется радиусом-вектором $\mathbf{r}_0$. Точка наблюдения определяется радиусом-вектором $\mathbf{r}$. Тогда плотность объемных сил, создаваемых дыркой в точке $M(\mathbf{r}_0)$, имеет вид

$$\mathbf{f}\,\frac{\mathbf{r}}{M} = -\left(K + \frac{4}{3}G\right) v_0 \delta n_0 (M)\, \mathrm{grad}\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0).$$

Образование дырки, т. е. микрополости, в зоне эластичности вызывает локальное изменение силовых связей между соседними атомами в ближайшей окрестности дырки. Силовые межатомные связи определяют в конечном итоге модули упругости среды. Поэтому при макроскопическом описании дырки изменение силовых связей можно смоделировать локальным изменением упругих модулей. Для изотропной среды тензор модулей упругости [5]

$$C_{ijkl} = \left(K - \frac{2}{3}G\right) \delta_{ij}\delta_{kl} + G\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right),$$

т. е. в этом случае упругое состояние характеризуется двумя константами — модулем объемного сжатия K и модулем сдвига G. Возмущенный тензор упругости запишем в виде

$$C'_{ijkl} = C_{ijkl} + \vartheta \Delta C_{ijkl} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \tag{22}$$

где возмущение тензора модулей упругости C_{ijkl}

$$\Delta C_{ijkl} = \left(\Delta K - \frac{2}{3} \Delta G \right) \delta_{ij} \delta_{kl} + \Delta G \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right). \qquad (23)$$

В формулах (22), (23) ΔK и ΔG — возмущения объемного модуля и модуля сдвига; ϑ — множитель размерности объема, по порядку величины равный объему дырки, $\vartheta \approx \delta V$; дельта-функция показывает, что возмущение упругих модулей локализовано в точке $M\left(\mathbf{r}_0\right)$, т. е. в месте нахождения дырки.

Таким образом, дырка представляет собой как сосредоточенный источник объемной силы, так и локальную неоднородность.

Рассчитаем энергию взаимодействия дырки с внешним упругим полем. Для этого найдем работу A, производимую силами внутренних напряжений в зоне эластичности при изменении вектора деформации $\mathbf{u}$ на величину $\delta\mathbf{u}$. По определению,

$$\delta A = \int\limits_S \sigma_{ik} \delta u_k dS_i = \int\limits_V \nabla_i \left(\sigma_{ik} \delta u_k \right) dV.$$

Интегрирование в левой части проводится по границе S зоны эластичности, а преобразование в интеграл — по объему этой зоны V с помощью теоремы Остроградского — Гаусса. Выполнив в правой части преобразование, используя тождество

$$\nabla_i \left(\sigma_{ik} \delta u_k \right) = \left(\nabla_i \sigma_{ik} \right) \delta u_k + \sigma_{ik} \nabla_i \delta u_k,$$

получим

$$\delta A = \int\limits_V \left(\nabla_i \sigma_{ik} \right) \delta u_k dV + \int\limits_V \sigma_{ik} \nabla_i \delta u_k dV. \qquad (24)$$

Для вычисления первого интеграла применим уравнение равновесия упругой среды зоны эластичности в виде

$$\nabla_i \sigma_{ik} + f_k = 0$$

и выражение для плотности объемной силы (21). Тогда

$$\int\limits_V \left(\nabla_i \sigma_{ik} \right) \delta u_k dV = -\int\limits_V f_k \delta u_k dV =$$

$$= \left(K + \frac{4}{3} G \right) v_0 \rho_0 \left(M \right) \delta V \left(M \right) \Omega_{kl} \left(M \right) \int\limits_V \left(\nabla_l \, \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 \right) \right) \delta \, u_k \, dV. \qquad (25)$$

Для вычисления этого интеграла используем тождество

$$\left[\nabla_l \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 \right) \right] \delta u_k = \nabla_l \left[\delta u_k \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 \right) \right] - \left(\nabla_l \delta u_k \right) \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 \right).$$

Затем интеграл разобьем на два, первый из них преобразуем в интеграл по границе зоны эластичности, и он оказывается равным нулю. Так как дельта-функция в точках граничной поверхности равна нулю, используем также тождество

$$\Omega_{kl}\nabla_l\,\delta u_k = \Omega_{lk}\delta\varepsilon_{lk}.$$

В результате интеграл (25) оказывается равным следующему интегралу:

$$\int\limits_V \left(\nabla_i\sigma_{ik}\right)\delta u_k\,dV = -\left(K+\frac{3}{4}G\right)v_0\,\delta n_0\,\Omega_{ik}\left(M\right)\delta\,\varepsilon_{ik}\left(M\right). \qquad (26)$$

В формуле (26) деформация ε_{ik} и вариация $\delta\varepsilon_{ik}$ определяются в точке нахождения дырки и относятся к внешнему полю, созданному внешними силами, не причастными к дырке.

Для вычисления второго интеграла (24) воспользуемся равенством

$$\sigma_{ik}\,\varepsilon_{ik} = \sigma_{ik}\nabla_i u_k,$$

которое запишем в виде

$$\int\limits_V \sigma_{ik}\nabla_i\,\delta u_k\,dV = \int\limits_V \sigma_{ik}\,\delta\varepsilon_{ik}dV. \qquad (27)$$

Согласно закону Гука, имеем

$$\sigma_{ik} = C'_{ijklm}\,\varepsilon_{lm}, \qquad (28)$$

где тензор модулей упругости C'_{ijklm} определен в формуле (22). Если упругая среда однородная, модули K и G не зависят от координат. Дырка создает локальную неоднородность упругих модулей, в результате чего модули K и G, а также тензор упругости C_{ijklm} зависят от координат в соответствии с формулами (22), (23). Подставляя их в соотношение (28), а затем в интеграл (27) получаем

$$\int\limits_V \sigma_{ik}\delta\varepsilon_{ik}\,dV = \int\limits_V C_{ijklm}\,\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}\,dV + \vartheta\Delta C_{ijklm}\int\limits_V \varepsilon_{lm}\,\delta\,\varepsilon_{ik}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0\right)dV =$$

$$= \int\limits_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}dV + \vartheta\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}\left(\mathbf{r}_0\right)\delta\varepsilon_{ik}\left(\mathbf{r}_0\right). \qquad (29)$$

Подставив теперь интегралы (26) и (29) в формулу (24), получим

$$\delta A = -\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\Omega_{ik}\left(M\right)\delta\varepsilon_{ik}\left(M\right) +$$

$$+\vartheta\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}\left(M\right)\delta\varepsilon_{ik}\left(M\right) + \int\limits_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}dV$$

или, используя соотношение

$$C_{iklm}\varepsilon_{lm}\delta\varepsilon_{ik}=\frac{1}{2}\Delta C_{iklm}\delta\left(\varepsilon_{lm}\varepsilon_{ik}\right),$$

окончательно имеем

$$\delta A=\delta\left[\frac{1}{2}\int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\varepsilon_{ik}dV-\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\Omega_{ik}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}\vartheta\left(M\right)\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right)\right].$$

Если деформация происходит при постоянной температуре, работа δA равна изменению свободной энергии зоны эластичности: $\delta A=-dF.$ Поэтому свободная энергия зоны эластичности с дыркой

$$F=F_0\left(T\right)-\frac{1}{2}\int_V C_{iklm}\varepsilon_{lm}\varepsilon_{ik}dV+\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\Omega_{ik}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right)-$$

$$-\frac{1}{2}\vartheta\left(M\right)\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right).$$

Здесь $F_0\left(T\right)$ — свободная энергия зоны вынужденной эластичности с дыркой при отсутствии внешнего поля. Второе слагаемое (объемный интеграл) равно энергии упругого поля зоны эластичности без дырки. Следовательно, два последних слагаемых определяют энергию взаимодействия дырки с внешним упругим полем:

$$u_{\text{вз}}=\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\Omega_{ik}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right)-$$

$$-\frac{1}{2}\vartheta\left(M\right)\Delta C_{iklm}\varepsilon_{lm}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right). \qquad (30)$$

Подставим в выражение (30) ΔC_{iklm} из формулы (23) и получим

$$u_{\text{вз}}=\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\Omega_{ik}\left(M\right)\varepsilon_{ik}\left(M\right)-$$

$$-\frac{1}{2}\vartheta\left(M\right)\left(\Delta K-\frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}^2\left(M\right)-\vartheta\left(M\right)\Delta G\varepsilon_{ij}^2\left(M\right). \qquad (31)$$

Формула (31) определяет энергию взаимодействия несимметричной дырки, находящейся в точке $M\left(\mathbf{r}_0\right),$ с внешним упругим полем.

Воздействие упругого поля зоны эластичности на дырку проявляется в том, что на нее действует сила, которая определяется как

$$F=-\nabla u_{\text{вз}}. \tag{32}$$

Дифференцируя выражение (32), получаем

$$F_j=-\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\Omega_{ik}\left(M\right)\nabla_j\varepsilon_{ik}\left(M\right)+$$

$$+\vartheta\left(M\right)\left(\Delta K-\frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}\left(M\right)\nabla_j\varepsilon_{kk}\left(M\right)+$$

$$+2\vartheta\left(M\right)\Delta G\varepsilon_{ik}\left(M\right)\nabla_j\varepsilon_{ik}\left(M\right).$$

Для симметричной сферической дырки при $\Omega_{ik}=\delta_{ik}$ имеем

$$\Phi_{\text{вз}}=\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\varepsilon_{kk}\left(M\right)-$$

$$-\frac{1}{2}\vartheta\left(M\right)\left(\Delta K-\frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}^2\left(M\right)-\vartheta\left(M\right)\Delta G\varepsilon_{ij}^2\left(M\right); \tag{33}$$

$$F_j=-\left(K+\frac{4}{3}G\right)v_0\delta n_0\left(M\right)\nabla_j\varepsilon_{kk}\left(M\right)+$$

$$+\vartheta\left(M\right)\left(\Delta K-\frac{2}{3}\Delta G\right)\varepsilon_{kk}\left(M\right)\nabla_j\varepsilon_{kk}\left(M\right)+$$

$$+2\vartheta\left(M\right)\Delta G\varepsilon_{ik}\left(M\right)\nabla_j\varepsilon_{ik}\left(M\right).$$

Из этих формул следует, что сила, действующая на дырку, определяется пространственной неоднородностью внешнего деформированного поля. В зоне вынужденной эластичности перед фронтом трещины устанавливается однородное напряженно-деформационное состояние [1]. В таком поле сила, действующая на дырку, равна нулю. Следовательно, среда зоны вынужденной эластичности после установления в ней однородной равновесной вынужденной эластической деформации не воздействует на дырку. На дырку воздействуют только окружающие ее дырки.

Теперь определим энергию и силу парного взаимодействия дырок, рассмотрев одну дырку в упругом поле другой дырки. Энергия взаимодействия первой дырки с полем второй и будет энергией взаимодействия дырок. Ограничимся двумя симметричными дырками в точках M_1 и M_2, тогда все формулы сильно упрощаются. Энергия взаимодействия инвариантна относительно выбора системы координат. Поэтому для упрощения промежуточных преобразований поместим начало координат в дырку M_2, а ось абсцисс направим вдоль прямой, соединяющей дырки, от точки M_2 к точке M_1. Две другие оси выбираем в плоскости, перпендикулярной этой оси. Расстояние между дырками обозначим R, тогда координаты радиус-вектора $\mathbf{R} = (R,0,0)$ или $R_i = R\delta_{1i}$. Поле деформаций, созданное дыркой M_2 в точке M_1, найдем из формулы (19):

$$\varepsilon_{ik}\left(\frac{M_1}{M_2}\right) = \frac{1}{4\pi} v_0 \delta n_0 (M_2)(\delta_{ik} - \delta_{1i}\delta_{1k})\frac{1}{R^3}.$$

Подставим это выражение в формулу (33) и после преобразований имеем

$$u_{\text{вз}}(M_1, M_2) = -\frac{3v_0^2}{8\pi^2} \vartheta(M_1)\Delta G(M_1)\left[\delta n_0(M_2)\right]^2 \frac{1}{R^6}. \qquad (34)$$

Формула (34) получена исходя из условия, что дырка M_1 находится в поле дырки M_2. Но обе дырки равноправны, поэтому можно рассмотреть дырку M_2 в поле дырки M_1. Тогда получим формулу, аналогичную описанной выше, если только в ней поменять местами величины M_1 и M_2. В этих двух формулах дырки несимметричные — одна из них выступает как источник поля, а вторая — как локальная неоднородность. Симметричная формула представляет собой их полусистему:

$$u_{\text{вз}}(M_1, M_2) = -\frac{3v_0^2}{16\pi^2}\Big\{\vartheta(M_1)\Delta G(M_1)\left[\delta n_0(M_2)\right]^2 +$$
$$+\vartheta(M_2)\Delta G(M_2)\left[\delta n_0(M_1)\right]^2\Big\}\frac{1}{R^6}.$$

При этом энергия взаимодействия дырок в зоне эластичности обратно пропорциональна шестой степени расстояния между ними.

Силу, действующую на дырку M_1 со стороны дырки M_2, найдем как

$$\mathbf{F}_{M_1} = -\mathrm{grad}_{M_1} u_{\text{вз}}$$

или

$$F_{M_1} = -\frac{9v_0^2}{8\pi^2}\Big\{\vartheta(M_1)\Delta G(M_1)\left[\delta n_0(M_2)\right]^2 +$$
$$+\vartheta(M_2)\Delta G(M_2)\left[\delta n_0(M_1)\right]^2\Big\}\frac{\mathbf{R}}{R^8}.$$

Сила, действующая на дырку M_2 со стороны дырки M_1, равна

$$\mathbf{F}_{M_2} = -\mathbf{F}_{M_1},$$

т. е. между дырками действует сила притяжения, которая тем больше, чем меньше расстояние между ними. При тепловом движении дырки становятся подвижными, что позволяет им сблизиться вплоть до их слияния.

Ранее мы установили, что собственное упругое поле дырки простирается на расстояние, не превышающее двух диаметров дырки. Это означает, что дырки начинают взаимодействовать (притягиваться одна к другой), когда расстояние между ними $R \le 2(a_1 + a_2)$ (где a_1 и a_2 — диаметры дырок). На больших расстояниях можно считать, что они не взаимодействуют. Размер дырки определяется мощностью слабого узла несущего каркаса, на месте которого она образовалась, т. е. величиной δn_0. При расстояниях между дырками, меньших указанных выше, упругие поля дырок начинают перекрываться, и чем больше степень перекрытия, тем выше сила притяжения дырок. Если дырки имеют разные размеры, упругое поле более мощной дырки имеет больший радиус действия. Маленькая дырка может оказаться целиком в поле большой. В то же время упругое поле маленькой дырки «не достает» поле большой. Соответственно большая дырка может захватить маленькую или инициировать ее возникновение и удерживать силой притяжения. Поэтому около большой дырки образуется скопление из маленьких дырок.

Определим напряжения в пространстве между дырками. Рассмотрим систему из двух дырок и рассчитаем напряжения на линии их соединения. Каждая из дырок создает собственное поле напряжений, определяемое формулой (17). В выбранной системе координат тензор напряжений, создаваемых дыркой M_2,

$$\sigma_{ik}^{M_2} = \frac{1}{2\pi} G v_0 \delta n_0 \left(M_2\right)\left(\delta_{ik} - 3\delta_{1i}\delta_{1k}\right) r^{-3}.$$

Аналогично тензор напряжений, создаваемых дыркой M_1,

$$\sigma_{ik}^{M_1} = \frac{1}{2\pi} G v_0 \delta n_0 \left(M_1\right)\left(\delta_{ik} - 3\delta_{1i}\delta_{1k}\right)\left(R - r\right)^{-3}.$$

В пространстве между дырками упругие напряжения, создаваемые ими, аддитивно суммируются. Поэтому напряжения на линии, соединяющей дырки, в некоторой точке r этой линии

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{2\pi} G v_0 \left[\delta n_0 \left(M_1 \right) \left(R - r \right)^{-3} + \delta n_0 \left(M_2 \right) r^{-3} \right] \left(\delta_{ik} - 3\delta_{1i}\delta_{1k} \right).$$

Распишем этот тензор покомпонентно:

$$\sigma_{11} = -\frac{1}{\pi} G v_0 \left[\delta n_0 \left(M_1 \right) \left(R - r \right)^{-3} + \delta n_0 \left(M_2 \right) r^{-3} \right],$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = \frac{1}{2\pi} G v_0 \left[\delta n_0 \left(M_1 \right) \left(R - r \right)^{-3} + \delta n_0 \left(M_2 \right) r^{-3} \right], \qquad (35)$$

$$\sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0.$$

Кстати, на линии, соединяющей дырки, тензор напряжений оказался диагональным, а это свидетельствует о том, что он приведен к главным осям, и выбранные направления координатных осей являются главными направлениями тензора. Как следует из первой формулы (35), нормальные напряжения σ_{11}, действующие вдоль линии, соединяющей дырки, отрицательны, т. е. являются напряжениями сжатия. Это понятно, так как между дырками действует сила притяжения и поэтому среда между ними в зоне эластичности испытывает в этом направлении сжатие. В поперечных направлениях, наоборот, действуют растягивающие напряжения. При уменьшении расстояния R между дырками все компоненты напряжения возрастают. Наоборот, при увеличении значения R напряжения быстро убывают, и, когда дырки перестают взаимодействовать, их напряжения равны нулю.

Анализ формул (35) показывает, что поперечные растягивающие напряжения $\sigma_{22} = \sigma_{33}$ достигают наибольших значений на поверхности дырок, точнее, на их экваторах, и являются касательными к поверхности дырок. Если дырки расположены на расстоянии, меньшем удвоенной суммы их диаметров, их упругие поля перекрываются, и напряжение в пространстве между ними равно сумме парциальных напряжений. Касательные напряжения на экваторах дырок возрастают, причем тем больше, чем ближе между собой расположены дырки. Напряжения на линии, соединяющей дырки, также превышают парциальные напряжения, но межу дырками есть «ямка» напряжений. В разные стороны от «ямки» напряжения увеличиваются. Положение «ямки» сдвинуто в сторону меньшей дырки тем больше, чем больше различаются дырки. Если размеры и мощность одной дрыки намного больше, чем у другой, то, несмотря на то, что парциальные напряжения убывают с расстоянием в соответствии с законом $\approx r^{-3}$, напряжения большой дырки на одном и том же расстоянии r превышают напряжения малой дырки. Это приводит к тому, что касательные к экватору напряжения $\sigma_{22} = \sigma_{33}$ на поверхности маленькой дырки значительно возрастают, и тем больше, чем меньше расстояние между дырками и чем больше различаются дырки. В частности, при достаточном сближении дырок напряжение на поверхности малой дырки может превысить критическое (предел прочности на разрыв). Тогда возможно возникновение локального разрыва на поверхности малой дырки навстречу большой. У маленькой дырки возникает острый «клювик», который становится концентратором напряжения (локальным усилителем напряжения) и стимулирует продвижение клювика-надрыва дальше. Если этот микроразрыв перейдет «ямку» напряжений, он попадет в область увеличивающихся поперечных растягивающих напряжений, которые стимулируют дальнейшее ускоряющееся продвижение микроразрыва с превращением его в микротрещину; все это заканчивается быстрым «проскакиванием» зародившегося микоразрыва в трещинку-канал, связывающий дырки. Происходит так называемый пробой прослойки между дырками. Дырки в буквальном смысле оказываются «связанными одной веревочкой». Возможны и другие ситуации. Образовавшийся микроразрыв не развивается в трещинку-канал или останавливается на полпути, не достигая второй дырки. Возможно образование микроразрыва между дырками с последующим развитием в канал или стабилизацией в виде чечевицеобразной субмикротрещины. Вся эта сложная картина регулируется соотношением между размерами и мощностью дырок и расстоянием между ними. Таким образом, существует некоторое критическое сближение дырок, при котором между ними проскакивает трещинка-канал. Это критическое расстояние определяется соотношением размеров и мощностей дырок.

Выводы.

1. Элементарные акты разрушения, обусловленные актами разрыва и рекомбинации химических связей несущего молекулярного каркаса, создают в малой окрестности упругое поле, которое является возмущением на фоне макроскопического упругого поля напряженного материала;
2. Найдено поле смещений, деформаций и напряжений элементарного точечного дефекта;
3. Показано, что скопление точечных дефектов в слабом узле несущего молекулярного каркаса образует макроскопический дефект;
4. Рассчитаны упругие поля дырок, их собственная упругая энергия, энергия взаимодействия дырок и сила их парного взаимодействия;
5. Показано, что каждая дырка окружена скоплением более мелких дырок.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Исследование процессов разрушения композиционных материалов на базе метода асимптотической гомогенизации. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2013, вып. 1. URL: http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/ material/427.html

[2] Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Многомасштабное моделирование упругих композиционных материалов. *Математическое моделирование*, 2012, т. 24, № 5, с. 3–20.

[3] Dimitrienko Y.I., Sokolov A.P. Elastic properties of composite materials. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2010, vol. 2, no. 1, pp. 116–130.

[4] Dimitrienko Yu.I. Thermal stresses and heat mass-transfer in ablating composite materials. *Int. Journal of Heat Mass Transfer*, 1995, vol. 38, no. 1, pp. 139–146.

[5] Dimitrienko Yu.I. Thermal Stresses in Ablative Composite Thin-Walled Structures under Intensive Heat Flows. *Int. Journal of Engineering Science*, 1997, vol. 35, no. 1, pp. 15–31.

[6] Валишин А.А., Степанова Т.С. Особенности квазихрупкого разрущения полимеров и композитов на их основе. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2012, вып. 2. URL: http://engjournal.ru/articles/52/52.pdf

[7] Валишин А.А., Миронова Т.С. Кинетика зарождения локальных микродефектов при квазихрупком разрушении полимеров и композитов на их основе. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2013, вып. № 9(21). URL: http://engjournal.ru/articles/1119/1119.pdf

[8] Looyehl M.R.E., Samanta A., Jihan S., McConnachie. Modeling of reinforced polymer composites subject to thermo-mechanical loading. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2005, vol. 63, no. 6, pp. 898–925.

[9] MeManns H.N., Springer G.S. High temperature thermomechanical behavior of carbon-phenolic composites: I Analysis, II Results. *J. Composite Materials*, 1992, vol. 26, pp. 206–255.

[10] Baia Yu, Valleea Till, Keller Thomas. Modeling of thermal responses for FRP composites under elevated and high temperatures. *Composites Science and Technology*, 2008, vol. 68, no. 1, pp. 47–56.

[11] Димитриенко Ю.И. *Нелинейная механика сплошной среды*. Москва, Физматлит, 2009, 624 с.

[12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория упругости*. Москва, Наука, 1978, 358 с.

[13] Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.И. Расчет эффективных характеристик композитов с периодической структурой методом конечных элементов. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки*, 2002, № 2, с. 95–108.

[14] Теодосиу К. *Упругие модели дефектов в кристаллах*. Москва, Мир, 1985, 352 с.

[15] Косевич А.М. *Основы механики кристаллической решетки*. Москва, Наука, 1972, 203 с.

Статья поступила в редакцию 10.10.2014

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Валишин А.А., Миронова Т.С. Силовые упругие поля локальных микродефектов в напряженных полимерах и композитах на их основе. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2014, вып. 8. URL: http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/material/1241.html

Валишин Анатолий Анатольевич родился в 1940 г., окончил Московский государственный педагогический институт им. В.И. Ленина в 1963 г., Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова в 1968 г. Д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Математическое моделирование и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, профессор кафедры высшей и прикладной математики Московского государственного университета тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова. Автор более 100 научных работ в области теории разрушения, приложения теории вероятностей и математической статистики. e-mail: enf@mail.ru

Миронова Татьяна Сергеевна родилась в 1987 г., окончила Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова в 2010 г. Область научных интересов: применение теории вероятностей и математической статистики к химико-технологическим процессам.

Force elastic fields of local microdefects in strained polymers and composites based on them

A.A. Valishin[1], T.S. Mironova[2]

[1] Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia
[2] Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571, Russia

The article describes the mechanism of the elastic interaction between local micro-defects, called holes, which are formed and accumulated in the area of forced elasticity in front of the crack fracture in polymers. We calculated the elastic fields of holes, their own elastic energy, interaction energy of holes and the strength of their pair interaction. It is shown that the interaction between the holes leads to the fact that each hole is surrounded by a cluster of smaller holes.

Keywords: *elastic fields, local microcracks, strained polymers and composites.*

REFERENCES

[1] Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. *Inzhenernyi zhurnal: nauka i innovatsii — Engineering Journal: Science and Innovation*, 2013, iss. 1. Available at: http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/ material/427.html

[2] Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. *Matematicheskoe Modelirovanie — Mathematical Models and Computer Simulations*, 2012, vol. 24, no. 5, pp. 3–20.

[3] Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P. Elastic properties of composite materials. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2010, vol. 2, no. 1, pp. 116–130.

[4] Dimitrienko Yu.I. Thermal stresses and heat mass-transfer in ablating composite materials. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 1995, vol. 38, no. 1, pp. 139–146.

[5] Dimitrienko Yu.I. Thermal Stresses in Ablative Composite Thin-Walled Structures under Intensive Heat Flows. *International Journal of Engineering Science*, 1997, vol. 35, no. 1, pp. 15–31.

[6] Valishin A.A., Stepanov T.S. *Inzhenernyi zhurnal: nauka i innovatsii — Engineering Journal: Science and Innovation*, 2012, iss. 2. Available at: http://engjournal.ru/articles/52/52.pdf.

[7] Valishin A.A., Mironova T.S. *Inzhenernyi zhurnal: nauka i innovatsii — Engineering Journal: Science and Innovation*, 2013, iss. 9(21). Available at: http://engjournal.ru/articles/1119/1119.pdf

[8] Looyehl M.R.E., Samanta A., Jihan S., McConnachie. Modeling of reinforced polymer composites subject to thermo-mechanical loading. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2005, vol. 63, no. 6, pp. 898–925.

[9] MeManns H.N., Springer G.S. High temperature thermomechanical behavior of carbon-phenolic composites: I Analysis, II Results. *J. Composite Materials*, 1992, vol. 26, pp. 206–255.

[10] Baia Yu, Valleea Till, Keller Thomas. Modeling of thermal responses for FRP composites under elevated and high temperatures. *Composites Science and Technology*, 2008, vol. 68, no. 1, pp. 47–56.

[11] Dimitrienko Yu.I. *Nelineinaya mekhanika sploshnoy sredy* [Nonlinear Continuum Mechanics]. Moscow, Fizmatlit, 2009, 624 p.

[12] Landau L.D., Lifshits E.M. *Theory of elasticity*. Moscow, Nauka Publ., 1978, 358 p.

[13] Dimitrienko Yu.I., Kashkarov A.I. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana — Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series: Natural sciences*. 2002, no. 2, pp. 95–108.

[14] Teodosiu K. *Uprugie modeli defektov v kristalakh* [Elastic models of defects in crystals]. Moscow, Mir Publ., 1985, 352 p.

[15] Kosevich A.M. *Osnovy mekhaniki kristallicheskoy reshetki* [Fundamentals of mechanics of the crystal lattice]. Moscow, Nauka Publ., 1972, 203 p.

Valishin A.A. (b. 1940) graduated from Lenin Moscow State Pedagogical institute in 1963 and Lomonosov Moscow State University in 1968. Dr. Sci. (Phys.&Math.), Professor of the Computational Mathematics and Mathematical Physics Department at Bauman Moscow State Technical University, Professor of the Higher and Applied Mathematic Department at Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies. He is the author of more than 100 studies in the field of theory of destruction, application of probability theory and mathematical statistics. e-mail: enf@mail.ru

Mironova T.S. (b. 1987) graduated from Lomonosov Moscow State University in 2010 Sphere of research: application of probability theory and mathematical statistics to chemical and technological processes.