

残余界面应力对粒子填充热弹性纳米 复合材料有效热膨胀系数的影响*

黄汝超, 陈永强

(北京大学 工学院 力学与空天技术系,北京 100871)

(郑泉水推荐)

摘要: 根据黄筑平等提出的基于“三个构形”的表/界面能理论,研究了热弹性纳米复合材料的有效性质,重点讨论了残余界面应力对纳米尺度夹杂填充的热弹性复合材料有效热膨胀系数的影响.首先,给出了由第一类 Piola-Kirchhoff 界面应力表示的热弹性界面本构关系和 Lagrange 描述下的 Young-Laplace 方程;其次,采用 Hashin 复合球作为代表性体积单元,推导了在参考构形下复合球内部由残余界面应力诱导的残余弹性场,并进一步计算了从参考构形到当前构形的变形场;最后,基于以上计算得到了热弹性复合材料有效体积模量和有效热膨胀系数的解析表达式.研究表明,残余表/界面应力对复合材料的热膨胀系数有重要影响.

关键词: 纳米复合材料; 热弹性; 有效热膨胀系数; 残余界面应力; 尺度效应

中图分类号: O343 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2011.11.003

引 言

经典细观力学是研究多相复合材料性能的有效方法.自 20 世纪 80 年代以来,在这一领域已经取得了许多进展,已有一些专著和综述文章对其主要方法和结果进行了总结和评论,例如 Mura^[1], Nemat-Nasser 和 Hori^[2], Milton^[3], Torquato^[4] 等的专著,以及 Buryachenko^[5], 胡更开等^[6] 的综述.复合材料的热学性质同样也受到了广泛关注,Levin^[7] 推导了两相复合材料的有效热膨胀系数 $\bar{\alpha}_L$ 的表达式:

$$\bar{\alpha}_L = \alpha_0 + f(\alpha_1 - \alpha_0) : \mathbf{B}^1, \quad (1)$$

式中, f 是夹杂的体积分数; α_0 和 α_1 分别是基体和夹杂的热膨胀系数张量, \mathbf{B}^1 是夹杂的四阶应力集中系数张量.如果基体和夹杂的热弹性性质均为各向同性,则在式(1)中有 $\alpha_r = \alpha_r \mathbf{I}$ ($r = 0, 1$), $\bar{\alpha}_L = \bar{\alpha}_L \mathbf{I}$, \mathbf{I} 是二阶单位张量;进一步,当夹杂为球形时, $\mathbf{I} : \mathbf{B}^1 = B_m \mathbf{I}$, 其中

$$B_m = \frac{K_1(3K_0 + 4\mu_0)}{(1-f)K_0(3K_1 + 4\mu_0) + fK_1(3K_0 + 4\mu_0)},$$

K_0 , μ_0 和 K_1 , μ_1 分别为基体和粒子的体积模量和剪切模量.因此,式(1)所表示的两相复合材

* 收稿日期: 2011-07-26; 修订日期: 2011-08-15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10602002;10932001);973 资助项目(2010CB731503)

作者简介: 黄汝超(1984—),男,山东人,博士生(E-mail: hrchero@yahoo.com.cn);

陈永强(1973—),男,山东人,副教授,博士(联系人. E-mail: chenyc@pku.edu.cn).

料有效热膨胀系数可以具体写为

$$\bar{\alpha}_L = \frac{K_0 \alpha_0 (1-f)(3K_1 + 4\mu_0) + f K_1 \alpha_1 (3K_0 + 4\mu_0)}{K_0 (1-f)(3K_1 + 4\mu_0) + f K_1 (3K_0 + 4\mu_0)}. \quad (2)$$

对于纳米复合材料,由于其夹杂尺寸很小,材料中不同相之间的界面面积与复合材料的体积之比相对较大,所以界面能对纳米复合材料宏观有效性质的影响也将变得十分显著.近年来,表/界面能效应对纳米复合材料力学性能影响的研究已经吸引了很多学者的关注,例如可参考文献[8-15].式(2)是在假定界面两侧的位移和应力都连续的条件下载出的.为了考虑界面效应的影响,必须引入界面的本构关系和平衡条件.Chen等^[16]及Duan和Karihaloo^[17]讨论了界面效应对热弹性纳米复合材料的有效热膨胀系数的影响,但是没有考虑残余界面应力对有效热膨胀系数的影响.下面我们会看到这一影响也很重要.

事实上,表面或者界面的形成一般会伴随着表/界面应力的产生(称为“残余界面应力”),因此即使在没有外载的情况下,该表/界面应力也会在材料内部诱导产生一个残余应力场.基于以上考虑,Huang等^[18-21]提出了针对多相超弹性材料的表/界面能理论,该理论的要害总结如下:

a) 首次引进“虚设的无应力构形”的概念^[18-19],因此在研究多相材料表/界面能效应问题时共采用三个构形,即使对小变形情况也是如此.这三个构形分别是:虚设的无应力构形 κ_* ,存在由残余表/界面应力引起的弹性场的参考构形 κ_0 以及当前构形 κ ;此外还应强调:计算物体内弹性能时,应基于无应力构形 κ_* ,而在计算表/界面能和建立表/界面本构关系时,应该基于参考构形 κ_0 .

b) 给出了有限变形下超弹性表/界面本构关系的具体表达式^[19],这可以看作是对著名的Shuttleworth关系在小变形情况下的推广.可以看到,即使在小变形条件下,表/界面上的第一类和第二类Piola-Kirchhoff应力,以及表/界面Cauchy应力都是互不相等的^[20,22].

c) 建立了新的能量泛函,并根据其驻值条件同时导出了Lagrange描述和Euler描述下的Young-Laplace方程^[19,23].这一方法的优点是可以有效地用于建立复杂介质的表/界面平衡方程,如微极介质的表/界面Young-Laplace方程^[24].

d) 因为通常我们事先并不知道表/界面在变形后的位置(例如,变形后曲面的曲率张量),Huang和Sun等^[20]指出应该采用Lagrange描述下的Young-Laplace方程来建立表/界面的平衡方程.而且,由于在该描述中使用了第一类Piola-Kirchhoff界面应力,所以界面的本构关系应该采用第一类Piola-Kirchhoff表/界面应力来表示.由此得到与以前文献不同的结论是,残余表/界面应力对微纳米结构和纳米复合材料的力学性能是有影响的(参见文献[20,25]).这个结果也已经被Park和Klein等^[26-27]验证.

本文将上述表/界面能理论应用于纳米颗粒填充的热弹性复合材料有效性质的研究,讨论了残余界面应力对其有效热膨胀系数的影响.本文首先给出了表/界面的热弹性本构方程,然后利用“三个构形”的概念,计算了Hashin复合球在残余界面应力诱导下的变形以及由参考构形到当前构形的变形,最后给出了复合材料的有效体积模量和有效热膨胀系数的解析表达式.不同于前人的工作,本文的结果表明,残余表/界面应力对热弹性纳米复合材料的有效性质是有显著影响的.

1 界面基本方程

表/界面的基本方程有两类:一类是界面的本构关系,另一类是界面的平衡方程(或称为

Young-Laplace 方程).

考虑在参考构形 κ_0 中的光滑曲面/界面 A_0 , 经过变形, A_0 变为 A . A_0 和 A 的切平面上的协变基向量分别为 $\mathbf{A}_\beta = \mathbf{r}_{0,\beta}$ 和 $\mathbf{a}_\beta = \mathbf{r}_{0,\beta} + \mathbf{u}_{,\beta}$ ($\beta = 1, 2$), 其中 \mathbf{u} 为位移向量. A_0 和 A 上的单位法向量分别记为 \mathbf{A}_3 和 \mathbf{a}_3 . 假定位移 \mathbf{u} 在界面 A_0 上可以分成两部分: 在 A_0 的切平面内的 \mathbf{u}_{0s} 和在 A_0 的法线方向的 \mathbf{u}_{0n} , 于是, 界面变形梯度可写为^[23]

$$\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_s^{(in)} + \mathbf{F}_s^{(ou)}, \tag{3}$$

其中, $\mathbf{F}_s^{(in)} = \mathbf{i}_0 + \mathbf{u} \nabla_{0s}$, $\mathbf{F}_s^{(ou)} = d_\beta \mathbf{A}_3 \otimes \mathbf{A}^\beta$, 分别对应于界面变形梯度的面内项和面外项, $\mathbf{u} \nabla_{0s}$ 是界面上的位移梯度:

$$\mathbf{u} \nabla_{0s} = \mathbf{u}_{0s} \nabla_{0s} - u_0^n \mathbf{b}_0 = u_0^\lambda |_\beta \mathbf{A}_\lambda \otimes \mathbf{A}^\beta - u_0^n \mathbf{b}_0, \tag{4}$$

$d_\beta = u_0^\lambda b_{0\lambda\beta} + u_{0,\beta}^n$, $b_{0\lambda\beta}$ 分别是 A_0 上的曲率张量 \mathbf{b}_0 的协变分量^[28], \mathbf{i}_0 为 A_0 切平面上的二阶单位张量, ∇_{0s} 为界面上的梯度算子^[28].

通过 $\mathbf{C}_s = \mathbf{F}_s^T \cdot \mathbf{F}_s$ 和 $\mathbf{U}_s = \mathbf{C}_s^{1/2}$, 可定义 Lagrange 型的界面应变 \mathbf{E}_s ^[19,23]. 假定在当前构形界面 A 上单位面积的表/界面能 γ 依赖于温度 θ 和界面应变 \mathbf{E}_s , $\gamma = \gamma(\theta, \mathbf{E}_s)$. 这时, 在参考构形界面 A_0 上单位面积的表/界面能应为 $J_2 \gamma$, 其中 $J_2 = \det \mathbf{U}_s$ 表示变形后与变形前的曲面单元面积之比. 于是, 与 \mathbf{E}_s 相共轭的界面应力为

$$\mathbf{T}_s = \frac{\partial(J_2 \gamma)}{\partial \mathbf{E}_s}. \tag{5}$$

特别地, 下文中将把 \mathbf{E}_s 取为界面的 Green 应变: $\mathbf{E}_s = (\mathbf{C}_s - \mathbf{i}_0)/2$. 这时, 界面上的第一类和第二类 Piola-Kirchhoff 应力可分别写为^[19,23]

$$\mathbf{S}_s = 2\mathbf{F}_s \cdot \frac{\partial(J_2 \gamma)}{\partial \mathbf{C}_s}, \tag{6}$$

$$\mathbf{T}_s^{(1)} = 2 \frac{\partial(J_2 \gamma)}{\partial \mathbf{C}_s}. \tag{7}$$

而表/界面上的 Cauchy 应力为

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \frac{1}{J_2} \mathbf{F}_s \cdot \mathbf{T}_s^{(1)} \cdot \mathbf{F}_s^T, \tag{8}$$

显然, \mathbf{S}_s 也可以分解为面内项和面外项之和, $\mathbf{S}_s = \mathbf{S}_s^{(in)} + \mathbf{S}_s^{(ou)}$, 其中

$$\mathbf{S}_s^{(in)} = 2\mathbf{F}_s^{(in)} \cdot \frac{\partial(J_2 \gamma)}{\partial \mathbf{C}_s}, \quad \mathbf{S}_s^{(ou)} = 2\mathbf{F}_s^{(ou)} \cdot \frac{\partial(J_2 \gamma)}{\partial \mathbf{C}_s}.$$

对于各向同性界面, $\gamma = \gamma(\theta, J_1, J_2)$, 其中 $J_1 = \text{tr} \mathbf{U}_s$ 和 $J_2 = \det \mathbf{U}_s$ 分别为 \mathbf{U}_s 的第 1 和第 2 不变量. 当变形和温度变化较小时, 界面应力与温度之间可以近似为线性关系^[29-30]. 因此, 当略去高阶小量后, γ 在参考温度 θ_0 附近的展开式可类似于文献[20,22]写为

$$\begin{aligned} \gamma &= \gamma_0 + \gamma_1(J_1 - 2) + \gamma_2(J_2 - 1) - \gamma_0^{(1)}(\theta - \theta_0) + \\ &\quad \frac{1}{2} \gamma_{11}(J_1 - 2)^2 + \frac{1}{2} \gamma_{22}(J_2 - 1)^2 - \gamma_0^{(2)}(\theta - \theta_0)^2 + \\ &\quad \gamma_{12}(J_1 - 2)(J_2 - 1) - \gamma_1^{(1)}(J_1 - 2)(\theta - \theta_0) - \gamma_2^{(1)}(J_2 - 1)(\theta - \theta_0). \end{aligned} \tag{9}$$

这时式(6)为

$$\mathbf{S}_s = \bar{\gamma}_0 \mathbf{i}_0 + \bar{\gamma}_1 \mathbf{E}_s - \bar{\gamma}_0 \nabla_{0s} \mathbf{u} + \bar{\gamma}_0 \mathbf{F}_s^{(ou)}, \tag{10}$$

其中

$$\tilde{\gamma}_0 = J_2 \left(\frac{\partial \gamma}{\partial J_1} + J_2 \frac{\partial \gamma}{\partial J_2} + \gamma \right), \quad \tilde{\gamma}_1 = J_2 \frac{\partial \gamma}{\partial J_1}, \quad \mathbf{E}_s = \frac{1}{2} (\nabla_{0s} \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla_{0s}).$$

把式(9)代入式(10),有

$$\mathbf{S}_s = \gamma_0^* \mathbf{i}_0 - \hat{\gamma}_0 (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0) \mathbf{i}_0 + (\gamma_0^* + \gamma_1^*) (\text{tr} \mathbf{E}_s) \mathbf{i}_0 + \gamma_1 \mathbf{E}_s - \gamma_0^* \nabla_{0s} \mathbf{u} + \gamma_0^* \mathbf{F}_s^{(\text{ou})}, \quad (11)$$

式中, $\gamma_0^* = \gamma_0 + \gamma_1 + \gamma_2$, $\gamma_1^* = \gamma_1 + 2\gamma_2 + \gamma_{11} + 2\gamma_{12} + \gamma_{22}$, $\hat{\gamma}_0 = \gamma_0^{(1)} + \gamma_1^{(1)} + \gamma_2^{(1)}$, $\gamma_0^* \mathbf{i}_0$ 对应于残余的界面应力. 如果把式(9)分别代入式(7)和式(8),我们还可以得到含有残余界面应力的第二类 Piola-Kirchhoff 应力和表/界面 Cauchy 应力^[20,22]. 不难验证,由于残余表/界面应力 γ_0^* 的存在,由式(11)表示的表/界面第一类 Piola-Kirchhoff 应力并不等于表/界面的第二类 Piola-Kirchhoff 应力,也不等于表/界面的 Cauchy 应力.

为了与现有文献中的记法相比较,本文采用以下记号: $\lambda_s^* = \gamma_1^* + \gamma_0^*$, $2\mu_s^* = \gamma_1 - \gamma_0^*$, $K_s^* = 2(\lambda_s^* + \mu_s^*)$;此外,热膨胀系数 α_s 与 $\hat{\gamma}_0$ 相关, $\hat{\gamma}_0 = \alpha_s K_s^*$. 特别地,如果忽略残余界面应力的影响,则上述记号简化为 $\lambda_s = \gamma_1^*$, $2\mu_s = \gamma_1$ 以及 $K_s = 2(\lambda_s + \mu_s)$.

下面考虑界面的平衡方程,也就是 Young-Laplace 方程. 根据文献[23],Lagrange 描述下的 Young-Laplace 方程的具体表达式为

$$\begin{cases} \mathbf{A}_3 \cdot \llbracket \mathbf{S}^0 \rrbracket \cdot \mathbf{A}_3 = -\mathbf{S}_s^{(\text{in})} : \mathbf{b}_0 - [\mathbf{A}_3 \cdot \mathbf{S}_s^{(\text{ou})}] \cdot \nabla_{0s}, \\ \mathbf{P}_0 \cdot \llbracket \mathbf{S}^0 \rrbracket \cdot \mathbf{A}_3 = -\mathbf{S}_s^{(\text{in})} \cdot \nabla_{0s} + [\mathbf{A}_3 \cdot \mathbf{S}_s^{(\text{ou})}] \cdot \mathbf{b}_0, \end{cases} \quad (12)$$

式中, \mathbf{S}^0 是三维物体内部基于参考构形的第一类 Piola-Kirchhoff 应力, $\llbracket \mathbf{S}^0 \rrbracket$ 表示 \mathbf{S}^0 在曲面 A_0 上的间断值. \mathbf{b}_0 是参考构形下界面的曲率张量, $\mathbf{P}_0 = \mathbf{I} - \mathbf{A}_3 \otimes \mathbf{A}_3$, 而 \mathbf{I} 是三维空间中的二阶单位张量.

需要指出,式(12)中的 \mathbf{S}^0 不仅与从参考构形 κ_0 到当前构形 κ 的变形梯度 \mathbf{F} 有关,还与从虚设的无应力构形 κ_* 到参考构形 κ_0 的变形梯度 \mathbf{F}^* 有关. 当前构形 κ 相对于无应力构形 κ_* 的总的变形梯度为 $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^*$, 由此可分别定义相对于 κ_0 和 κ_* 的 Green 应变^[19,23]

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} - \mathbf{I}), \quad (13)$$

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{F}}^T \cdot \tilde{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) = \mathbf{F}^{*T} \cdot \mathbf{E} \cdot \mathbf{F}^* + \mathbf{E}^*, \quad (14)$$

其中 $\mathbf{E}^* = (\mathbf{F}^{*T} \cdot \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) / 2$ 为残余 Green 应变.

Huang 等^[19]强调,物体内的 Helmholtz 自由能密度应基于无应力构形 κ_* , 故可写为 $\psi = \psi(\boldsymbol{\theta}, \tilde{\mathbf{E}})$. 这时,基于参考构形 κ_0 的第一类和第二类 Piola-Kirchhoff 应力可写为^[19,23]

$$\mathbf{S}^0 = \mathbf{F} \cdot \mathbf{T}^0 = \rho_0 \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \tilde{\mathbf{E}}} \cdot \mathbf{F}^{*T}, \quad \mathbf{T}^0 = \rho_0 \mathbf{F}^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \tilde{\mathbf{E}}} \cdot \mathbf{F}^{*T}, \quad (15)$$

其中 ρ_0 为参考构形中的质量密度.

由式(11)和式(12)可见,体内的残余应力场 $\boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{S}^0 |_{\substack{\mathbf{F}=\mathbf{I} \\ \boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0}}$, 它是由残余界面应力 $\mathbf{S}_s = \gamma_0^* \mathbf{i}_0$ 引起的.

假设由 κ_0 到 κ 的变形很小,这时物体内的应变可近似写为

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{u} \nabla_0 + \nabla_0 \mathbf{u}), \quad (16)$$

其中, \mathbf{u} 是由 κ_0 到 κ 的位移, ∇_0 表示三维空间的梯度算子.

式(15)的 \mathbf{T}^0 在参考温度 θ_0 和 $\mathbf{F} = \mathbf{I}$ 附近对 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 和 $\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0$ 展开后,有 $\mathbf{T}^0 = \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbf{L} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0)]$.

$-\theta_0]$ 。其中 $\mathbf{L} = \rho_0(\partial^2\psi/\partial\mathbf{E}\partial\mathbf{E})|_{\mathbf{E}=\mathbf{0}}$ 为四阶弹性张量,它通常还依赖于 \mathbf{F}^* , $\mathbf{L} = \mathbf{L}(\mathbf{F}^*)$; $\boldsymbol{\alpha}$ 为热膨胀张量。于是,略去高阶小量后有

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^0 &= (\mathbf{I} + \mathbf{u} \nabla_0) \cdot [\boldsymbol{\sigma}^* + \mathbf{L}(\mathbf{F}^*) : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{L}(\mathbf{F}^*) : \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)] \doteq \\ &\boldsymbol{\sigma}^* + (\mathbf{u} \nabla_0) \cdot \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbf{L}(\mathbf{F}^*) : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{L}(\mathbf{F}^*) : \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0). \end{aligned} \quad (17)$$

如果我们进一步假定由无应力构形到参考构形的变形也很小,式(14)可近似写为

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon}^* + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (18)$$

因此 $\mathbf{L}(\mathbf{F}^*)$ 可近似看作常量,式(17)右端第2项的高阶小量也可略去,于是得到

$$\mathbf{S}^0 = \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbf{L} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha}(\theta - \theta_0)] = \boldsymbol{\sigma}^* + \boldsymbol{\sigma}, \quad (19)$$

其中, \mathbf{L} 是一个不依赖于 \mathbf{F}^* 的弹性张量。

2 粒子填充热弹性复合材料的等效性质

2.1 Hashin 复合球代表单元位移场

下面考虑球形粒子填充的热弹性复合材料。粒子和基体均为各向同性的线性热弹性材料。采用文献[18]中的方法,取 Hashin 复合球(composite sphere assemblage, CSA)模型作为代表性单元。假定在参考构形下,粒子和复合球的半径分别是 a 和 b ,则粒子的体积分数为 $f = (a/b)^3$ 。由于在计算有效热膨胀系数时只涉及到体积模量,因此只需要分析球对称加载的情况,这时复合球的球对称变形可以用径向位移 u_r 来表示。在小变形和均匀温度改变的条件下,其应变分量与应力分量分别为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_r = \frac{du_r}{dr}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_\theta = \boldsymbol{\varepsilon}_\phi = \frac{u_r}{r}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{r\theta} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\theta\phi} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\phi r} = 0, \quad (20)$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_r = \left(K + \frac{4\mu}{3}\right) \frac{du_r}{dr} + \left(2K - \frac{4\mu}{3}\right) \frac{u_r}{r} - 3K\alpha\Delta\theta, \\ \boldsymbol{\sigma}_\theta = \boldsymbol{\sigma}_\phi = \left(K - \frac{2\mu}{3}\right) \frac{du_r}{dr} + \left(2K + \frac{2\mu}{3}\right) \frac{u_r}{r} - 3K\alpha\Delta\theta, \\ \boldsymbol{\tau}_{r\theta} = \boldsymbol{\tau}_{\theta\phi} = \boldsymbol{\tau}_{\phi r} = 0, \end{cases} \quad (21)$$

式中, α 为线性热膨胀系数; K 和 μ 分别是体积模量和剪切模量,在粒子中和基体中的取值不同; $\Delta\theta = \theta - \theta_0$ 为温度的改变。

平衡方程

$$r^2 \frac{d^2 u_r}{dr^2} + 2r \frac{du_r}{dr} - 2u_r = 0 \quad (22)$$

的通解为

$$u_r = Fr + G/r^2, \quad (23)$$

其中,在粒子中的位移和应力分别是

$$u_r^1 = F_1 r, \quad \boldsymbol{\sigma}_r^1 = 3K_1(F_1 - \alpha_1 \Delta\theta). \quad (24)$$

在基体中的位移和应力场分别是

$$u_r^0 = F_0 r + \frac{G_0}{r^2}, \quad \boldsymbol{\sigma}_r^0 = 3K_0 F_0 - 3K_0 \alpha_0 \Delta\theta - \frac{4\mu_0 G_0}{r^3}, \quad (25)$$

式(24)和(25)中的3个常系数 F_1, F_0, G_0 可以根据粒子与基体间的界面 $r = a$ 处的连接条件及外边界 $r = b$ 处的边界条件来确定。显然,在球对称变形条件下,式(3)和式(11)的面外项都为0,即 $\mathbf{F}_s^{(\text{ou})} = \mathbf{0}$, $\mathbf{S}_s^{(\text{ou})} = \gamma_0^* \mathbf{F}_s^{(\text{ou})} = \mathbf{0}$ 。

式(19)中,体内的残余应力场 $\boldsymbol{\sigma}^*$ 可由式(11)的残余界面应力 $\mathbf{S}_s^* = \gamma_0^* \mathbf{i}_0$ 确定,故式(12)可具体写为

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma}_{rr}^* \rrbracket \Big|_{r=a} = \frac{2\gamma_0^*}{a}, \quad (26)$$

其中,界面的曲率张量 $\mathbf{b}_0 = -\mathbf{i}_0/a$ 由参考构形下粒子的半径 a 表示.由式(24)和(25),上式可写为

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma}_{rr}^* \rrbracket \Big|_{r=a} = 3K_0 F_0^{(*)} - 3K_1 F_1^{(*)} - \frac{4\mu_0 G_0^{(*)}}{a^3} = \frac{2\gamma_0^*}{a}, \quad (27)$$

式中, $F_0^{(*)}$, $G_0^{(*)}$, $F_1^{(*)}$ 为待定常数.

在参考构形中,Hashin 复合球的外边界 $r = b$ 处没有施加载荷,故有

$$\boldsymbol{\sigma}_{rr}^{(0*)} \Big|_{r=b} = 3K_0 F_0^{(*)} - 4\mu_0 G_0^{(*)}/b^3 = 0. \quad (28)$$

再由界面 $r = a$ 处的位移连续性条件

$$F_1^{(*)} a = F_0^{(*)} a + \frac{G_0^{(*)}}{a^2}. \quad (29)$$

联立式(27)、(28)和(29)便可求出 $F_0^{(*)}$, $G_0^{(*)}$, $F_1^{(*)}$, 例如:

$$F_1^{(*)} = -\frac{2\gamma_0^*}{3a} \frac{4a^3\mu_0 + 3b^3K_0}{4K_0\mu_0(b^3 - a^3) + K_1(4a^3\mu_0 + 3b^3K_0)},$$

特别地,在参考构形中界面 $r = a$ 和边界 $r = b$ 处的残余位移可写为

$$\begin{cases} u_r^{(0*)} \Big|_{r=a} = -\frac{2}{3} \frac{(4a^3\mu_0 + 3b^3K_0)\gamma_0^*}{4K_0\mu_0(b^3 - a^3) + K_1(4a^3\mu_0 + 3b^3K_0)}, \\ u_r^{(0*)} \Big|_{r=b} = -\frac{2}{3} \frac{a^2b(4\mu_0 + 3K_0)\gamma_0^*}{4K_0\mu_0(b^3 - a^3) + K_1(4a^3\mu_0 + 3b^3K_0)}. \end{cases} \quad (30)$$

2.2 热弹性复合材料的有效体积模量和有效热膨胀系数

下面我们将仅关注复合材料从参考构形 κ_0 到当前构形 κ 的力学响应,式(12)中的 \mathbf{S}^0 和 \mathbf{S}_s 可分别用 $\Delta\mathbf{S}^0 = \mathbf{S}^0 - \boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{\sigma}$ 和 $\Delta\mathbf{S}_s = \mathbf{S}_s - \gamma_0^* \mathbf{i}_0$ 代替,由式(19)和式(11),这时的式(12)可写为

$$\mathbf{A}_3 \cdot \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \cdot \mathbf{A}_3 = -\Delta\mathbf{S}_s^{(\text{in})} : \mathbf{b}_0 \quad (31)$$

或具体写为

$$\llbracket \boldsymbol{\sigma}_{rr} \rrbracket \Big|_{r=a} = \frac{2}{a^2} (\gamma_0^* + 2\gamma_1^* + \gamma_1) u_r \Big|_{r=a} - \frac{2}{a} \hat{\gamma}_0 \Delta\theta, \quad (32)$$

其中,位移 u_r 表示的是从参考构形到当前构形的相对位移.把式(24)和(25)代入方程(32)中得到

$$\begin{aligned} 3K_0 F_0 - 3K_0 \alpha_0 \Delta\theta - 4\mu_0 G_0/a^3 - 3K_1 (F_1 - \alpha_1 \Delta\theta) = \\ \frac{2}{a} F_1 (\gamma_0^* + 2\gamma_1^* + \gamma_1) - \frac{2}{a} \hat{\gamma}_0 \Delta\theta. \end{aligned} \quad (33)$$

在界面 $r = a$ 处的位移连续条件为

$$F_1 a = F_0 a + \frac{G_0}{a^2}. \quad (34)$$

如果在外边界 $r = b$ 处施加法向面力 $\Sigma_m/3 = \text{tr } \boldsymbol{\Sigma}/3$, 则有

$$3K_0 F_0 - 3K_0 \alpha_0 \Delta\theta - \frac{4\mu_0 G_0}{b^3} = \frac{1}{3} \Sigma_m, \quad (35)$$

由式(33)、(34)和(35)可联立求解出待定常数 F_0, G_0, F_1 .

由此,复合球从参考构形到当前构形的应变的球量部分可由 $r = b$ 处的径向位移表示:

$$\frac{1}{3} E_m = \frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{E} = \frac{u_r^0|_{r=b}}{b}, \quad (36)$$

其中

$$u_r^0|_{r=b} = F_0 b + G_0/b^2. \quad (37)$$

式(36)中的 E_m 可分解成两部分: $E_m = E_m^{(1)} + E_m^{(2)} \Delta\theta$, 其中

$$E_m^{(1)} = \frac{(-2fK_s^* + 2K_s^* + 4a\mu_0 + 3afK_0 - 3afK_1 + 3aK_1)\Sigma_m}{4f\mu_0(2K_s^* + 3aK_1) + 3K_0(-4af\mu_0 + 2(K_s^* + 2a\mu_0) + 3aK_1)}, \quad (38)$$

$$E_m^{(2)} = [24f\hat{\gamma}_0\mu_0 + 18f\hat{\gamma}_0K_0 + 36af\mu_0\alpha_1K_1 + 27af\alpha_1K_0K_1 + 9(1-f)\alpha_0K_0(2K_s^* + 4a\mu_0 + 3aK_1)]/[4f\mu_0(2K_s^* + 3aK_1) + 3K_0(-4af\mu_0 + 2K_s^* + 4a\mu_0 + 3aK_1)]. \quad (39)$$

这里用到了 $K_s^* = 2(\lambda_s^* + \mu_s^*) = \gamma_0^* + 2\gamma_1^* + \gamma_1$. 复合材料的等效体积模量 \bar{K} 和等效热膨胀系数 $\bar{\alpha}$ 可由式(38)和(39)计算出来. 因为

$$\text{tr} \boldsymbol{\Sigma} = 3\bar{K} \text{tr} \mathbf{E}_m - 9\bar{K}\bar{\alpha}\Delta\theta, \text{ 或 } \Sigma_m = 3\bar{K}E_m^{(1)} + 3\bar{K}(E_m^{(2)} - 3\bar{\alpha})\Delta\theta$$

对任意的 $\Delta\theta$ 都成立, 所以 $\Sigma_m = 3\bar{K}E_m^{(1)} + 3\bar{K}(E_m^{(2)} - 3\bar{\alpha})\Delta\theta$, 因此有

$$\bar{K} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Sigma_m}{E_m^{(1)}} \right) \quad (40)$$

和

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{3} E_m^{(2)}. \quad (41)$$

将式(38)代入式(40)后可求得等效体积模量为

$$\bar{K} = K_0 + \frac{f(4\mu_0 + 3K_0)(2K_s^*/(3a) + K_1 - K_0)}{4\mu_0 + 3fK_0 + 3(1-f)(K_1 + 2K_s^*/(3a))}. \quad (42)$$

这个结果曾在文献[20]中得到. 需要指出, 上式中包含与残余界面应力有关的项 $2K_s^*/(3a)$. 如果忽略残余界面应力 γ_0^* 的影响, 则 K_s^* 退化到 K_s , 这时上式可退化为文献[16]中的式(33)或文献[14]中的式(36).

把式(39)代入式(41), 可求得复合材料的有效热膨胀系数为

$$\bar{\alpha} = \frac{K_0\alpha_0(1-f)[(3K_1 + 4\mu_0) + 2K_s^*/a] + f(K_1\alpha_1 + 2\alpha_s K_s^*/3a)(3K_0 + 4\mu_0)}{K_0(1-f)[(3K_1 + 4\mu_0) + 2K_s^*/a] + f(K_1 + 2K_s^*/3a)(3K_0 + 4\mu_0)}, \quad (43)$$

其中, 我们将 $\hat{\gamma}_0$ 表示为 $\alpha_s K_s^*$. 如果不考虑残余应力 γ_0^* 的影响, K_s^* 将退化成 K_s , 上式的结果将退化为 Chen 等文献[16]中的式(31)和文献[17]中的式(9). 如果完全忽略界面应力的影响, 即令 $K_s^* = 0$, 上式将与 Levin^[7]的结果相一致, 即本文的式(2).

3 算 例

下面考察残余表/界面应力对有效热膨胀系数的影响. 考虑包含球形孔洞的热弹性纳米复合材料, 基体材料为聚乙烯, 其体积模量、剪切模量和热膨胀系数分别是 $K_M = 3.33 \times 10^9$ Pa, $\mu_M = 0.345 \times 10^9$ Pa, $\alpha_M = 2.0(10^{-4}/K)$ ^[31]. 根据文献[32], 在本文中取 $\gamma_0^* = 0.036$ J/m²; 由于 γ_1 和 γ_1^* 在现有文献中缺乏实验数据, 假定 γ_1 和 γ_1^* 与界面能 γ 为同一量级, 并取 $\gamma_1 = \gamma_1^*$

$=\gamma_0^*/2$, 据此可以得到 $K_s^* = 0.09 \text{ J/m}^2$, $K_s = 0.054 \text{ J/m}^2$. 同样, 界面的热膨胀系数也缺乏有关的实验数据, 不妨将界面的热膨胀系数分别取为 $\alpha_s = 4\alpha_M$ 或 $0.5\alpha_M$ 以作对比.

残余界面应力对有效热膨胀系数的影响见图 1 至图 4. 这里将本文方法求得的有效热膨胀系数记为 $\bar{\alpha}$, 将文献[16-17]中的有效热膨胀系数记为 $\bar{\alpha}_{ISM}$. 图 1 至图 4 中, 我们用 Levin 给出的有效热膨胀系数 $\bar{\alpha}_L$ 分别对 $\bar{\alpha}$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}$ 进行了归一化.

图 1 和图 2 给出了在两种不同的孔洞体积分数下, $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ 随着孔洞半径的变化 (1 ~ 50 nm) 曲线; 图 3 和图 4 则给出了在两种不同的孔洞半径下, $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ 随着孔洞体积分数 (5% ~ 95%) 的变化曲线. 在图 1 和图 3 中, 界面的热膨胀系数取 $\alpha_s = 4.0\alpha_M$, 在图 2 和图 4 中, 取 $\alpha_s = 0.5\alpha_M$.

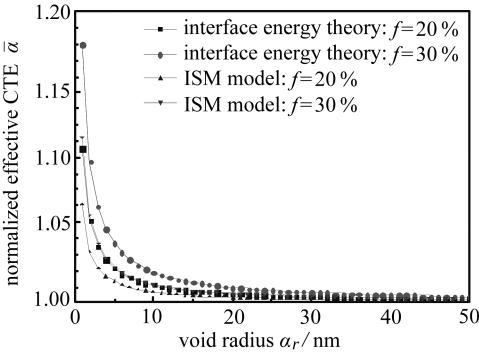


图 1 规一化的有效热膨胀系数 $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ 随孔洞半径的变化关系 ($\alpha_s = 4\alpha_M$)

Fig. 1 Normalized effective thermal expansion coefficients $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ and $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ versus the radius of voids ($\alpha_s = 4\alpha_M$)

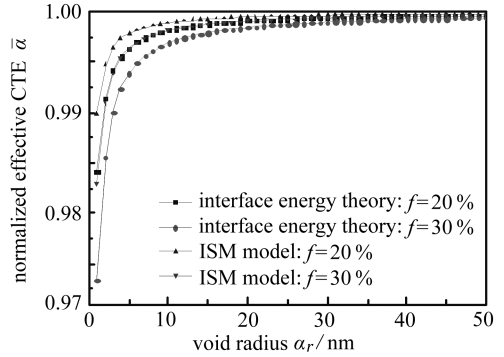


图 2 规一化的有效热膨胀系数 $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ 随孔洞半径的变化关系 ($\alpha_s = 0.5\alpha_M$)

Fig. 2 Normalized effective thermal expansion coefficients $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ and $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ versus the radius of voids ($\alpha_s = 0.5\alpha_M$)

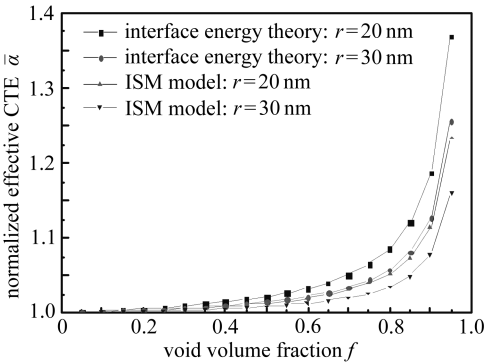


图 3 规一化的有效热膨胀系数 $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ 随孔洞体积分数的变化关系 ($\alpha_s = 4\alpha_M$)

Fig. 3 Normalized effective thermal expansion coefficients $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ and $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ versus the volume fraction of voids ($\alpha_s = 4\alpha_M$)

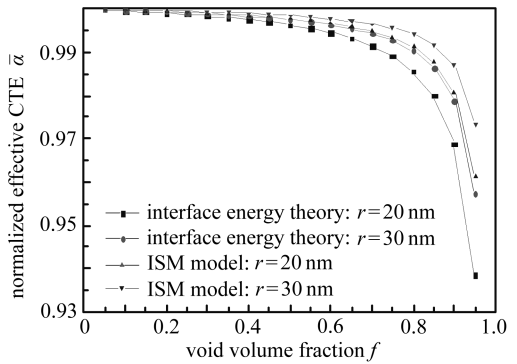


图 4 规一化的有效热膨胀系数 $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ 和 $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ 随孔洞体积分数的变化关系 ($\alpha_s = 0.5\alpha_M$)

Fig. 4 Normalized effective thermal expansion coefficients $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L$ and $\bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L$ versus the volume fraction of voids ($\alpha_s = 0.5\alpha_M$)

由以上 4 图中可以看出, 不论是本文还是文献中给出的有效热膨胀系数均表现出尺度效应. 尽管有效热膨胀系数的变化趋势是不同的: 当取 $\alpha_s = 4\alpha_M$ 时, $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L > \bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L > 1$, 当 $\alpha_s =$

0.5 α_M 时, $\bar{\alpha}/\bar{\alpha}_L < \bar{\alpha}_{ISM}/\bar{\alpha}_L < 1$, 但是随着孔洞半径减小(或孔洞体积分数的增加), 残余表/界面应力对有效热膨胀系数的影响是越来越明显的。

4 结束语

本文根据黄筑平等提出的基于三个构形概念的表/界面能理论, 研究了粒子填充纳米复合材料的有效热膨胀系数, 给出了包含残余界面应力效应的有效热膨胀系数解析表达式。

首先, 本文给出了关于表/界面的两类基本方程: 即表/界面的本构关系和平衡方程; 然后基于三个构形概念, 利用 Hashin 复合球模型作为代表性体积单元, 推导出热弹性复合材料有效热膨胀系数的解析表达式。在本文推导中, 考虑了界面残余应力, 结果表明残余界面应力对有效热膨胀系数有显著的影响, 而且在忽略残余界面应力的情况下, 本文的结果可以退化到文献[16-17]得到的结果。

参考文献:

- [1] Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids*[M]. Dordrecht: Martinus Nijhoff, 1987.
- [2] Nemat-Nasser S, Hori M. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials* [M]. Amsterdam: Elsevier, 1993.
- [3] Milton G W. *The Theory of Composites*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- [4] Torquato S. *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties* [M]. New York: Springer, 2002.
- [5] Buryachenko V A. Multiparticle effective field and related methods in micromechanics of composite materials[J]. *Appl Mech Review*, 2001, **54**(1): 1-47.
- [6] 胡更开, 郑泉水, 黄筑平. 复合材料有效弹性性质分析方法[J]. *力学进展*, 2001, **31**(3):361-393. (HU Geng-kai, ZHENG Quan-shui, HUANG Zhu-ping. Micromechanics methods for effective elastic properties of composite materials[J]. *Advances in Mechanics*, 2001, **31**(3): 361-393. (in Chinese))
- [7] Levin V M. Thermal expansion coefficients of heterogeneous materials[J]. *Mekhanika Tverdogo Tela*, 1967, **2**(1):88-94.
- [8] Ibach H. The role of surface stress in reconstruction, epitaxial growth and stabilization of mesoscopic structures[J]. *Surface Sci Rep*, 1997, **29**(5/6): 193-263.
- [9] Steigmann D J, Ogden R W. Elastic surface-substrate interactions[J]. *Pro R Soc Lond A*, 1999, **455**(1982): 437-474.
- [10] Haiss W. Surface stress of clean and adsorbate-covered solids[J]. *Rep Prog Phys*, 2001, **64**(5):591-648.
- [11] Müller P, Saúl A. Elastic effects on surface physics[J]. *Surf Sci Rep*, 2004, **54**(5/8):157-258.
- [12] Fried E, Gurtin M E. A unified treatment of evolving interfaces accounting for small deformations and atomic transport with emphasis on grain-boundaries and epitaxy[J]. *Adv Appl Mech*, 2004, **40**:1-177.
- [13] Murdoch A I. Some fundamental aspects of surface modeling[J]. *J Elasticity*, 2005, **80**(1/3): 33-52.
- [14] DUAN Hui-ling, WANG Jian-xiang, HUANG Zhu-ping, Karihaloo B L. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress[J]. *J Mech Phys Solids*, 2005, **53**(7):1574-1596.

- [15] Sharma P, Wheeler L T. Size-dependent elastic state of ellipsoidal nano-inclusions incorporating surface/interface tension[J]. *J Appl Mech*, 2007, **74**(3): 447-454.
- [16] Chen T Y, Dvorak G J, Yu C C. Solids containing spherical nano-inclusions with interface stresses: effective properties and thermal mechanical connections[J]. *Int J Solids Struct*, 2007, **44**(3/4): 941-955.
- [17] DUAN Hui-ling, Karihaloo B L. Thermo-elastic properties of heterogeneous materials with imperfect interfaces: generalized Levin's formula and Hill's connections [J]. *J Mech Phys Solids*, 2007, **55**(5):1036-1052.
- [18] SUN Li, WU Yi-ming, HUANG Zhu-ping, WANG Jian-xiang. Interface effect on the effective bulk modulus of a particle-reinforced composite[J]. *Acta Mech Sinica*, 2004, **20**(6): 676-679.
- [19] HUANG Zhu-ping, WANG Jian-xiang. A theory of hyperelasticity of multi-phase media with surface/interface energy effect[J]. *Acta Mech*, 2006, **182**(3/4):195-210.
- [20] HUANG Zhu-ping, SUN Li. Size-dependent effective properties of a heterogeneous material with interface energy effect: from finite deformation theory to infinitesimal strain analysis [J]. *Acta Mech*, 2007, **190**(1/4):151-163.
- [21] HUANG Zhu-ping, WANG Zhi-qiao, ZHAO Ya-pu, WANG Jian-xiang. Influence of particle-size distribution on effective properties of nanocomposites[C]//*Advances in Heterogeneous Materials Mechanics* (ICHMM-2008), Pennsylvania: Destech Publications, 2008: 925-932.
- [22] HUANG Zhu-ping. Erratum to: size-dependent effective properties of a heterogeneous material with interface energy effect: from finite deformation theory to infinitesimal strain analysis [J]. *Acta Mech*, 2010, **215**(1/4):363-364.
- [23] HUANG Zhu-ping, WANG Jian-xiang. Erratum to: a theory of hyperelasticity of multi-phase media with surface/interface energy effect [J]. *Acta Mech*, 2010, **215**(1/4): 365-366.
- [24] CHEN Huan, HU Geng-kai, HUANG Zhu-ping. Effective moduli for micropolar composite with interface effect[J]. *Int J Solids Struct*, 2007, **44**(25/26): 8106-8118.
- [25] WANG Zhi-qiao, ZHAO Ya-pu, HUANG Zhu-ping. The effects of surface tension on the elastic properties of nano structures[J]. *Int J Eng Sci*, 2010, **48**(2): 140-150.
- [26] Park H S, Klein P A. Surface stress effects on the resonant properties of metal nanowires: the importance of finite deformation kinematics and the impact of the residual surface stress [J]. *J Mech Phys Solids*, 2008, **56**(11): 3144-3166.
- [27] Park H S, Klein P A. Boundary condition and surface stress effects on the resonant properties of metal nanowires [C]//*Advances in Heterogeneous Materials Mechanics* (ICHMM-2008), Pennsylvania: Destech Publications, 2008: 89-96.
- [28] 黄筑平. 连续介质力学基础[M]. 北京: 高等教育出版社, 2003. (HUANG Zhu-ping. *Fundamentals of Continuum Mechanics*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2003. (in Chinese))
- [29] Lu H M, Jiang Q. Surface tension and its temperature coefficient for liquid metals[J]. *J Phys Chem B*, 2005, **109**(32):15463-15468.
- [30] Zhao M, Zheng W T, Li J C, Wen Z, Gu M X, Sun C Q. Atomistic origin, temperature dependence, and responsibilities of surface energetics: an extended broken-bond rule[J]. *Phys Rev B*, 2007, **75**(8):085427.
- [31] Mark J E. *Polymer Data Handbook*[M]. 2nd ed. New York: Oxford University Press, 2009.
- [32] 吴人洁. 高聚物的表面与界面[M]. 北京: 科学出版社, 1998. (WU Ren-jie. *The Surface and Interface of Polymer*[M]. Beijing: Science Press, 1998. (in Chinese))

Effects of Residual Interface Stress on Effective Thermal Expansion Coefficient of Particle-Filled Composite

HUANG Ru-chao, CHEN Yong-qiang

(*LTCS & Department of Mechanics and Engineering Science, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China*)

Abstract: The “three configurations” based surface/interface energy theory proposed by Huang *et al* was used to study the effective properties of thermal elastic nanocomposites. Particular emphasis was placed on the discussions of the influence of the residual interface stress on the thermal expansion coefficient of the said composites. First, the thermo-elastic interface constitutive relations expressed in terms of the first kind Piola-Kirchhoff interface stress and the Lagrangian description of the generalized Young-Laplace equation were presented. Second, the Hashin’s composite sphere assemblage (CSA) was taken as the representative volume element (RVE), and the elastic deformations from the stress-free configuration to the reference configuration and from the reference configuration to the current configuration were calculated. Based on the above calculations, an analytical expression of the effective thermal expansion coefficient of thermo-elastic composite was derived. It is shown that the “residual” interface stress has a significant effect on the thermal expansion properties of the thermo-elastic nanocomposites.

Key words: nanocomposites; effective thermal expansion; residual interface stress; size-dependent