

文章编号: 1000-5889(2004)02-0025-05

短纤维增强复合材料刚度系数预测

成丽娟^{1,2}, 陈百明^{1,2}, 李旭东^{1,2}

(1. 兰州理工大学 材料科学与工程学院, 甘肃 兰州 730050; 2. 甘肃省有色金属新材料国家重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 运用已开发的计算机软件, 模拟了短纤维增强复合材料的微观组织结构, 预测了在机械载荷作用下13种复合材料样品的刚度系数。采用数理统计中的回归分析方法对预测结果进行分析后发现: 每种复合材料样品的刚度系数 C_{11} , C_{12} , C_{44} 均随着增强相材料体积分额 φ 的增大而增大, 它们之间有很好的线性回归关系; 此外, 对于不同类型的复合材料样品, 复合材料刚度系数与组分材料的刚度系数、弹性模量及各向异性比之间均呈现有规律的数值对应关系, 而基体材料的平均晶粒尺寸 D 对复合材料刚度系数几乎没有影响。

关键词: 复合材料; 刚度系数; 计算机预测

中图分类号: TB33 **文献标识码:** A

Prediction of stiffness coefficient of short-fiber reinforced composites

CHENG Li-juan^{1,2}, CHEN Bai-ming^{1,2}, LI Xu-dong^{1,2}

(1. College of Material Science and Engineering, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Non-Ferrous Materials, Lanzhou 730050, China)

Abstract: A developed software is employed for simulating the composite microstructures of short-fiber reinforced composite samples and predicting their stiffness coefficients. The samples are supposed to be subjected to boundary traction due to mechanical loading. It is found by applying a regression analysis method that the predicted stiffness coefficients C_{11} , C_{12} , C_{44} of each simulated composite sample increase as the volume fraction φ increases. Remarkable linear regressive relationships is found between the stiffness coefficients and volume fraction φ . In addition, for the samples of different simulated composites, a group of remarkable relationship is also revealed quantitatively between predicted the stiffness coefficients of samples and that of partial constituents, their elastic properties, and their anisotropy ratio as well. Nevertheless, the average grain size D has little effect on the stiffness coefficient of the composite samples.

Key words: composites; stiffness coefficient; computer predictions

复合材料由于具有常规材料不可比拟的许多优异性能, 已经在很多领域中得到了广泛的应用, 其中, 最显著的优点——在一定范围内的可设计性, 更使它成为材料科学研究的重点。针对复合材料的这种可设计性, 即在微观组织结构与材料性能之间具有一定的对应关系的特性^[1,2], 研究人员可根据实际需要, 建立适当的细观力学模型, 开发设计软件, 通过选择基体材料、增强相材料的类型、增强相材料的体积分额、增强相材料在基体中的分布方式以及基体材料与增强相材料间的界面性质等因素, 得到

一个满足指定性能要求的复合材料样品^[3,4]。在复合材料的各种性能中, 有效刚度系数作为表征复合材料力学性能的一个重要参数, 对复合材料的设计与开发有着重要的影响, 但目前国内尚缺乏依据复合材料微观组织结构的模拟来预测材料性能的研究工作。基于这一现状, 本文运用已开发软件, 模拟了复合材料的虚拟微观组织结构, 预测了复合材料刚度系数, 并运用数理统计方法, 探寻复合材料微观组织结构与其刚度系数之间存在的、材料本身固有的内在联系, 用于指导复合材料微观组织的结构设计工作, 最终达到预测复合材料设计方向、缩短设计周期、降低开发成本的目的, 实现“性能导向型”的微观组织结构设计。

收稿日期: 2003-09-01

基金项目: 国家自然科学基金(50271016)

作者简介: 成丽娟(1974-), 女, 甘肃兰州人, 硕士生。

1 结构模拟及刚度系数预测方法

本文研究的材料样品是用已开发的软件模拟构筑的以稀疏模式分布的短纤维增强复合材料. 在一个给定的方形域内, 由两维 Poission 随机过程生成的、任意分布的泊松点产生大量形核, 在生成的形核的基础上, 用 Voronoi 晶粒来模拟多晶体集合. 样品中的短纤维被模拟成一个给定长度和直径范围、取向任意的椭球体. 在模拟中, 通过控制短纤维的体积份额及相邻短纤维之间的距离来确保短纤维构成稀疏型分布. 最终模拟形成了一个由相当数量的 Voronoi 晶粒和短纤维构成、受机械载荷作用的复合材料样品微观组织结构, 如图1所示. 其中短纤

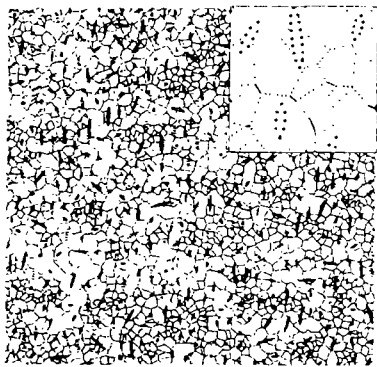


图1 计算机模拟复合材料样品的部分微观组织结构^[5]

Fig.1 A partial of microstructure of simulated composite material sample^[5]

维为均匀分布, 晶粒和短纤维的晶体学取向呈任意性分布. 把给定方形域内生成的这个微观组织结构看作是一个有效的代表体积单元 (RVE, Representative Volume Element), 在宏观意义上, 该 RVE 具有各向同性. 在预测复合材料宏观弹性性能时, 把生成的多晶体集合作为模拟的复合材料基体, 其宏观刚度系数用 Hill 判据来预测. 对于复合材料样品有效刚度系数则是在运用 Eshelby 的等效夹杂法以及 Mori-Tanaka 平均场理论的基础上, 采用体积平均代替取向平均的处理方法得到的^[5].

2 实验材料及计算机数值实验

为了使研究得到的规律更具有普遍意义, 在实验中, 分别选取了 6 种金属基体材料及 4 种短纤维增强材料, 材料清单及对应的单晶体性能参数见表 1 和表 2^[6]. 从表中可以看出, 所选取的材料在晶体结构、物理性能方面都具有很大的差异; 其次, 由于复合材料组成物的几何形状和各向异性对材料的性能有着直接的影响, 所以选取材料的弹性各向异性比分布比较分散, 而不是集中在某一个区间范围内. 这样就可以尽量全面地考虑材料性能差别及弹性各向异性差别对复合材料性能的影响.

通过对以下材料的组合, 本文构造出 13 种虚拟复合材料 (2024-SiC, 2024-6HSiC, 2024-Al₂O₃, 2024-SiO₂, Ti-6HSiC, Zr-SiC, Zr-SiO₂, NiFe-SiC, NiFe-SiO₂, CuAl-SiO₂, CuAl-SiC, Ti₃Al-SiC, Ti₃Al-6HSiC)^[6] 用于材料性能预测的计算机数值

表 1 基体材料单晶体的弹性系数

Tab.1 Elastic constants of monocrystalline of matrix materials

基体材料	晶系	柔度系数 $S_{ij}/(10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{N}^{-1})$ (或刚度系数 C_{ij}/GPa)						多晶体弹性模量 $E_{\text{poly}}/\text{MPa}$	单晶体弹性各向异性比 A_{isocr}
		S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{14}	S_{33}	S_{44}		
2024	Cubic	15.140	-5.360				34.180	72.9	1.18
Ti	Hex.	9.351	-4.423	-1.870		6.925	21.186	116.5	1.90
Zr	Hex.	9.914	-3.860	-2.381		7.916	30.864	97.5	2.02
NiFe	Cubic	8.394	-3.234				8.389	205.9	2.44
CuAl	Cubic	16.793	-7.130				13.055	122.5	3.23
Ti ₃ Al	Hex.	175.0(C_{11})	88.7(C_{12})	62.3(C_{13})		220.0(C_{33})	62.2(C_{44})	143.5	2.06

注: Ti₃Al 采用刚度系数 C_{ij} 表征.

表 2 增强相材料单晶体的弹性系数

Tab.2 Elastic constants of monocrystalline of fiber materials

增强材料	晶系	刚度系数 C_{ij}/GPa							多晶体弹性模量 $E_{\text{poly}}/\text{MPa}$	单晶体弹性各向异性比 A_{isocr}
		C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{33}	C_{44}	C_{66}		
SiC	Cubic	352.0	120.0				232.9		406.9	1.72
6HSiC	Hex.	500.0	92.0	55.8		564.0	168.0		453.9	1.89
Al ₂ O ₃	Tri.	465.0	124.0	117.0	101.0	563.0	233.0		450.0	3.86
SiO ₂	Mono.	160.8	82.1	102.9		231.6	67.8	58.8	156.6	3.10
		-36.2(C_{15})	230.4(C_{22})	35.6(C_{23})	2.6(C_{25})	-39.3(C_{35})	9.9(C_{46})	73.3(C_{55})		

实验。

为了揭示复合材料刚度系数与基体材料及增强相材料的类型、增强相材料的体积份额、复合材料微观组织结构的几何形状及各向异性程度间存在的联系,在对复合材料刚度系数的预测过程中,选取了两个微观组织结构参变量:增强相材料体积份额 φ 和基体材料平均晶粒尺寸 D 。在一定范围内改变两者的取值(计算机实验中,在 φ 为 3%~10%, D 为 65~150 μm 范围内分别选取 φ 为 3%,5%,7%,10% 及 D 为 65,80,100,125,150 μm),并进行组合后,与各种基体材料和增强相材料相应的单晶体性能参数一起作为计算机实验中的输入参量,用已开发的软件预测各种虚拟复合材料的刚度系数。

3 数值实验结果分析

在实验结果分析过程中,以最常见、最具有典型性的立方体晶系结构作为参考系,重点对复合材料的 3 个刚度系数 C_{11} , C_{12} , C_{44} 进行分析和讨论。

3.1 在一定的平均晶粒尺寸 D 下,增强相材料体积份额 φ 对复合材料刚度系数的影响

1) 复合材料刚度系数与 φ 之间的对应关系

以 φ 为可控变量,以复合材料的刚度系数为因变量,对两者进行回归分析后,得到了它们之间显著的数值对应关系,由于篇幅关系,这里只是给出其中 2 种虚拟复合材料的分析结果:

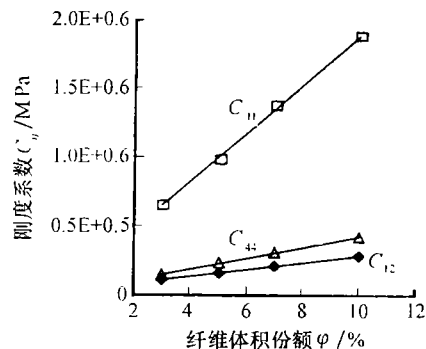
(1) 对于复合材料 2024-SiC,保持 D ($D=150 \mu\text{m}$) 不变,计算得到的刚度系数 C_{11} , C_{12} , C_{44} 均随着 φ 的增大而增大,它们之间有很好的线性回归关系,如图 2 所示。当 D 分别为 125,100,80,65 μm 时也有同样的结论。

(2) 对于复合材料 $\text{Ti}_3\text{Al-6HSiC}$,在 $D=80 \mu\text{m}$ 时,也得出了上面的结论,见图 2b。

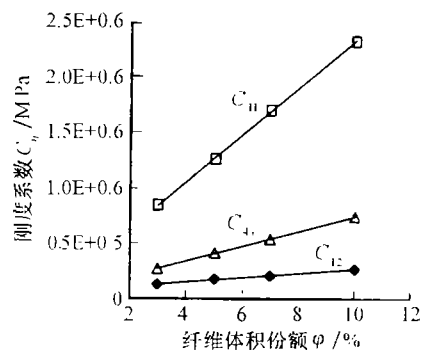
以上的分析结果表明:对于以稀疏模式分布的短纤维增强复合材料,其刚度系数与 φ 之间有显著的线性回归关系。刚度系数均随 φ 的增大而增大。此外,从图中还可看出,在 3 个刚度系数 C_{11} , C_{12} , C_{44} 中, C_{11} 随 φ 的增大变化的最快,而 C_{12} , C_{44} 的变化较小,尤其是 C_{12} ,它受 φ 的影响最小。

2) 不同类型复合材料的刚度系数与其微观组织结构及复合材料组成物性能之间的数值对应关系

本文将 13 种虚拟复合材料材料作为一个整体,采用无量纲化处理,分析研究了构成复合材料的各组分材料的弹性性能、各向异性程度以及复合材料微观组织结构与复合材料的刚度系数之间的数值对应关系。



(a) 2024-SiC ($D=150 \mu\text{m}$)



(b) $\text{Ti}_3\text{Al-6HSiC}$ ($D=80 \mu\text{m}$)

图 2 复合材料刚度系数与增强相材料体积份额 φ 之间的数值对应关系及回归关系曲线

Fig. 2 Relationship between predicted stiffness coefficients of composite samples and volume fraction φ

在分析过程中,除了考虑到 φ 和 D 对复合材料刚度系数产生的影响外,同时还要考虑到基体材料和增强相材料各自的弹性性能及其各向异性程度对复合材料性能的影响,因此引入了基体材料和增强相材料的弹性模量 E_{poly}^m , E_{poly}^f , 基体材料、增强相材料间的弹性模量差 $E_{(r-m)}$, 以及基体材料、增强相材料、复合材料的各向异性比 A_{scarr}^m , A_{scarr}^f , A_{scarr} 等参量,其中:

单晶体弹性各向异性比为

$$A_{\text{scarr}} = E_{\text{max}} / E_{\text{min}}$$

复合材料弹性各向异性比为

$$A_{\text{scarr}} = (1.0 - \varphi) A_{\text{scarr}}^m + \varphi A_{\text{scarr}}^f$$

增强相材料、基体材料之间的弹性模量差:

$$E_{(r-m)} = E_{\text{poly}}^f - E_{\text{poly}}^m$$

采用上述定义的物理参量,结合它们各自的物理意义,分析如下:

(1) 关于 C_{11}

首先考虑到基体材料与增强相材料的刚度系数对复合材料刚度系数的影响,经过分析发现:以增强相材料刚度系数 C_{11}^f 与基体材料刚度系数 C_{11}^m 间的比值 C_{11}^f / C_{11}^m 为自变量,复合材料刚度系数 C_{11} 与基

体材料刚度系数 C_{11}^m 间的比值 C_{11}^r/C_{11}^m 为因变量, 它们之间存在着如图 3a 所示的有规律的数值对应关系。从图中可以看出: 对应于 φ 的不同取值, 当基体材料确定时, 选用刚度系数 C_{11}^r 较大的增强相材料, 则由它们构成的复合材料的刚度系数 C_{11}^c 也较大。在材料设计中, 可以参考这个结论来选定复合材料的各组分材料。

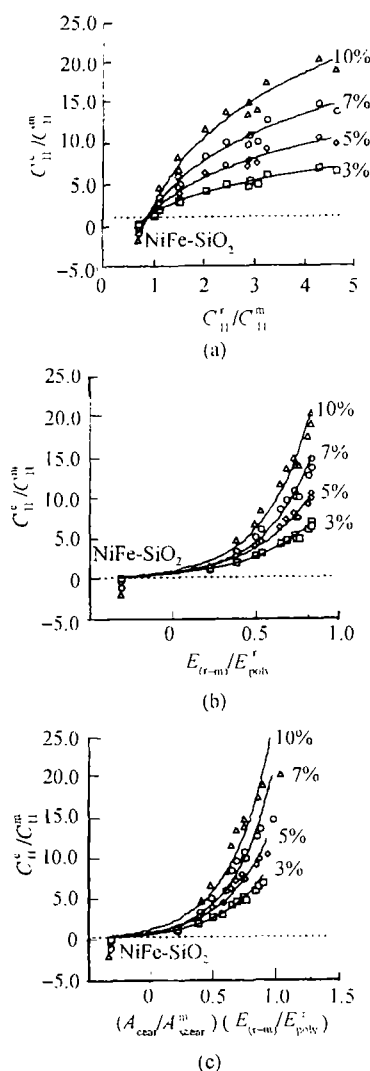


图3 复合材料刚度系数 C_{11} 与组分材料的弹性性能及各向异性比之间的数值对应关系及回归关系曲线

Fig. 3 Relationship between predicted stiffness coefficient C_{11} and elastic properties, anisotropy ratio of material constituents

此外, 考虑到基体材料和增强相材料的弹性模量对复合材料刚度系数的影响, 又找到了 C_{11}^r/C_{11}^m 与 $E_{(r-m)}/E_{ploy}^r$ 间的数值对应关系, 见图 3b。可以看出: 当增强相材料确定时, 增强相材料与基体材料之间的弹性模量差 $E_{(r-m)}$ 越大, 复合材料刚度系数 C_{11}^c 与基体材料刚度系数 C_{11}^m 间的比值 C_{11}^c/C_{11}^m 也越大。

本文还考虑到材料的各向异性程度对刚度系数

的影响, 以 C_{11}^r/C_{11}^m 为因变量, 以 $(A_{cenr}/A_{scenr}^m)(E_{(r-m)}/E_{ploy}^r)$ 作为自变量, 对两者做回归分析后发现: 对应参数之间也存在有显著的、有规律的数值对应关系, 分析结果如图 3c 所示。

比较图 3a~3c 不难看出: 3 组关系曲线均在因变量 $C_{11}^c/C_{11}^m = 0$ 附近相交于一点, 过这一点做一条水平虚线, 在虚线以上部分, 3 组关系曲线上各点所对应材料的 C_{11}^r/C_{11}^m 均随着 φ 的增大而增大, 而虚线以下所对应的材料 NiFe-SiO₂ 则正好有着相反的规律。与其它材料的不同点在于它的 $E_{(r-m)} < 0$, 即这种材料增强相的弹性模量小于基体的弹性模量。此外, 由于基体材料的刚度系数均为正值, 因此, 从图中可以看出, NiFe-SiO₂ 对应的点之所以位于水平虚线之下, 正是因为它预测出刚度系数中有负值。而在实际的复合材料中, 这种情况是不可能出现的, 但在这里, 作为复合材料虚拟设计, 为了尽可能全面地考虑可能存在的各种情况, 本文也把它包括在内。这一点也应在设计中加以注意。

(2) 关于 C_{12}

对于刚度系数 C_{12} , 采用了与 C_{11} 相类似的分析方法。依次作了如图 3 所示各种关系的回归分析。分析结果表明, 对于刚度系数 C_{12} , $(C_{12}^r/C_{12}^m) - (C_{12}^r/C_{12}^m)$, $(C_{12}^r/C_{12}^m) - (A_{cenr}/A_{scenr}^m)(E_{(r-m)}/E_{ploy}^r)$ 之间存在着规律性的数值对应关系, 相应的关系曲线分别如图 4 所示。其中图 4a 具有与图 3a 相似的物理意义。而在 $(C_{12}^r/C_{12}^m) - (E_{(r-m)}/E_{ploy}^r)$ 之间没有发现有规律性的数值对应关系。这一点与 C_{11} 不同。观察图 3, 可以看出图 3b, 3c 中的关系曲线具有相似性, 只是在数值上有些差异, 这也说明, 对于刚度系数 C_{11} , 不同类型复合材料的 C_{11}^r/C_{11}^m 在很大程度上取决于 $E_{(r-m)}/E_{ploy}^r$, 而 A_{cenr}/A_{scenr}^m 对它的影响则很小。对于刚度系数 C_{12} , 由于在 $(C_{12}^r/C_{12}^m) - (A_{cenr}/A_{scenr}^m)(E_{(r-m)}/E_{ploy}^r)$ 之间存在有显著的数值对应关系, 而 $(C_{12}^r/C_{12}^m) - (E_{(r-m)}/E_{ploy}^r)$ 之间则没有这种对应关系, 所以, 不同类型复合材料的 C_{12}^r/C_{12}^m 的变化, 不仅与 $E_{(r-m)}/E_{ploy}^r$ 有关, 而且也受 A_{cenr}/A_{scenr}^m 的影响。

(3) 关于 C_{44}

对于刚度系数 C_{44} , 进行大量的统计分析后发现了如图 5 所示的数值对应关系。观察图 5 发现有 NiFe-SiO₂ 和 CuAl-SiO₂ 这两种材料的性能变化与其它材料相比具有很大的差异。对于 NiFe-SiO₂, 同上, 它与其它材料的不同处在于 $E_{(r-m)} < 0$, 对于 CuAl-SiO₂, 则是因为在不同的 φ 下, 预测得到的刚度系数 C_{44} 均为负值, 所以才有如图 5 所示的结果。而在实际中, 这两种材料并不存在, 在这里选用它

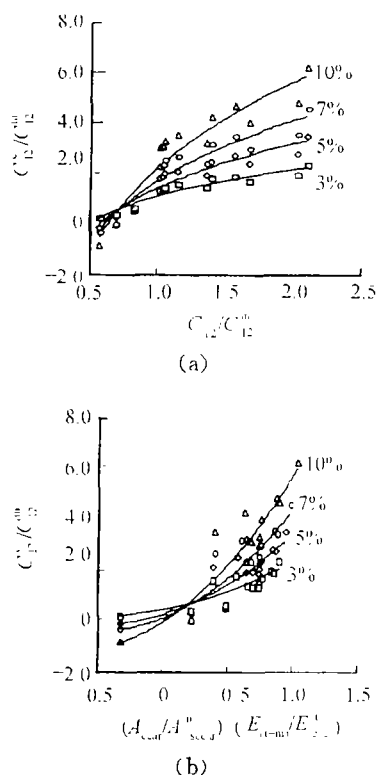


图4 复合材料刚度系数 C_{12} 与组分材料的弹性性能及各向异性比之间的数值对应关系及回归关系曲线

Fig. 4 Relationship between predicted stiffness coefficient C_{12} and elastic properties, anisotropy ratio of material constituents

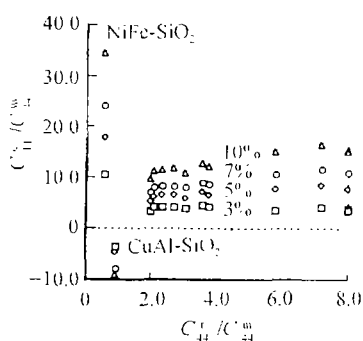


图5 复合材料刚度系数 C_{44} 与组分材料的刚度系数之间的数值对应关系

Fig. 5 Relationship between stiffness coefficient C_{44} and that of material constituents

们,只是为了探寻规律性的需要.依次观察其它材料的变化规律,可以看出,除了上面这两种材料之外,其它各种材料的 $(C_{44}^c/C_{44}^m)-(C_{44}^c/C_{44}^m)$ 之间存在着显著的线性关系.不难看出,在基体材料确定的情况下,选取刚度系数较大的增强相材料,可以使由它们组合得到复合材料具有较大的刚度系数,同样地, (C_{44}^c/C_{44}^m) 也是随增强相材料体积份额 φ 的增大而增大.

3.2 在一定的增强相材料体积份额 φ 下,平均晶粒尺寸 D 对复合材料刚度系数的影响

计算机实验结果证实: D 的变化对每种复合材料的刚度系数影响均很小.比较每种材料在恒定的增强相材料体积份额 φ 下,对应于不同的平均晶粒尺寸 D 计算得到的刚度系数,发现各组数据间的差异极小,几乎可以忽略不计.

结合前述,对应于 D 的 5 种不同取值,依次作如图 3~5 所示的各种回归关系曲线,比较后发现各组曲线基本重合,并没有因为 D 的改变而有很大变化,这同样说明 D 对复合材料刚度系数的影响是很小的.当然,这一结论是在确保 RVE 具有有效尺度的前提下得到的.

4 结论

1) 对于本课题研究的以稀疏模式分布的短纤维增强的金属基复合材料,复合材料的刚度系数 C_{11} , C_{12} , C_{44} 均随增强相材料的体积份额 φ 的增大而增大,它们之间有显著的线性对应关系.

2) 对于不同的刚度系数 C_{11} , C_{12} , C_{44} , 增强相材料/基体材料刚度、复合材料/基体材料刚度等系数比之间具有相关性较强的数值对应关系.

3) 计算机实验结果证实:在确保 RVE 具有有效尺度的前提下,基体材料的平均晶粒尺寸 D 的大小对复合材料的刚度系数几乎没有影响.

参考文献:

- [1] Baxter S C, Hossain M I, Graham L L. Micromechanics based random material property fields for particulate reinforced composites [J]. International Journal of Solids and Structures, 2001, 38: 9 209-9 220.
- [2] Matsuoka T, Yamamoto S, Takahara M. Prediction of structures and mechanical properties of composites using a genetic algorithm and finite element method [J]. Journal of Materials Science, 2001, 36: 27-33.
- [3] 杨庆生. 复合材料细观结构力学与设计 [M]. 北京: 中国铁道出版社, 2000. 230-233.
- [4] 曹茂盛, 黄龙男, 陈 铮, 等. 材料现代设计理论与方法 [M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2002.
- [5] Xu-Dong Li. On composite structure weaknesses (I): simulation, properties and numerical approach [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2002, 33(7): 2 205-2 215.
- [6] Xu-Dong Li. On composite structure weaknesses (II): computer experiments, identification, and correlation [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2002, 33(7): 2 217-2 227.