

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

ÚSTAV MECHANIKY TĚLES, MECHATRONIKY A BIOMECHANIKY

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

INSTITUTE OF SOLID MECHANICS, MECHATRONICS AND BIOMECHANICS

**LOMOVĚ-MECHANICKÝ MODEL
ČÁSTICOVÉHO KOMPOZITU**

DISERTAČNÍ PRÁCE

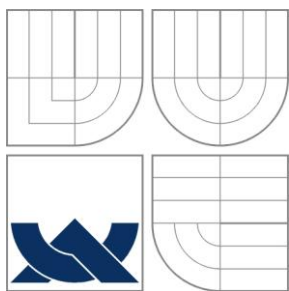
DOCTORAL THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Ing. ZDENĚK MAJER

BRNO 2009



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV MECHANIKY TĚLES, MECHATRONIKY A
BIOMECHANIKY

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF SOLID MECHANICS, MECHATRONICS AND
BIOMECHANICS

LOMOVĚ-MECHANICKÝ MODEL ČÁSTICOVÉHO KOMPOZITU

FRACTURE-MECHANICS MODEL OF PARTICULATE COMPOSITE

DISERTAČNÍ PRÁCE
PHD. THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

ING. ZDENĚK MAJER

VEDOUCÍ PRÁCE
SUPERVISOR

PROF. RNDR. ZDENĚK KNĚSL, CSC.

BRNO 2009

© Majer Zdeněk, 2009

Ústav mechaniky těles, mechatroniky a biomechaniky
Fakulta strojního inženýrství
Vysoké učení technické v Brně
Technická 2, 616 69 Brno

a

Ústav fyziky materiálů
Akademie věd České republiky, v. v. i.
Žižkova 22, 616 62 Brno

tel.: (+420) 532 290 362
fax.: (+420) 541 218 657
e-mail: majer@ipm.cz

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto disertační práci zpracoval samostatně na základě konzultací s mým školitelem Prof. RNDr. Zdeňkem Knéslem, CSc. a školitelem specialistou Ing. Pavlem Hutařem, Ph.D. a s použitím uvedené literatury.

Zdeněk Majer

Bibliografická citace mé práce:

MAJER, Z. *Lomově-mechanický model částicového kompozitu*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2009. 82 s. Vedoucí disertační práce prof. RNDr. Zdeněk Knésl, CSc.

Poděkování:

Tímto bych rád poděkoval všem pracovníkům a kolegům z ÚFM AV ČR Brno a ÚMTMB na FSI VUT v Brně. Především bych rád poděkoval mému školiteli Prof. RNDr. Zdeňku Knéslovi, CSc. a mému školiteli specialistovi Ing. Pavlu Hutařovi, Ph.D. za významnou pomoc, podporu a cenné rady, které mi poskytli při vytvoření této práce. Za finanční podporu děkuji Grantové agentuře ČR a Grantové agentuře AV.

Abstrakt: Předkládaná disertační práce se zabývá modelováním vlastností částicového kompozitu s polymerní maticí plněnou tuhými částicemi v relaci k jeho mikrostruktúře. Je navržen model kompozitu jako třífázové kontinuum (matrice, částice, mezivrstva) a jsou analyzovány vlivy jednotlivých složek na mikro a makrovlastnosti a na chování kompozitu jako celku. Prezentované výsledky byly získány aplikací lineárně-elastické lomové mechaniky a pro numerické řešení byla využita metoda konečných prvků. Po nezbytném úvodu a stanovení cílů práce jsou uvedeny základní pojmy a postupy lomové mechaniky potřebné pro pochopení studované problematiky. Následující část je věnována podrobnější charakteristice jednotlivých složek tvořících částicový kompozit. Podstatná část disertace je věnována výsledkům, které popisují chování částicového kompozitu z hlediska víceúrovňové analýzy: z hlediska makroúrovně je sledován zejména celkový modul pružnosti kompozitu E , z hlediska mikroúrovně je důkladně rozpracována problematika šíření mikrotrhlin v polymerní matici s částicemi a diskutován vliv jejich interakce s částicemi na lomovou houževnatost. Speciální pozornost je věnována stínicímu efektu, který je vyvolán existencí mezivrstvy mezi maticí a částicemi a v případě poddajnější mezivrstvy vede k otupení trhliny. Výsledky získané v disertační práci umožňují stanovit podmínky a požadavky na mikrostrukturu tak, aby se zvýšila lomová houževnatost kompozitu a přitom pokles jeho tuhosti nebyl výrazný a byl tak zachován požadovaný aplikační potenciál. Práce přináší rovněž řadu obecnějších poznatků rozšiřujících aplikační možnosti lineárně-elastické lomové mechaniky v případě nehomogenních těles. V rámci tohoto zobecnění je zejména diskutováno chování trhliny v blízkosti rozhraní dvou materiálů včetně možných aplikací na problematiku vícevrstevných polymerních trubek. Závěry této disertační práce lze použít především jako doporučení pro samotné výrobce částicových kompozitů, zejména z hlediska získání požadovaných finálních materiálových charakteristik (jako jsou např. modul pružnosti E či lomová houževnatost K_{IC}).

Klíčová slova: lineárně-elastická lomová mechanika, částicový kompozit, částice $CaCO_3$, mezivrstva, trhlina.

Abstract: *This Ph.D. thesis deals with a modeling of polymer particulate composite with hard particles in relation with composite's microstructure. A three phase continuum model of the composite consisting of matrix, particles and interphase is suggested and analyzed. Influence of individual parts on micro and macro behavior of composite is evaluated. Presented results were obtained by using linear-elastic fracture mechanics. Numerical calculations were performed by a finite element method using the system ANSYS. After the introduction and formulation of the goals of the dissertation, the used basic assumptions and approaches of linear elastic fracture mechanics are presented. Main part of the thesis is devoted to results describing behavior of the composite obtained from multilevel modeling. From macrolevel especially the relation between global Young's modulus and configuration and properties of particles is studied. From microlevel point of view the interaction between microcracks growing in the matrix with coated particles is very carefully analyzed. The basic toughening mechanism consists in shielding the stiff particles by a softer interphase followed by the debonding. This is connected with the blunting of microcracks. The influence of material and geometry parameters characterizing the interphase on micro and macro properties of the composite is analyzed and discussed. The results record in Ph.D. thesis can be helpful in determination of microstructure attributes which are necessary to find out ideal relationship between stiffness and toughness. The thesis presents also general results concerning the crack propagation in vicinity of an interface between two different materials and possible applications to problem of multilayer polymer pipes. The conclusions of this Ph.D. thesis can be useful for particulate composite's producer to better understanding of individual composite parts influence on material behaviour of the structure.*

Key words: *linear-elastic fracture mechanics, particulate composite, particle CaCO₃, interphase, crack.*

Obsah:

1 Úvod	10
2 Cíle práce	12
3 Základní pojmy lomové mechaniky	14
3.1 Lineárně-elastický popis napětí v okolí trhliny	14
3.2 Faktor intenzity napětí K	16
3.3 T-napětí	20
3.4 Kritéria určující směr šíření trhliny	20
3.4.1 Kritérium maximálního tangenciálního napětí	21
3.4.2 Kritérium minimální hodnoty faktoru hustoty deformační energie ...	22
3.5 Zobecněný faktor intenzity napětí H	24
3.5.1 Kritéria stability	26
3.5.1.1 Kritérium střední hodnoty napětí	26
3.5.1.2 S-kritérium minimální hustoty deformační energie (Sihovo kritérium) ..	28
4 Materiálové složení částicového kompozitu	29
4.1 Matrice kompozitního materiálu	29
4.2 Plnivo kompozitního materiálu	30
4.3 Mezivrstva	31
5 Postup řešení a dosažené výsledky	34
5.1 Částicové kompozity	34
5.1.1 Odhad tuhosti částicového kompozitu	35
5.1.1.1 Numerický model	35
5.1.1.2 Porovnání numerického modelu s analytickými vztahy	37
5.1.1.3 Stanovení vlivu mezivrstvy na globální chování kompozitu	38
5.1.1.4 Vliv tvaru částic na modul pružnosti kompozitu E_{comp}	40
5.1.1.5 Určení vlivu nerovnoměrnosti rozložení částic v kompozitu	42
5.1.2 Šíření mikrotrhlin v částicovém kompozitu	43
5.1.2.1 Numerický model	43
5.1.2.2 Vliv umístění mikrotrhliny v matici	44
5.1.2.3 Určení vlivu mezivrstvy na směr šíření mikrotrhlin v matici	45
5.1.2.4 Vymezení vlivu směru zatížení kompozitu na chování mikrotrhlin	48

5.1.2.5	Vliv tvaru částic na chování mikrotrhlin	50
5.1.2.6	Vliv imperfekce mezivrstvy	52
5.2	Chování trhliny v blízkosti rozhraní	55
5.2.1	Vícevrstvé trubky	56
5.2.2	V-vruby	57
6	Shrnutí výsledků a jejich diskuze	61
6.1	Makroúroveň: Celkový modul pružnosti kompozitu	62
6.2	Mikroúroveň: Interakce mikrotrhliny s částicemi a její vliv na zhouževnatění kompozitu	64
7	Závěr	69
8	Seznam použitého označení a zkratk	71
9	Literatura	73
9.1	Vlastní publikované práce	73
9.2	Použitá literatura	76
	Curriculum vitae	82

1 Úvod

V současné době mají projektanti či designéři k dispozici tisíce různých typů materiálů nabízených ve stovkách modifikací. V souvislosti s extrémními podmínkami provozu inženýrských konstrukcí se neustále zvyšují nároky na použité konstrukční materiály. V mnoha případech se pak jedná o vlastnosti, které kladou na strukturu materiálu podmínky, které si vzájemně odporují. Jednou z cest, jak vyhovět těmto požadavkům, je aplikace kompozitních materiálů. Vhodná kombinace různých materiálů a jejich geometrického uspořádání cíleně zvyšuje užitnou hodnotu výsledné struktury a umožňuje tak připravovat materiály blížíící se více požadavkům praxe.

Předmětem předkládané práce je numerické modelování částicových kompozitů. Samotný vývoj částicového kompozitu s konkrétními požadavky na materiálové vlastnosti je poměrně komplikovaný a nákladný. Proto by bylo určitě výhodné, kdybychom byli schopni kvalitativně správně odhadnout právě výsledné mechanické a materiálové vlastnosti kompozitu. V práci je uvedena celá řada modelových výpočtů, které tento cíl přibližují. Tyto výpočty jsou konkretizovány na specifický částicový kompozit, kdy je polymerní matrice plněna tuhými částicemi CaCO_3 . Získané výsledky mají však v celé řadě případů obecnější charakter a lze je využít i pro popis chování kompozitů s jiným složením.

Přidáním tuhých částic do poddajné polymerní matrice se obecně zvyšuje tuhost materiálu, což lze chápat pozitivně. Na druhé straně však díky tomu dochází k poklesu houževnatosti kompozitu a tato skutečnost se tak negativně odráží v jeho aplikačních možnostech. Cílem výzkumu v této oblasti by měla být taková geometrická a materiálová struktura uvažovaného kompozitu, která by vedla ke zvýšení houževnatosti a to při zachování jeho nezbytné tuhosti.

Jednou z možností, jak můžeme dosáhnout zvýšení houževnatosti částicového kompozitu, je vhodná volba velikosti částic. V literatuře, např. [90], se uvádí pro zhouževnatění matrice částicemi obvykle následující podmínky: (i) částice by měly mít malou velikost (menší než $5 \mu\text{m}$), (ii) tvar částic by měl být kulový (velikostní faktor, viz kap. 4.2, co nejbližší 1), (iii) pevnost rozhraní by měla být menší než pevnost matrice, tzn. mělo by docházet k dekohezi částice od matrice dříve, než dojde k plastizaci matrice, (iv) částice by měly být v matrici rozloženy homogenně, mělo by se předejít shlukování částic.

V řadě případů je rozhodující veličinou, která umožňuje realizovat změny vlastností částicového kompozitu, mezivrstva, která se nachází na rozhraní mezi matricí a částicí.

Během výroby částicového kompozitu se částice CaCO_3 smáčejí ve slabém roztoku kyseliny stearové [90], [67], [13]. Toto ošetření částic má

primárně za cíl zabránit tvorbě shluků částic při přípravě kompozitu. Na rozhraní částice a matrice však navíc dochází k fyzikálně-chemické reakci, která podporuje vznik a tvorbu mezivrstvy. Ta má odlišné materiálové vlastnosti jak od částice, tak od matrice. Lze konstatovat, že i přesto, že tato mezivrstva tvoří z hlediska objemového množství zanedbatelnou část, z hlediska finálních materiálových vlastností kompozitu (zejména pak z hlediska lomového chování) může mít zásadní vliv na jeho mikro a makrochování.

Výsledný kompozit je tedy modelován jako třífázové kontinuum (matrice, mezivrstva a částice) a v práci jsou zejména analyzovány a sledovány jevy související s existencí a vlastnostmi mezivrstvy, a to v závislosti zejména na tloušťce a materiálových parametrech mezivrstvy.

V souvislosti se šířením mikrotrhlin v částicovém kompozitu bylo rovněž sledováno chování trhliny v blízkosti rozhraní dvou materiálů. Výsledky rozšiřují oblast platnosti lineární lomové mechaniky na případ nehomogenních těles se skokovou změnou materiálových vlastností. Získané závěry byly použity zejména k lepší formulaci odhadu podmínek, za kterých dojde k šíření trhliny do mezivrstvy obklopující částici. Postupy byly rovněž aplikovány i na jiné problémy, které jsou charakterizovány singularitami netrhlínového typu s exponentem singularity různým od $\frac{1}{2}$. Příkladem jsou vícevrstvé trubky nebo iniciace trhliny z V-vrubu. Zejména byly numericky analyzovány vzorky vyrobené pro stanovení lomových charakteristik materiálů používaných pro vícevrstvé trubky. V rámci studia šíření trhlin byl také studován vliv volného povrchu na změnu rozdělení napětí a je odhadován vliv této změny na chování trhliny šířící se z vrcholu V-vrubu. Interakce V-vrubu s volným povrchem může u součástí o malých tloušťkách způsobit změnu charakteru rozdělení napětí a v neposlední řadě i změnu exponentu singularity napětí. Působení vrubů na chování konstrukcí je v dnešní době velmi intenzivně studováno z mnoha hledisek. Získané výsledky pak přispívají k odhadu vlivu vrubů na provozní životnost konstrukcí.

2 Cíle práce

Primárním cílem prováděného výzkumu je modelování procesů, které vedou ke zvýšení houževnatosti polyolefinové matrice přidáním submikroskopických částic CaCO_3 , a to při zachování její tuhosti. Speciálním cílem disertace je vytvoření a numerická realizace modelu popisující chování počáteční mikrotrhliny v matrici s ohledem na geometrické a materiálové vlastnosti částic a matrice s uvážením existence mezivrstvy. Jako jeden z hlavních mechanismů zhouževnatění jsou uvažovány procesy související s dekohezí matrice a částic plniva vyvolané interakcí mikrotrhlin a částic. Tento mechanismus je studován zejména s ohledem na existenci mezivrstvy mezi matricí a částicemi plniva. Konečným výsledkem práce jsou poznatky, které umožňují navrhnout sledovaný kompozit s ohledem na optimální relaci mezi zvýšením houževnatosti kompozitu na straně jedné a případným snížením jeho tuhosti na straně druhé.

Ke splnění tohoto cíle je v oblasti modelování nezbytné:

- (1) Vytvořit model částicového kompozitu popisující relaci mezi tuhostí a jeho mikrostrukturou a aspekty jeho zhouževnatění. Model bude vycházet z třífázového kontinua a zahrnovat geometrické a materiálové vlastnosti matrice, částic a mezivrstvy.
- (2) Navrhnout numerický postup založený na metodě konečných prvků, který umožňuje získat pomocí navrženého modelu parametry nezbytné pro popis lomově-mechanického chování studované struktury, zejména pak pro analýzu interakce mikrotrhliny šířící se v matrici s částicemi a to s ohledem na existenci mezivrstvy.
- (3) Na základě předloženého modelu popsat interakci mikrotrhliny a částice jako funkci materiálového složení a geometrického uspořádání kompozitu.
- (4) Kvantifikovat vliv zejména mezivrstvy (geometrie a materiálových vlastností) na směr šíření mikrotrhliny.
- (5) Navrhnout postup, který umožňuje popis mechanismu zhouževnatění kompozitu.

V oblasti výpočtů se jedná zejména o tyto kroky:

- (1) Navrhnout postup pro výpočet lomově-mechanických parametrů pro trhlinu v rámci lineárně-elastické lomové mechaniky pro nehomogenní tělesa, a to zejména v blízkosti rozhraní dvou různých materiálů se skokovou změnou materiálových vlastností.

- (2) Analyzovat chování trhliny v blízkosti materiálových a geometrických nehomogenit.
- (3) Zahrnout do výpočtů možnost lomově-mechanického popisu obecných singulárních koncentrátorů napětí souvisejících s existencí mezivrstvy.
- (4) Provést modelové výpočty na mikro a makroúrovni pro reálné geometrické a materiálové parametry jednotlivých složek kompozitu.

3 Základní pojmy lomové mechaniky

V následující kapitole jsou uvedeny a popsány základní pojmy lomové mechaniky, které jsou použity v této práci.

Klasická lomová mechanika předpokládá existenci počáteční trhliny v tělese (trhlina se může iniciovat z materiálového defektu, při výrobě, povrchové úpravě, přepravě tělesa nebo vzniká při samotném provozu součásti). Základní experimenty se provádí na různých vzorcích s trhlínami za rozdílných podmínek a sleduje se zejména odpor materiálu proti růstu trhliny (křehký lom, nestabilní lom houževnatého charakteru nebo stabilní růst trhliny při cyklickém zatěžování).

Lomová mechanika analyzuje souvislosti mezi provozními podmínkami a materiálem součásti s koncentrátorem napětí a může být využita k předcházení vzniku poruch mimo jiné již v průběhu etapy návrhu. Výsledky umožňují snížit pravděpodobnost lomového porušení součásti.

Historicky se lomová mechanika obvykle dělí na dvě hlavní oblasti. První je lineárně-elastická lomová mechanika (LELM), která uvažuje platnost Hookova zákona v celém objemu tělesa a je schopna popsat problém i při existenci malé plastické zóny u kořene trhliny. Druhou oblastí je elasto-plastická lomová mechanika (EPLM). Ta uvažuje existenci větších plastických oblastí v tělese s trhlínou.

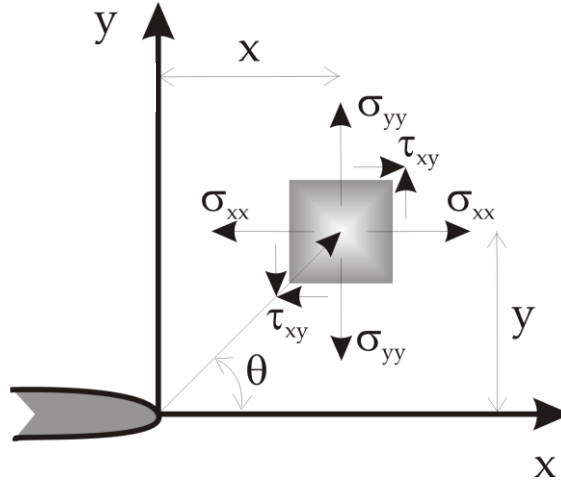
Zdálo by se, že oblast LELM je v dnešní době v podstatě uzavřená. S příchodem nových, zejména kompozitních materiálů, se objevila řada problémů souvisejících s materiálovými a geometrickými nehomogenitami, při jejichž řešení může hrát LELM velice důležitou roli. Vývoj nových materiálů založených na výsledcích lomově-mechanických návrhů konstrukcí zohledňující získané poznatky může hrát klíčovou roli při zvýšení bezpečnosti jejich provozu.

3.1 Lineárně-elastický popis napětí v okolí trhliny

Rozdělení napětí v okolí kořene trhliny lze za podmínek LELM odvodit ze základních rovnic klasické teorie pružnosti. Při odvození se vychází z předpokladu nulových objemových sil a dvojrozměrného kontinua. Obvykle se definuje lokální souřadný systém (kartézský nebo polární) s vrcholem v kořeni trhliny (obr. 3.1) a používá se metoda Airyho funkce napětí.

Pro dvourozměrné spojitě a lineárně-elastické těleso plyne z rovnice kompatibility a rovnic rovnováhy vztah:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = 0. \quad (1)$$



Obr. 3.1: Lokální souřadný systém umístěný v kořeni trhliny.

Existuje funkce $\Phi(x, y)$ [67], ze které mohou být určena napětí v tělese v následujícím tvaru [5], [69]:

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial y^2}, \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial x^2}, \tau_{xy} = \frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial x \partial y}. \quad (2)$$

Podmínky rovnováhy a kompatibility jsou automaticky dodrženy, když funkce $\Phi(x, y)$ splňuje následující biharmonickou rovnici (dosazením (2) do (1)):

$$\frac{\partial^4 \Phi(x, y)}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \Phi(x, y)}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \Phi(x, y)}{\partial y^4} = 0 \text{ nebo } \nabla^2 \nabla^2 \Phi(x, y) = 0. \quad (3)$$

Řešení této rovnice potom hledáme ve tvaru nekonečné řady:

$$\Phi(r, \theta) = \sum_k A_k r^{\lambda_k} f_k(\theta). \quad (4)$$

Po dosazení (4) do (3) a po aplikaci okrajových podmínek:

$$\sigma_{xy}(r, \pm\pi) = 0, \sigma_{yy}(r, \pm\pi) = 0, \quad (5)$$

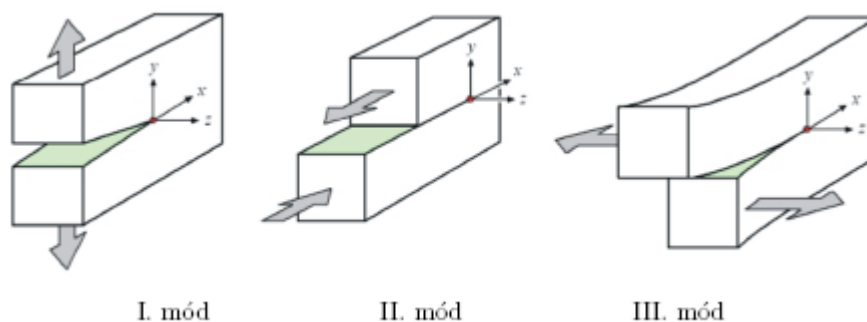
které představují volné povrchy (líce) trhliny, lze získat hodnoty vlastních čísel λ_k a výraz pro napětí má pak tvar označovaný jako Williamsův rozvoj [85], který se využívá pro popis rozdělení napětí v okolí kořene trhliny. V polárních souřadnicích (r, θ) jej pak můžeme vyjádřit následovně [1]:

$$\sigma_{ij} = \frac{A_1}{\sqrt{r}} f_{ij}^{(1)}(\theta) + A_2 f_{ij}^{(2)}(\theta) + A_3 \sqrt{r} f_{ij}^{(3)}(\theta) + \dots \quad (6)$$

Hodnoty koeficientů A_k lze stanovit numericky. Za předpokladu, že je chování trhliny ovlivňováno pouze malou oblastí v okolí jejího kořene, je možno zanedbat ty členy Williamsova rozvoje, ve kterých se vyskytuje souřadnice r v kladné mocnině (regulární členy). Zůstanou nám tedy pouze dva členy. První je singulární s typem singularity $1/r^{1/2}$ a jeho konstanta je úměrná faktoru intenzity napětí K_I . Druhý konstantní člen charakterizuje constraint a odpovídá T-napětí (viz kapitola 3.3).

3.2 Faktor intenzity napětí K

K popisu porušování tělesa s trhlinou používáme 3 základní módy (typy) namáhání závislé na orientaci zatěžovací síly (obr. 3.2).



Obr. 3.2: Základní módy zatěžování.

- I. mód (normálové namáhání) – aplikované napětí působí kolmo na líci trhliny
- II. mód (smykové namáhání) – aplikované napětí působí ve směru lomových ploch a kolmo na čelo trhliny
- III. mód (anti-rovinné namáhání) – smyk je rovnoběžný s čelem trhliny v rovině lomových ploch

V praxi se obvykle nevyskytují případy samostatných zatěžovacích módů, většinou jsou to jejich kombinace. Technicky významná je kombinace I. a II. módu.

K uvedeným módům se vztahuje důležitá charakteristika a tou je odpovídající faktor intenzity napětí K_I , K_{II} , K_{III} , který charakterizuje napjatost v tělese s trhlinou v okolí jejího vrcholu.

Rozdělení napětí před vrcholem trhliny lze pro jednotlivé módy vyjádřit následovně [1] (uvedeny pouze nenulové složky napětí):

$$\text{mód I:} \quad \sigma_{xx} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right], \quad (7a)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right], \quad (7b)$$

$$\tau_{xy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{3\theta}{2}\right), \quad (7c)$$

$$\sigma_{zz} = \begin{cases} 0 & \text{(rovinná napjatost)} \\ \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) & \text{(rovinná deformace)} \end{cases}, \quad (7d)$$

$$\text{mód II:} \quad \sigma_{xx} = -\frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[2 + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right], \quad (8a)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{3\theta}{2}\right), \quad (8b)$$

$$\tau_{xy} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right], \quad (8c)$$

$$\sigma_{zz} = \begin{cases} 0 & \text{(rovinná napjatost)} \\ \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) & \text{(rovinná deformace)} \end{cases}, \quad (8d)$$

$$\text{mód III:} \quad \tau_{xz} = -\frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (9a)$$

$$\tau_{yz} = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (9b)$$

Faktor intenzity napětí závisí na velikosti a způsobu aplikace vnějšího zatížení, na okrajových podmínkách a na geometrii tělesa a trhliny. Pro nekonečně velké těleso s centrální trhlinou délky $2a$ při normálovém namáhání σ lze vyjádřit faktor intenzity napětí K_I vztahem:

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi a}. \quad (10)$$

V případě těles s konečnou geometrií je nutné tento vztah korigovat pomocí korekční funkce Y :

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi a} \cdot Y(a/w_i), \quad (11)$$

kde w_i je charakteristický rozměr tělesa. Existuje mnoho publikací, kde lze najít korekční funkce pro zkušební tělesa a běžné geometrie těles, např. [48], [49], [50], [51], [52], [67].

Při výpočtu faktoru intenzity napětí je možné použít princip superpozice, protože je tento faktor v pružné oblasti závislý na napětí lineárně. V případě,

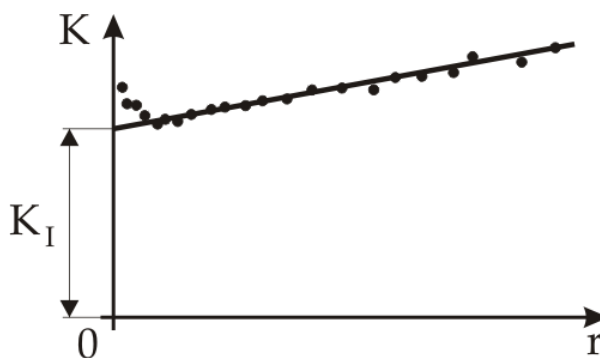
kdy na těleso s trhlinou působí systém sil $F^{(1)}, F^{(2)}, F^{(3)}, \dots, F^{(N)}$, můžeme použít vztah (analogicky i pro K_{II} a K_{III}):

$$K_I = K_I^{(1)} + K_I^{(2)} + K_I^{(3)} + \dots + K_I^{(N)}. \quad (12)$$

K určení faktoru intenzity napětí pro určitý tvar, velikost tělesa, typ, velikost trhliny a její polohu můžeme použít několik metod [30], [58]. Jako první, základní a nejstarší je uvedena analytická metoda. Její použitelnost je však omezena jen na několik těles. Druhou, v dnešní době zcela dominantní metodou, je určení faktoru intenzity napětí numericky, kde lze s výhodou použít např. metodu konečných prvků (MKP) [58].

Přímá metoda

Nejjednodušší používanou numerickou metodou je přímá metoda [1], [18], kde jsme schopni získat hodnotu faktoru intenzity napětí extrapolací porovnáním vypočtených hodnot napětí či posunutí před, respektive za čelem trhliny, s hodnotami plynoucími z Williamsova rozvoje (obr. 3.3).



Obr. 3.3: Určení faktoru intenzity napětí pomocí přímé metody (extrapolací).

To znamená, že například pro mód I vyjádříme rovnici (7b) pro $\theta = 0$ a dostaneme:

$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}, \quad (13)$$

ze které si pak snadno odvodíme vztah pro výpočet faktoru intenzity napětí K_I pro danou vzdálenost r od vrcholu trhliny:

$$K_I = \sigma_{yy} \cdot \sqrt{2\pi r}. \quad (14)$$

Vzhledem k numerickým chybám není tak určená hodnota K_I konstantní. Po zanesení takto vypočtených hodnot $\{K_I, r\}$ do grafu získáme odpovídající hodnotu faktoru intenzity napětí K_I extrapolací pro $r \rightarrow 0$ (obr. 3.3).

Jak bylo již uvedeno, tato metoda je velice jednoduchá a navíc univerzální, vyžaduje však kvalitní síť prvků především v blízkosti kořene trhliny. V určitých případech může tento fakt neúměrně prodlužovat výpočet

samotného faktoru intenzity napětí. Navíc výsledky mohou být ovlivněny subjektivním hlediskem výpočtáře.

Metoda posunutých uzlových bodů

I přes svou jednoduchost není přímá metoda kvůli náročnosti na kvalitní konečno-prvkovou síť vždy nejvhodnější. Proto se využívají i jiné metody, jako je zejména metoda posunutých uzlových bodů [20], [43]. Díky posunutí středních uzlových bodů do jedné čtvrtiny elementu lze modelovat singularitu napětí typu $1/r^{1/2}$. Rozdělení napětí v okolí kořene trhliny potom můžeme napsat ve tvaru:

$$\sigma_{ij} = \frac{C_{1ij}}{\sqrt{r}} + C_{2ij}, \quad (15)$$

kde konstanta C_{1ij} odpovídá faktoru intenzity napětí a C_{2ij} odpovídá T-napětí. Tato metoda je implementována ve většině běžně dostupných konečno-prvkových výpočetních systémech (např. ANSYS).

J-integrál

Často používaným postupem pro stanovení hodnot součinitele intenzity napětí je také metoda J-integrálu [66]. Numerický výpočet J-integrálu nepředstavuje při použití MKP žádný podstatnější problém. U izoparametrických prvků volíme křivku Γ tak, že prochází přes integrační body matice tuhosti elementů (předpokládáme Gaussovu metodu integrace). Vzhledem k nezávislosti J-integrálu na Γ volíme obvykle pro výpočet J-integrálu křivky, které jsou dostatečně vzdálené od kořene trhliny.

S cílem vyloučit numerické chyby vzniklé v důsledku velkého gradientu napětí se zpravidla výpočet provádí pro několik křivek a výsledek se určí jako střední hodnota vypočtených hodnot. Poznamenejme, že obvykle se výpočet J-integrálu programuje jako funkce postprocesoru.

Metoda speciálních hybridních prvků

Další možností je využít speciální prvky v kořeni trhliny, obecně známé jako hybridní trhlinové prvky. Jejich aplikace byla popsána v roce 1995 Kunou [33]. Tato metoda využívá k určení hodnoty faktoru intenzity napětí hybridní trhlinové prvky formulované na základě Hellingerova-Reissnerova principu v práci [59], [82]. Posunutí a napětí uvnitř hybridního prvku jsou popsány pomocí více členů nekonečného Williamsova rozvoje. První člen odpovídá faktoru intenzity napětí a druhý člen je úměrný T-napětí. Tato metoda je výhodná z hlediska přípravy vstupních dat, protože má malé požadavky na síť konečných prvků a zároveň je její přesnost velice dobrá. Naopak jistou nevýhodou je poměrně náročná implementace do standardních programových systémů [34].

3.3 T-napětí

Jak bylo napsáno výše, druhý konstantní člen Williamsova rozvoje popisuje T-napětí. T-napětí charakterizuje constraint (stísnění) [39] před čelem trhliny. Míra constraintu je závislá na geometrii tělesa a způsobu zatěžování. Jeho příčinou je triaxialita napětí v okolí kořene trhliny a jeho úroveň ovlivňuje velikost plastické zóny v okolí vrcholu trhliny.

T-napětí se začalo používat teprve nedávno (během osmdesátých let) a slouží především k přesnějšímu popisu křehko-lomového a únavového chování tělesa s trhlinou.

T-napětí se vyskytuje v normálovém a anti-rovinném smykovém módu zatěžování a má vliv pouze na složky napětí σ_{xx}, τ_{yz} . Může nabývat kladných i záporných hodnot a závisí na aplikovaném zatížení, na okrajových podmínkách a geometrii tělesa. V roce 1981 zavedli Leever a Radon [40] normalizovanou hodnotu T-napětí. Tou je bezrozměrný faktor biaxiality:

$$B = \frac{T\sqrt{\pi a}}{K_I}, \quad (16)$$

kterým kvantifikovali úroveň constraintu před čelem trhliny.

3.4 Kritéria určující směr šíření trhliny

Určení předpokládaného směru šíření trhliny v materiálu zatíženého kombinovaným namáháním módu I a II je důležitým krokem pro spolehlivý odhad životnosti součástí s trhlínami. Obecně se trhlina šíří takovým směrem, ve kterém klesá hodnota K_{II} k nule. V literatuře můžeme najít celou řadu kritérií pro určení předpokládaného směru šíření trhliny v případě tělesa zatíženého kombinovaným namáháním. Tato kritéria lze obecně rozdělit do dvou kategorií:

- kritéria, která pokládají napětí nebo deformace za řídicí veličinu šíření trhliny
 - kritérium maximálního tangenciálního napětí (MTS - maximum tangential stress criterion) [11], [15]
 - kritérium využívající faktor tangenciálního napětí a tangenciální deformace (tangential stress factor and tangential strain factor) [87]
 - kritérium maximální tangenciální deformace (maximum tangential strain criterion) [20]

- kritéria, která jsou založená na energetické bázi
 - kritérium minimální hodnoty faktoru hustoty deformační energie (minimum strain energy density criterion) [27], [71], [73]
 - kritérium maximální hustoty objemové deformace (dilatational strain energy density criterion) [81]

Obecně jsou výsledky získané na základě uvedených kritérií shodné v případě, kdy je dominantní mód I. Přehled používaných kritérií pro stanovení směru šíření trhliny lze nalézt např. v [63]. V dalším jsou rozvedeny podrobněji první a čtvrté uvedené kritérium, která jsou využita při řešení sledované problematiky.

3.4.1 Kritérium maximálního tangenciálního napětí [11], [15]

Běžně v literatuře je toto kritérium označováno jako MTS kritérium. Je jedno z nejpoužívanějších kritérií a to zejména pro jeho jednoduchost. Jeho platnost byla doložena řadou experimentů [63].

Toto kritérium nám říká, že se trhlina bude šířit v radiálním směru $\theta = \varphi_0$, ve kterém je hodnota odpovídající složky tangenciálního napětí $\sigma_{\theta\theta}$ maximální, tzn. φ_0 musí splňovat následnou nutnou a postačující podmínku:

$$\left(\frac{\partial\sigma_{\theta\theta}}{\partial\theta}\right)_{\theta=\varphi_0} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2\sigma_{\theta\theta}}{\partial\theta^2}\right)_{\theta=\varphi_0} < 0. \quad (17)$$

Pro kombinovaný mód I a II můžeme vyjádřit tangenciální složku napětí $\sigma_{\theta\theta}$:

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \left(\frac{3}{4} \cos \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4} \cos \frac{3\theta}{2} \right) - \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \left(\frac{3}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right). \quad (18)$$

Pak bude mít nutná podmínka pro existenci extrému $\sigma_{\theta\theta}$ tvar [70]:

$$\left(\frac{\partial\sigma_{\theta\theta}}{\partial\theta}\right)_{\theta=\varphi_0} = K_I \sin \varphi_0 - K_{II} (3 \cos \varphi_0 - 1) = 0. \quad (19)$$

Pro stanovení směru šíření trhliny pak dostaneme rovnici:

$$\varphi_0 = \arccos \left(\frac{3K_{II}^2 + K_I \sqrt{K_I^2 + 8K_{II}^2}}{K_I^2 + 9K_{II}^2} \right). \quad (20)$$

Při uvažování dvouparametrové lomové mechaniky vstoupí do rovnic (18) a (19) T-napětí:

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \left(\frac{3}{4} \cos \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4} \cos \frac{3\theta}{2} \right) - \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \left(\frac{3}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right) + T \sin^2 \theta, \quad (21)$$

$$\left(\frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} \right)_{\theta=\varphi_0} = K_I \sin \varphi_0 - K_{II} (3 \cos \varphi_0 - 1) + \frac{16}{3} T \sin \frac{\varphi_0}{2} \cos \varphi_0 \sqrt{2\pi r} = 0. \quad (22)$$

Na rozdíl od jednoparametrové lomové mechaniky, v rámci dvouparametrové modifikace kritéria jsou veličiny určující směr šíření trhliny závislé na vzdálenosti od kořene trhliny r_0 , ve které dané kritérium aplikujeme, a platí:

$$\varphi_0 = \varphi_0(K_I, K_{II}, T, r_0). \quad (23)$$

Pokud zvolíme $r_0 = r_p$, např. [70], kde r_p je poloměr plastické zóny, a dosadíme $r_p = r_p(K_I, K_{II}, T, \sigma_0, \varphi = 0)$ do (22), dostaneme za předpokladu splnění nerovnosti $\left(\frac{\partial^2 \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta^2} \right) < 0$ směr šíření trhliny jako funkci:

$$\varphi_0 = \varphi_0\left(K_I, K_{II}, \frac{T}{\sigma_0}\right). \quad (24)$$

Směr šíření trhliny je tedy popsán hodnotami normálového a smykového součinitele intenzity napětí a poměrem hodnot T-napětí a meze kluzu σ_0 . Obecně lze říci, že v případě MTS kritéria v důsledku existence T-napětí dochází ke změně směru šíření trhliny ve srovnání s odhady založenými na jednoparametrovém popisu:

- i) záporné T-napětí přispívá ke stabilnějšímu směru růstu trhliny (snižuje se absolutní hodnota úhlu odklonu směru šíření vůči případu, kdy se T-napětí nebere v úvahu),
- ii) kladné T-napětí přispívá k aktivnější změně předpokládaného růstu, čímž přispívá k rychlejší změně poměru zatěžovacích módů, a to tak, že poměr $K_{II}/K_I \rightarrow 0$ (čili rychleji eliminuje mód II).

Volba veličiny r_0 je stále předmětem diskuze. Nejčastěji se volí velikost procesní nebo plastické zóny [70].

3.4.2 Kritérium minimální hodnoty faktoru hustoty deformační energie [9], [27], [73]

Podle tohoto kritéria navrženého Sihem, např. [73], se trhlina bude šířit ve směru φ_0 identickém se směrem minima faktoru hustoty deformační energie S .

Směr šíření trhliny závisí na rozložení energie v tělese a na vlastnostech materiálu před čelem trhliny [37]. Pro přesnější popis chování v zatíženém tělese je nezbytná objektivní predikce směru šíření trhliny. Koncepce faktoru hustoty deformační energie S byla vypracována Sihem pro trhliny v homogenním prostředí [72], [74], [75], pomocí níž můžeme předpovědět iniciaci a směr růstu trhliny.

Hustota deformační energie w je dána výrazem:

$$w = \int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = \frac{1}{r} S, \quad (25)$$

kde σ_{ij} a ε_{ij} jsou odpovídající složky napětí a přetvoření a S je Sihův faktor hustoty deformační energie. Ten má následující tvar:

$$S = a_{11} K_I^2 + 2a_{12} K_I K_{II} + a_{22} K_{II}^2, \quad (26)$$

$$\text{kde } a_{11} = \frac{1}{16\mu\pi} [(3 - 4\nu - \cos\theta)(1 + \cos\theta)], \quad (27)$$

$$a_{12} = \frac{1}{16\mu\pi} 2 \sin\theta [\cos\theta - (1 - 2\nu)],$$

$$a_{22} = \frac{1}{16\mu\pi} [4(1 - \nu)(1 - \cos\theta)(1 + \cos\theta)(3 \cos\theta - 1)].$$

Sih určil následující dva předpoklady:

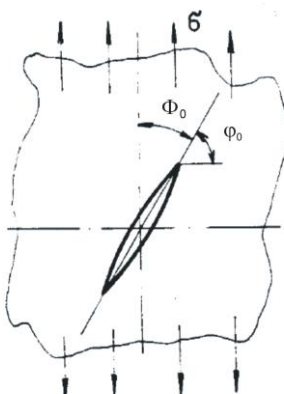
- trhlina se bude šířit ve směru minimální hustoty deformační energie, který je určen podmínkami:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_{\theta=\varphi_0} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 S}{\partial \theta^2} \right)_{\theta=\varphi_0} > 0, \quad (28)$$

- pro okamžik nestabilního růstu je rozhodující kritická intenzita S_c v určeném směru:

$$S_{c,\min} = \text{konst} = S(K_I, K_{II}) \text{ pro } \theta = \varphi_0. \quad (29)$$

Jako ilustraci uveďme pro kombinaci módu I a II taženou stěnu s trhlinou [84] (obr. 3.4).



Obr. 3.4: Tažená stěna s trhlinou [72].

Faktor intenzity napětí pak můžeme zapsat ve tvaru:

$$\begin{aligned} K_I &= \sigma\sqrt{\pi a} \sin^2 \Phi_0, \\ K_{II} &= \sigma\sqrt{\pi a} \sin \Phi_0 \cos \Phi_0. \end{aligned} \quad (30)$$

A následně k výpočtu směru dalšího šíření trhliny můžeme vyjádřit rovnici ve tvaru:

$$2(1-2\nu)\sin(\varphi_0 - 2\Phi_0) - 2\sin[2(\varphi_0 - \Phi_0)] - \sin 2\varphi_0 = 0 \quad \text{pro } \Phi_0 \neq 0. \quad (31)$$

Rovnice (31) nemá analytické řešení a proto musí být řešena numericky.

Pokud budeme uvažovat dvouparametrovou lomovou mechaniku, vstoupí do výpočtů opět T-napětí. Sihův faktor hustoty deformační energie má pak následující tvar, např. [77]:

$$S = a_{11}K_I^2 + 2a_{12}K_I K_{II} + a_{22}K_{II}^2 + b_1 K_I T\sqrt{r} - b_2 K_{II} T\sqrt{r} + b_3 r T^2, \quad (32)$$

$$\text{kde } a_{11}(\theta) = [(1 + \cos \theta)(\kappa - \cos \theta)]/16\mu\pi, \quad (33)$$

$$a_{22}(\theta) = [(\kappa + 1)(1 - \cos \theta) + (1 + \cos \theta)(3 \cos \theta - 1)]/16\mu\pi,$$

$$a_{12}(\theta) = \sin \theta (2 \cos \theta - \kappa + 1)/16\mu\pi,$$

$$b_1(\theta) = \cos \frac{\theta}{2} [(\kappa - 2) - \cos \theta + 2 \cos^2 \theta]/4\mu\sqrt{2\pi},$$

$$b_2(\theta) = \sin \frac{\theta}{2} [\kappa + \cos \theta + 2 \cos^2 \theta]/4\mu\sqrt{2\pi},$$

$$b_3 = \frac{(1 + \kappa)}{16\mu},$$

$$\kappa = \begin{cases} 3 - 4\nu & \text{pro rovinnou deformaci} \\ (3 - 4\nu)/(1 + \nu) & \text{pro rovinnou napjatost} \end{cases}.$$

Směr šíření φ_0 určený pomocí (32) a (33) opět závisí na volitelném parametru r_0 :

$$\varphi_0 = \varphi_0(K_I, K_{II}, T, r_0, \nu). \quad (34)$$

Poznamenejme, že obdobně jako u MTS kritéria v rámci dvouparametrového studia, analytické řešení rovnice vede na rovnici pátého řádu, proto opět použijeme numerické řešení.

3.5 Zobecněný faktor intenzity napětí H [55]

Jednou z podmínek při použití koncepce faktoru intenzity napětí je fakt, že hodnota exponentu singularity musí být rovna $1/2$. Existuje však celá řada

koncentrátorů napětí, které právě tuto podmínku nesplňují. Je to například trhlina na rozhraní dvou materiálů [55], [79], [80] nebo ostrý V-vrub [32].

Vliv vrubů na chování konstrukcí je v dnešní době velmi intenzivně studován z mnoha hledisek. Významná je zejména iniciace poruch typu trhlina v blízkosti vrcholu vrubu. Specifickým typem vrubů jsou vruby vyvolávající ve svém okolí singulární rozdělení napětí. Typickým příkladem takového vrubu je V-vrub s ostrým vrcholem, který představuje obecný singulární koncentrátor napětí s proměnným exponentem singularity. Předpokládáme-li, že velikost plastické zóny před čelem V-vrubu je malá („small scale yielding“), lze opět pro další řešení použít lineárně-elastickou lomovou mechaniku. V rámci LELM (u trhlin platí $p = 1/2$) jsou nejpoužívanějšími parametry faktor intenzity napětí K [1] nebo hnací síla trhliny G [1], [20]. Pro singularitu jinou než $1/2$, např. [53], je třeba použít parametry, jako je např. zobecněný faktor intenzity napětí H [55].

Singulární rozdělení napětí před vrcholem V-vrubu lze vyjádřit na základě řešení Airyho funkce napětí a aplikace okrajových podmínek ve tvaru [31]:

$$\sigma_{ij}^I = \frac{H_I}{\sqrt{2\pi r^{p_I}}} \cdot f_{ij}^I(p_I, \varphi), \quad \sigma_{ij}^{II} = \frac{H_{II}}{\sqrt{2\pi r^{p_{II}}}} \cdot f_{ij}^{II}(p_{II}, \varphi), \quad (35)$$

kde (r, φ) jsou polární souřadnice s počátkem ve vrcholu V-vrubu, H je zobecněný součinitel napětí, p je exponent singularity napětí a $f_{ij}(p, \varphi)$ jsou známé funkce.

Pro jednoduchost se v dalším omezíme na normálový zatěžovací mód I a index I nebudeme (s výjimkou hodnot lomové houževnatosti) uvádět. Výrazy pro rozdělení napětí v okolí vrcholu V-vrubu mají tvar:

$$\sigma_{rr} = \frac{H}{\sqrt{2\pi}} r^{-p} \left[(2-p-p^2) \cos(p\varphi) - q(2-3p+p^2) \cos((2-p)\varphi) \right], \quad (36)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{H}{\sqrt{2\pi}} r^{-p} \left[(2-3p+p^2) \cos(p\varphi) + q(2-3p+p^2) \cos((2-p)\varphi) \right], \quad (37)$$

$$\sigma_{r\varphi} = \frac{H}{\sqrt{2\pi}} r^{-p} \left[p(1-p) \sin(p\varphi) + q(2-3p+p^2) \sin((2-p)\varphi) \right], \quad (38)$$

kde $q = \cos(p(\pi - \alpha_v)) / (\cos(2-p)(\pi - \alpha_v))$. Pro V-vrub v homogenním izotropním materiálu je exponent singularity $0 < p < 0,5$ závislý pouze na úhlu otevření vrubu $2\alpha_v$ a lze jej určit z řešení rovnice:

$$\sin[2(1-p)(\pi - \alpha_v)] + (1-p) \sin[2(\pi - \alpha_v)] = 0. \quad (39)$$

3.5.1 Kritéria stability

Lomová mechanika vychází při analýze chování těles s trhlinami z předpokladu, že pro chování trhliny je rozhodující rozdělení napětí v oblasti blízko okolí jejího vrcholu. V rámci jednoparametrové lineárně-elastické lomové mechaniky je v této oblasti napětí dostatečně přesně popsáno a pro zadané okrajové podmínky (geometrie, zatěžování) je jednoznačně dáno hodnotami faktorů intenzity napětí K_I , K_{II} a K_{III} . Srovnáním těchto parametrů s jejich kritickými hodnotami (které jsou brány jako materiálové konstanty – např. lomová houževnatost K_{IC}) lze pak stanovit podmínky stability (lomová kritéria) pro trhlínu. V-vrub však představuje obecný singulární koncentrátor napětí, jehož exponent singularity je odlišný od $\frac{1}{2}$. Proto je zde potřeba vyjádřit lomová kritéria odlišná od klasických, která jsou běžně používána pro tělesa s trhlinami.

Postup použitý pro formulaci kritéria stability vychází ze srovnání lomově-mechanických veličin L s jasně definovaným fyzikálním významem (např. střední hodnota napětí, velikost plastické zóny, hustota deformační energie atd.) odvozené jak pro faktor intenzity napětí K (v případě trhliny v homogenním materiálu), tak pro zobecněný faktor intenzity napětí H (pro V-vrub) [35]. Za předpokladu stejného mechanismu porušování lze předpokládat, že kritické hodnoty veličiny L_C budou stejné v obou případech, tj.

$$L_{IC}(\dots, K_{IC}, r, \varphi, E, \nu, \dots) = L_C(\dots, H_{IC}, r, \varphi, E, \nu, \alpha_V, \dots). \quad (40)$$

Tato podmínka nám umožní definovat kritickou hodnotu zobecněného faktoru intenzity napětí H_{IC} , kterou můžeme nazvat zobecněná (vrubová) lomová houževnatost, ve tvaru:

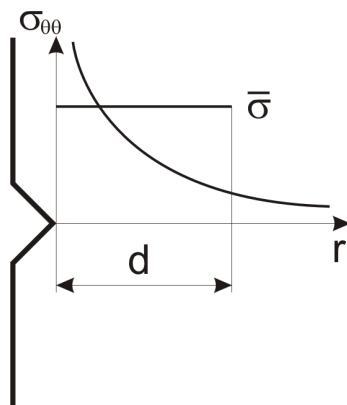
$$H_{IC} = H_{IC}(K_{IC}, \dots). \quad (41)$$

Podstatnou skutečností tohoto postupu je fakt, že zobecněná (vrubová) lomová houževnatost H_{IC} je pro dané podmínky určena velikostí lomové houževnatosti určené pro trhlínu. Můžeme tedy využít celé řady doposud existujících výsledků a nemusíme provádět další nová, často náročná a nákladná, měření.

3.5.1.1 Kritérium střední hodnoty napětí

Střední hodnota normálové složky napětí určená v blízké oblasti před vrcholem V-vrubu ve směru šíření iniciované trhliny je jednou z veličin vhodných k návrhu kritéria stability V-vrubu [36]. V tomto případě je

$$L = \bar{\sigma} = \bar{\sigma}_{\varphi\varphi}. \quad (42)$$



Obr. 3.5: Střední hodnota napětí v oblasti d před kořenem V-vrubu.

Při návrhu kritéria vycházíme z rozložení napětí před kořenem V-vrubu. Střední hodnota napětí $\bar{\sigma}$ je určována ve směru maximálního normálového napětí $(\sigma_{\varphi\varphi})_{\max}$ ve vzdálenosti 0 až d před vrcholem V-vrubu a je srovnána s kritickým napětím σ_{crit} vedoucím k iniciaci trhliny ve vrcholu V-vrubu. Kritérium stability má pak tvar:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{d} \int_0^d (\sigma_{\varphi\varphi})_{\max} dr < \sigma_{crit}. \quad (43)$$

Při aplikaci podmínky stability $\bar{\sigma} = \sigma_{crit}$ na trhlinu dostaneme veličinu σ_{crit} ve tvaru:

$$\sigma_{crit} = \frac{2K_{IC}}{\sqrt{2\pi d}}. \quad (44)$$

Pro V-vrub dostaneme veličinu σ_{crit} ve tvaru:

$$\sigma_{crit} = \frac{2H_{IC}}{\sqrt{2\pi}} \frac{(2-p)(1+q)}{d^p}, \quad (45)$$

kde H_{IC} je kritická hodnota zobecněného (vrubového) součinitele intenzity napětí, p je exponent singularity napětí a q je parametr závislý na úhlu otevření V-vrubu.

Finální vztah má pak tvar:

$$H_{IC} = K_{IC} \frac{2d^{p-\frac{1}{2}}}{(2-p)(1+q)}. \quad (46)$$

Kritérium stability V-vrubu pro statické zatěžování má pak formálně stejný tvar jako K_{IC} kritérium:

$$H(\sigma_{appl}, \alpha) < H_{IC}(K_{IC}, \alpha_V), \quad (47)$$

kde α_V je úhel otevření V-vrubu.

3.5.1.2 S-kritérium minimální hustoty deformační energie (Sihovo kritérium)

I zde vycházíme z podobnosti chování trhlin a V-vrubů. Tentokrát zvolíme jako řídicí veličinu hodnotu (zobecněného) faktoru hustoty deformační energie [76]:

$$L = \Sigma. \quad (48)$$

V případě zatěžovacího módu I bude minimum faktoru hustoty deformační energie ve směru $\varphi = 0$, což odpovídá směru šíření předpokládané trhliny.

Pro trhlínu, resp. V-vrub zatížené normálovým módem lze vyjádřit faktor hustoty deformační energie S resp. Σ ve tvaru:

$$S = a_{11}K^2, \text{ resp. } \Sigma = A_{11}H^2, \quad (49)$$

kde a_{11} je funkcí polárního úhlu a nezávisí na souřadnici r . Veličina A_{11} je na souřadnici r závislá.

Rovnost kritických hodnot faktorů hustoty deformační energie má pak tvar (hodnotu A_{11} určíme pro $r = d$):

$$a_{11}K_{IC}^2 = A_{11}H_{IC}^2, \quad (50)$$

$$\text{kde } a_{11} = \frac{(2k_n + 1 - \cos \varphi)(1 + \cos \varphi)}{16\pi\mu}, \quad (51)$$

$$A_{11} = \frac{(k_n U_I + V_I)}{16\pi\mu} d^{1-2p},$$

$$\text{a } k_n = 1 - 2\nu \text{ pro rovinnou deformaci,} \quad (52)$$

$$U_I = 16(1-p)^2 \cos^2(p\varphi),$$

$$V_I = 4 \left[p^2(1-p)^2 + q^2(2-3p+p^2)^2 - 2pq(1-p)(2-3p+p^2) \cos 2\varphi \right].$$

Po odvození v případě statického zatěžování porovnáním součinitelů hustoty deformační energie při kritické podmínce dostaneme vztah:

$$H_{IC} = K_{IC} d^{\frac{p-1}{2}} \sqrt{\frac{4k_n}{k_n U_I(\varphi=0) + V_I(\varphi=0)}}. \quad (53)$$

Konečné kritérium stability V-vrubu vyjádřené pomocí hustoty deformační energie lze opět vyjádřit ve tvaru nerovnice:

$$H(\sigma_{appl}, \alpha_V) < H_{IC}(K_{IC}, \alpha_V). \quad (54)$$

V obou případech je nutno závislost $H_I = H_I(\sigma_{appl}, \alpha_V)$ určit numericky (např. pomocí MKP) pro dané okrajové podmínky a zatížení. Hodnota zobecněné lomové houževnatosti je v obou případech funkcí parametru d , viz vztahy (46), (53).

4 Materiálové složení částicového kompozitu

Polypropylen jako materiál na výrobu nejrůznějších produktů je již používán dlouhou dobu. Přidáním částic do matrice tvořené polypropylenem můžeme získat kompozit s výrazně odlišnými materiálovými vlastnostmi. Nejprve byly používány jako plnivo elastomerní částice (EPR, EPDM, ...). Použitím těchto plniv jsme schopni dosáhnout nárůstu houževnatosti kompozitu, dochází ovšem ke snížení pevnostních charakteristik. Oproti tomu použití minerálních plniv nabízí jistou možnost ke zlepšení kompozitu z hlediska pevnostního při zachování dostatečné houževnatosti, záleží to ovšem zejména na velikosti částic a na vlastnostech mezivrstvy mezi maticí a částicí.

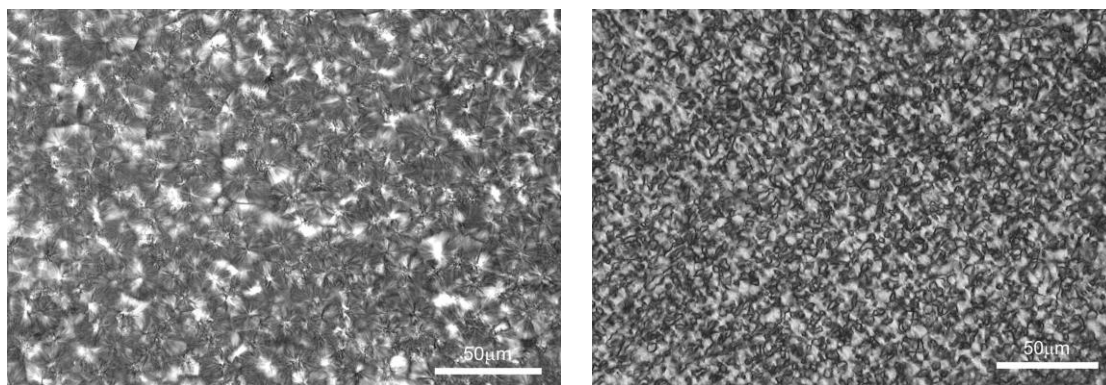
4.1 Matrice kompozitního materiálu

Typ, složení a vlastnosti matrice hrají klíčovou roli při vzniku konečného kompozitu. Tato práce je zaměřena především na polymerní polypropylenové kompozity. Vlastnostmi polypropylenu jako maticího materiálu se zabývalo mnoho autorů. Mezi prvními, kteří studovali polypropylen, byli Karl Ziegler a Giulio Natta. Z jejich výsledků se vychází dodnes [25], [62].

Polypropylen je polymorfní materiál. Krystalizuje v několika modifikacích. Nejběžnější je monoklinická α -fáze. Ke vzniku triklinické β -fáze můžeme využít specifických nukleačních činidel (obr. 4.1). Experimentální porovnání α - a β -fáze bylo provedeno řadou autorů [4], [38]. Ukazuje se, že využití polypropylenu s vyšším obsahem β -fáze může pozitivně ovlivnit mechanické vlastnosti výsledného kompozitu [4], [57].

K dosažení co nejlepších mechanických vlastností je také potřeba dosáhnout co možná nejvyššího stupně krystalinity při zachování jemnozrné struktury. K tomu mohou být použity práškové anorganické látky, tzv. nukleační přísady [57]. Ve skutečnosti však nedochází k úplné krystalizaci a struktura polymeru je semikrystalická [47]. Míru krystalinity lze určit řadou metod, např. mikroskopií, spektroskopií či rentgenografií.

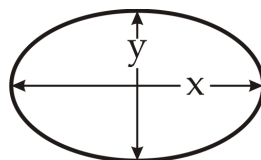
Do matrice se může přidávat celá řada minerálních plniv. V současnosti je na trhu velké množství typů plniv, které se liší typem, velikostí, tvarem atd. V minulosti bylo primárním cílem zejména snížit výrobní náklady polymeru, a proto drahá matrice byla plněna levnými částicemi. Protože se kompozity začínají používat pro aplikace, kde je nutné garantovat mechanické vlastnosti, začal se zároveň sledovat také vliv těchto částic na materiálové vlastnosti vzniklého kompozitu. Existuje mnoho odborné literatury s podrobným popisem vlastností jednotlivých typů plniv [6], [67], [88].




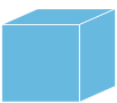



Obr. 4.1: Morfologie polypropylenové matrice [xxiv].
(vlevo - čistá matrice, vpravo - matrice ošetřená β -nukleačním činidlem)

4.2 Plnivo kompozitního materiálu

Obecně se v praxi používají různé tvary od kulových částic přes destičkové až po vláknové. Ke snadnějšímu popisu tvaru částic byla zavedena veličina „aspect ratio“ (tzv. velikostní faktor) (tab. 4.1). Ten vyjadřuje poměr největšího rozměru částice k nejmenšímu (obr. 4.2). Částice s velkým tvarovým faktorem většinou výrazně zlepšují vlastnosti v konkrétní směru (tuhost, pevnost v tahu), částice s malým tvarovým faktorem ovlivňují kompozit ve všech směrech (modul pružnosti či houževnatost).



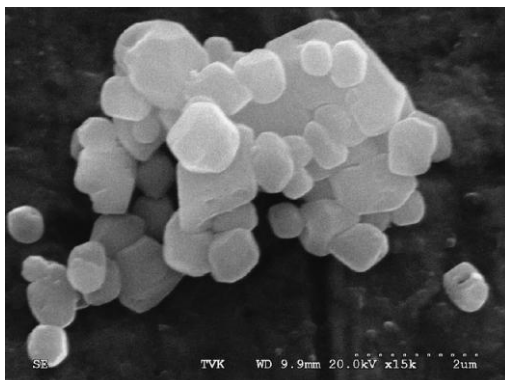
Obr. 4.2: Veličina „aspect ratio“ (tzv. velikostní faktor) - poměr x/y .

	koule	krychle	kvádry	destičky	vlákna
Tvar					
Velikostní faktor (aspect ratio)	1	~1	1,4-4	5-100	>100

Tab. 4.1: Tvary používaných plniv [83].

Nejen tvarem, ale pochopitelně i velikostí částic ovlivňujeme výsledné chování kompozitu [10]. Velikost částic je předmětem studia mnoha autorů, škála rozměrů je opravdu široká. V současnosti se v částicových kompozitech používají také nanočástice [9], [41], [42], [86] a to i přes problémy s přípravou

a zejména s dispergací částic v matrici [24], [43], [67]. Většinou se ale v praxi vyskytují kompozity s velikostí plniva v rozmezí 0,1 μm až 10 μm , výjimečně desítky μm [14], [64] (tab. 4.2). V krajním případě se používají plniva o velikosti až 1 mm. Určování relace mezi velikostí částic a mechanickými vlastnostmi kompozitu můžeme nalézt v mnoha publikacích, např. [46], [60], [89], [90].



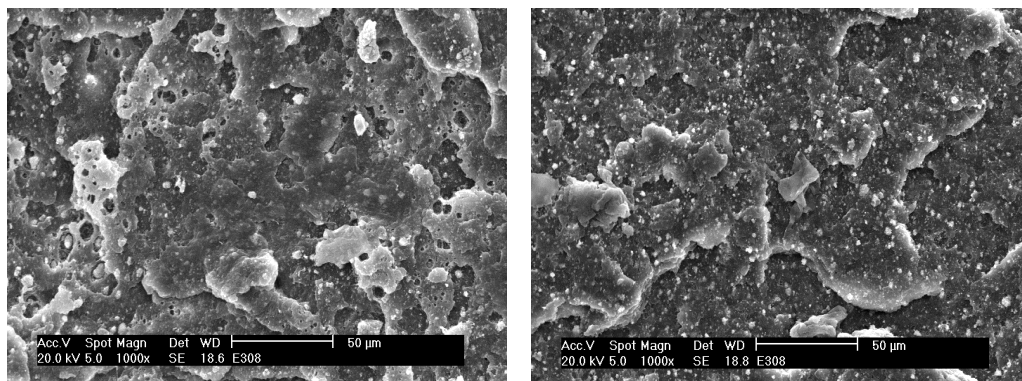
Obr. 4.3: Typický tvar částic CaCO_3 [29].

obchodní název	zkratka	výrobce	velikost částic [μm]
Calcilit 100	C100	Sloha Kalcit	120
Millicarb	M	Omya	3,6
Omyacarb 2 GU	2GU	Omya	2,5
Polcarb	P	ECC (Imerys)	1,3

Tab. 4.2: Typy a velikosti používaných plniv [45].

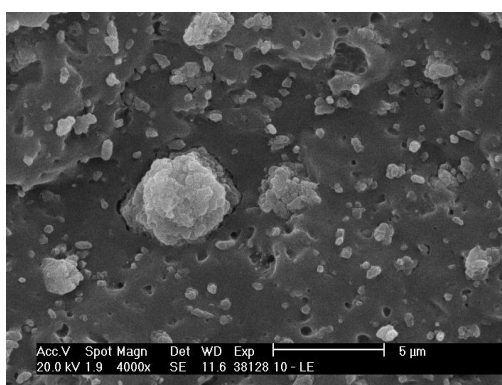
4.3 Mezivrstva

Jak bylo zmíněno výše, velkým problémem při tvorbě kompozitu je zajistit dostatečnou dispergaci částic. Často se stává, že při zpracování dochází v matrici ke shlukování částic plniva (obr. 4.4). Tyto shluky můžeme rozdělit na dvě kategorie: (i) aglomeráty, shluky se slabými vazbami a (ii) agregáty (obr. 4.5), které jsou naopak velice pevné. Při jednotlivých zkouškách pak dochází k rozpadu aglomerátů na agregáty, které se chovají jako částice plniva mnohem větší velikosti. Z tohoto důvodu dochází k degradaci materiálových vlastností zkoumaného kompozitu a tím k nepřesnostem naměřených veličin (modul pružnosti, pevnost v tahu, ...) [29]. K řádné dispergaci částic můžeme přispět vhodnou úpravou částic plniva [8], [45]. Před samotným smícháním s matricí se částice CaCO_3 smáčí ve slabém roztoku kyseliny stearové a to příznivě působí právě na dispergaci částic v matrici.



Obr. 4.4: Lomová plocha polypropylenové matrice s částicemi. SEM, celkové zvětšení 1000× [xv].

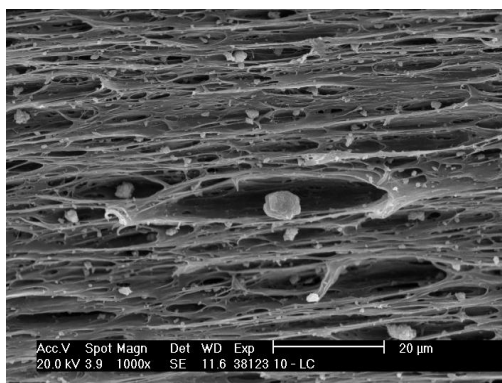
(vlevo - bez ošetření částic, vpravo - částice ošetřená 1% kyselinou stearovou)



Obr. 4.5: Agregát částic CaCO_3 . SEM, celkové zvětšení 4000× [83].

Z numerického hlediska není tvar a velikost částic příliš studován, ve většině případů se při modelování kompozitu uvažuje pouze kulový tvar částic.

Povrchovou úpravou můžeme ovšem ovlivnit také chemické vazby na rozhraní částice – matrice. Zde se vyskytují dva přístupy: (i) snažíme se vytvořit co nejpevnější vazbu mezi částicemi a maticí [23], (ii) nebo naopak oslabíme tuto vazbu a způsobíme tak snazší proces odtržení částice od matrice [28] (obr. 4.6).



Obr. 4.6: Mechanismus poškozování kompozitu - odtržení mezivrstvy [83].

Vlivem povrchových úprav částic plniva se zabývá celá řada autorů, např. [45], [60], [61]. Na rozhraní částice-matrice vzniká mezivrstva, která může svými

vlastnostmi výrazně ovlivnit materiálové vlastnosti kompozitu. Problematické je ovšem především určit vlastnosti mezivrstvy. Někteří autoři se snaží určit vlastnosti mezivrstvy pro různé velikosti částic [45], [60], jiní ji určují pro různé typy materiálů [45], [61]. Rozhodující je také fakt, jestli se jedná o částice ošetřené povrchovou úpravou či nikoliv [45].

Samotné určování mechanických vlastností mezivrstvy je problematické. Určovat je přímo je takřka neřešitelný problém, proto se určují nepřímo ze spolehlivě měřitelných veličin. Těmi jsou například mez kluzu a mez pevnosti. Detailnější popis určení tloušťky mezivrstvy je uveden např. v [45] nebo [61].

Na základě literárních podkladů bylo zjištěno, že je tloušťka mezivrstvy pro submikroskopické částice v podstatě konstantní (velikost částic 0,5 μm a vyšší) a závisí na materiálových vlastnostech částic a matrice (popřípadě na ošetření částic před samotnou výrobou kompozitu). Tento efekt může vysvětlit rozdílné chování částicových kompozitů vytvořených ze stejných materiálů pouze s rozdílnými velikostmi částic plniva.

5 Postup řešení a dosažené výsledky

Pro řešení sledované problematiky je mj. nezbytné navrhnout a otestovat přístup, který umožňuje výpočet napětí a deformací v blízkosti obecných singulárních koncentrátorů napětí a to včetně odhadu odpovídajících zobecněných lomově-mechanických parametrů a použití kritérií pro posouzení jejich stability. Toto je obsahem zejména prací [i], [ii], [iii], [iv], [v], [vi], [viii], [ix], [x], [xi]. V zájmu kontinuity textu týkajícího se částicových kompozitů jsou tyto výsledky, které jsou nezbytné pro splnění cílů disertace uvedeny až v kapitole 5.2.

5.1 Částicové kompozity

Řešení problematiky částicových kompozitů je úloha víceúrovňového modelování. Při modelování na makroúrovni se obvykle řeší problematika vztahu globálních charakteristik částicových kompozitů, konkrétně například modul pružnosti kompozitu E_{comp} a mikrostruktury. Další přístup představuje popis částicových kompozitů z hlediska mikroúrovně. Takto byl řešen problém šíření mikrotrhlin v kompozitu a s tím související možné ovlivnění hodnot lomové houževnatosti kompozitu K_{IC} v souvislosti zejména s vlastnostmi mikročástic a mezivrstvy.

Všechny výpočty jsou zaměřeny na konkrétní typ kompozitu, tím je PP-CaCO₃ (polypropylenová matrice plněná částicemi CaCO₃). Tomu odpovídají i všechny materiálové charakteristiky:

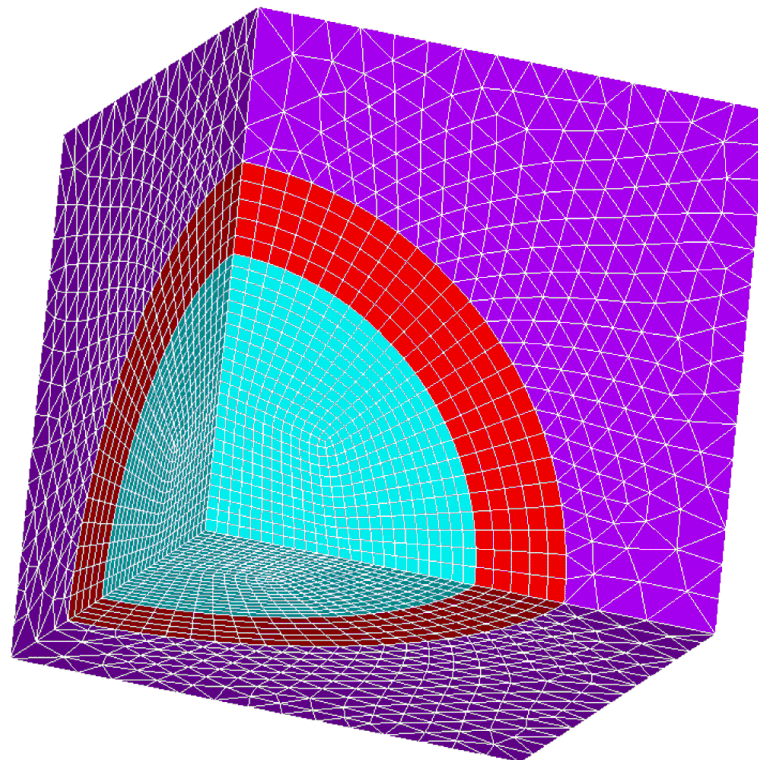
- **částice CaCO₃**: modul pružnosti 72 GPa, Poissonovo číslo 0,29 a velikost pohybuující se v rozmezí 0,1 až 10 μm
- **polymerní matrice**: modul pružnosti 1,8 GPa a Poissonovo číslo 0,29
- **mezivrstva**: modul pružnosti v rozmezí 0,05 až 1,8 GPa, Poissonovo číslo 0,29 a tloušťka 117 nm [45]

V našem případě je brán v úvahu srážený uhličitán vápenatý, jehož základní fyzikální vlastnosti lze nalézt např. v [6], [88]. Volba rozmezí velikosti částic 0,1 až 10 μm odpovídá velikostem obecně používaných částic plniva. Materiálové vlastnosti polymerní matrice byly zvoleny na základě experimentálních zkoušek, které byly provedeny na Ústavu materiálových věd a inženýrství VUT v Brně. U mezivrstvy je určování materiálových vlastností velice problematické. Určit tloušťku mezivrstvy je prakticky nemožné, většina autorů je jí schopna odhadnout za pomoci nepřímých metod. V této práci je uvažována tloušťka 117 nm, která byla určena kolektivem autorů Móczó, Fekete, Pukánszky [45]. Rozmezí modulu pružnosti mezivrstvy je voleno zejména s ohledem na vznik mezivrstvy, která se formuje z matrice.

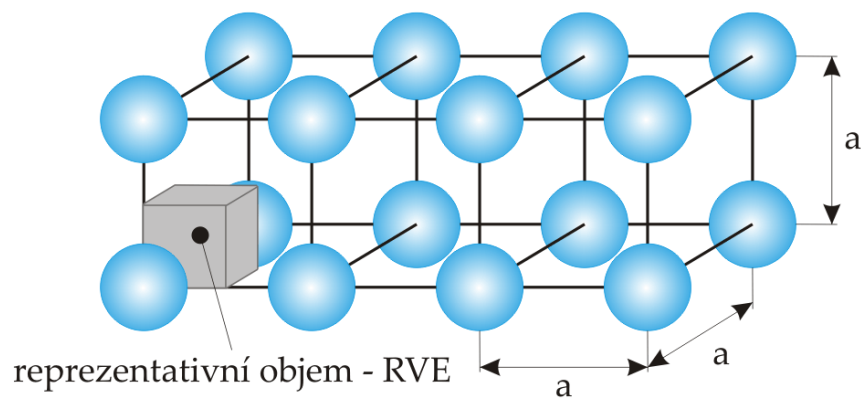
5.1.1 Odhad tuhosti částicového kompozitu

5.1.1.1 Numerický model

Řešení bylo realizováno metodou konečných prvků, resp. její deformační variantou (výpočtový systém ANSYS 11.0). Pro výpočet celkového modulu pružnosti kompozitu E_{comp} byl sestaven 3D model za použití dvacetiozlového prvku SOLID95. Počet elementů v konečno-prvkovém modelu se pohyboval v rozmezí 70 000 až 150 000 v závislosti na typu řešené úlohy. U všech studovaných modelů byla zároveň provedena citlivostní analýza.



Obr. 5.1: Příklad vytvořené konečno-prvkové sítě (velikost částice $D = 0,9 \mu\text{m}$, objemové množství částic $V_f = 7,7 \%$, tloušťka mezivrstvy $t = 117 \text{ nm}$).

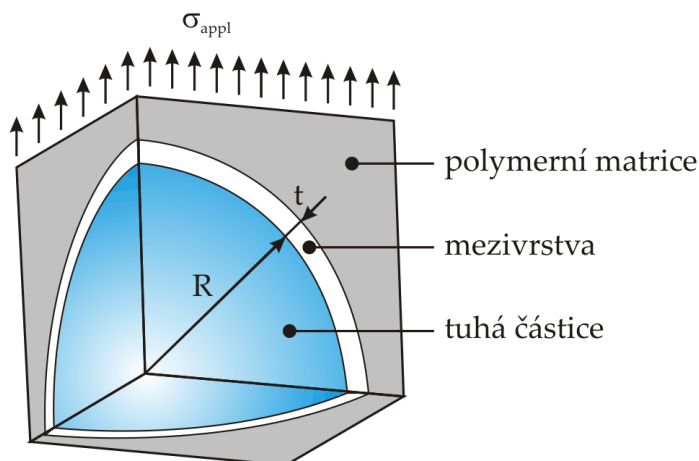


Obr. 5.2: Vytvořený model zachycující periodicky se opakující částice.

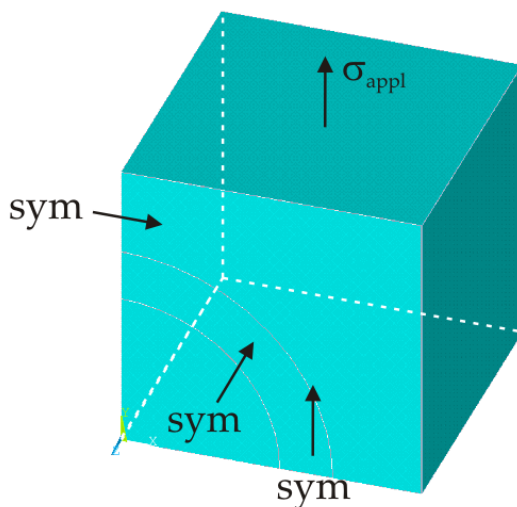
Pro výpočet celkového modulu pružnosti E_{comp} byl vytvořen numerický 3D model (obr. 5.2) periodicky se opakujících částic plniva vzájemně vzdálených o velikost a [xii].

Jak je patrné z obr. 5.2, při modelování bylo možno využít symetrii a byla tedy modelována pouze 1/8 částice (obr. 5.3) s odpovídajícími okrajovými podmínkami. Velikost částice plniva byla D ($2R$) a velikost buňky (matrice) byla volena tak, aby odpovídala požadovanému objemovému množství částic v kompozitu. Celá buňka pak byla zatížena aplikovaným napětím σ_{appl} (obr. 5.3).

Pro tento model byly stanoveny určité zjednodušující předpoklady: (i) dokonalá adheze všech jednotlivých složek kompozitu (částice, matrice i mezivrstvy), (ii) pro základní modelování předpoklad kulového tvaru částic (v kapitole 5.1.1.4 je pak sledován samotný vliv tvaru částice na celkový modul pružnosti E_{comp}), (iii) rovnoměrné rozložení částic v matrici kompozitu (vliv nerovnoměrnosti rozložení částic je popsán v kapitole 5.1.1.5) (iv) a dále je pak uvažována jednotná tloušťka mezivrstvy 117 nm [45].



Obr. 5.3: Reprezentativní objem - RVE - 1/8 částice.



Obr. 5.4: Zobrazení okrajových podmínek pro výpočtový model.

5.1.1.2 Porovnání numerického modelu s analytickými vztahy [xxv]

Byl proveden výpočet pouze pro kulové částice bez mezivrstvy v matici a tento výsledek byl srovnán s obecně platnými analytickými vztahy (tab. 5.1) získanými z literatury [14], [18].

objemové množství V_f [%]	MKP výpočet [MPa]	Einstein [MPa]	Guth [MPa]	Kerner [MPa]	Ravichandran [MPa]
5	1979	2025	2088	1997	1936 - 2608
10	2196	2250	2503	2217	2120 - 3075
20	2774	2700	3715	2739	2616 - 3947

Tabulka 5.1: Porovnání hodnot modulu pružnosti E_{comp} z numerického výpočtu a z analytických vztahů.

Ravichandran [64] uvedl ve své práci kritérium, podle kterého by se hodnota celkového modulu pružnosti E_{comp} měla pohybovat mezi hodnotami danými rovnicemi (55)-(57):

$$E_{comp}^I = \frac{(CE_m E_p + E_m^2)(1+C)^2 - E_m^2 + E_p E_m}{(CE_p + E_m)(1+C)^2}, \quad (55)$$

$$E_{comp}^{II} = \frac{[E_m E_p + E_m^2(1+C)^2 - E_m^2](1+C)}{(E_p - E_m)C + E_m(1+C)^2}, \quad (56)$$

$$C = \left(\frac{1}{V_f}\right)^{\frac{1}{3}} - 1. \quad (57)$$

Toto kritérium je vhodné zejména pro kompozity z vysoce rozdílnými moduly pružnosti jednotlivých složek.

S jiným analytickým vztahem přišel Einstein [11], který pro výpočet E_{comp} použil následující vzorec:

$$\frac{E_{comp}}{E_m} = 1 + 2,5V_f. \quad (58)$$

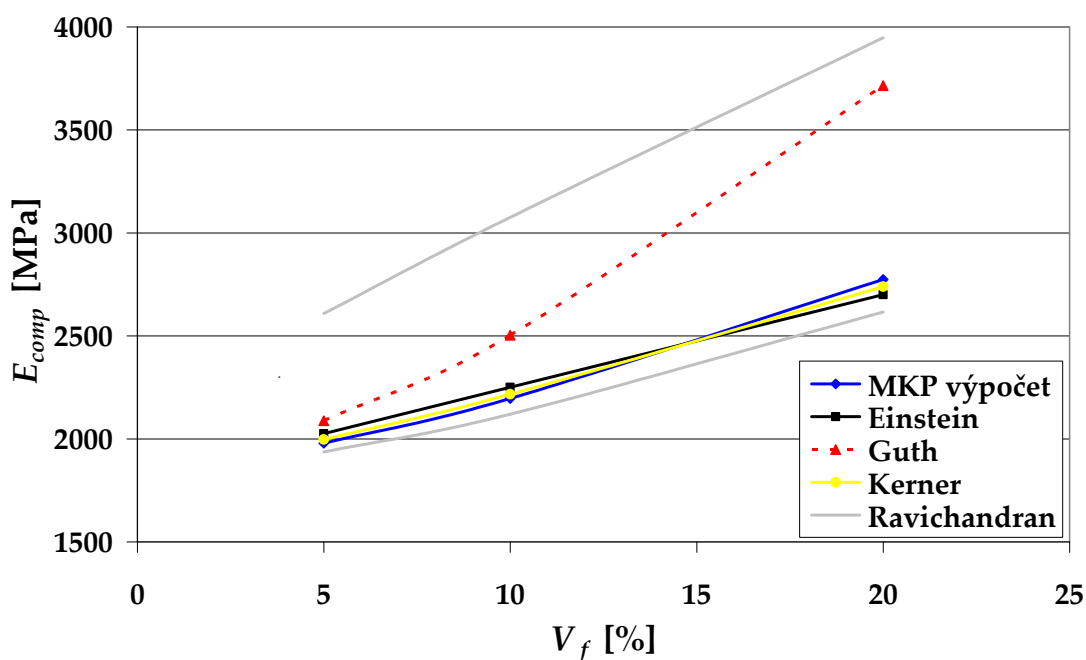
Podobný vztah uvedl Guth [16]:

$$\frac{E_{comp}}{E_m} = 1 + 2,5V_f + 14,1V_f^2. \quad (59)$$

Jako poslední je v tomto přehledu uvedeno klasické Kernerovo kritérium [26]:

$$\frac{E_{comp}}{E_m} = 1 + \frac{V_f}{(1-V_f)} \frac{15(1-\nu_m)}{(8-10\nu_m)}. \quad (60)$$

Jak je z tabulky 5.1 patrné, dalo by se říci, že Einsteinovo kritérium by se dalo brát jako dolní hranice pro odhad hodnoty modulu pružnosti, naopak Guthovo kritérium jako horní hranice.



Obr. 5.5: Závislost celkového modulu pružnosti kompozitu E_{comp} na objemovém množství částic plniva V_f .

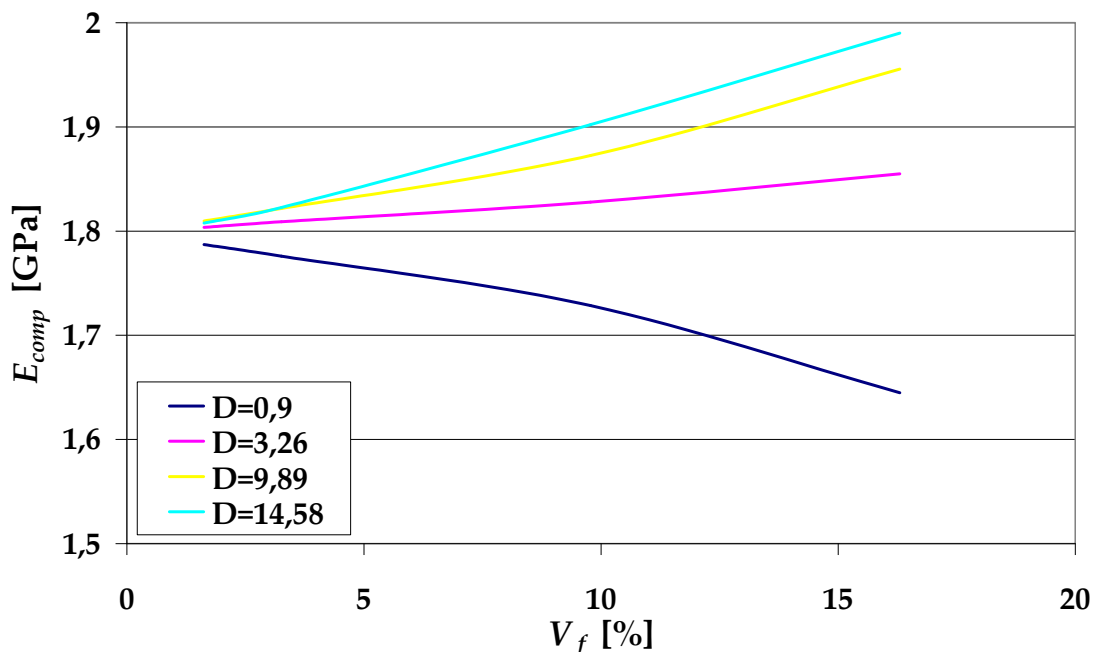
Z porovnání v obr. 5.5 je vidět odhad celkového modulu pružnosti E_{comp} částicového kompozitu pro konfiguraci kulové částice v polymerní matici na základě MKP výpočtu a na základě analytických odhadů. Z obrázku je patrné, že Kernerovo a Einsteinovo kritérium je ve velice dobré shodě s numerickým výpočtem, a proto lze jejich použití pro tento typ kompozitu doporučit. Ravichandranovo kritérium dává intervalový odhad, ve kterém se sice všechna ostatní kritéria společně s vypočtenými hodnotami pohybují, ale je poměrně široký a dává pouze rámcovou představu o vlastnostech studovaného kompozitu. Poslední Guthovo kritérium pro odhad celkové tuhosti kompozitu poměrně přeceňuje vyztužující účinek částic.

Z těchto porovnání také plyne důležitý závěr, že navržený model je v souladu s obecně uznávanými analytickými modely (vztahy) a lze ho tedy použít k predikci materiálových vlastností kompozitu i ve složitějších případech.

5.1.1.3 Stanovení vlivu mezivrstvy na globální chování kompozitu [xv]

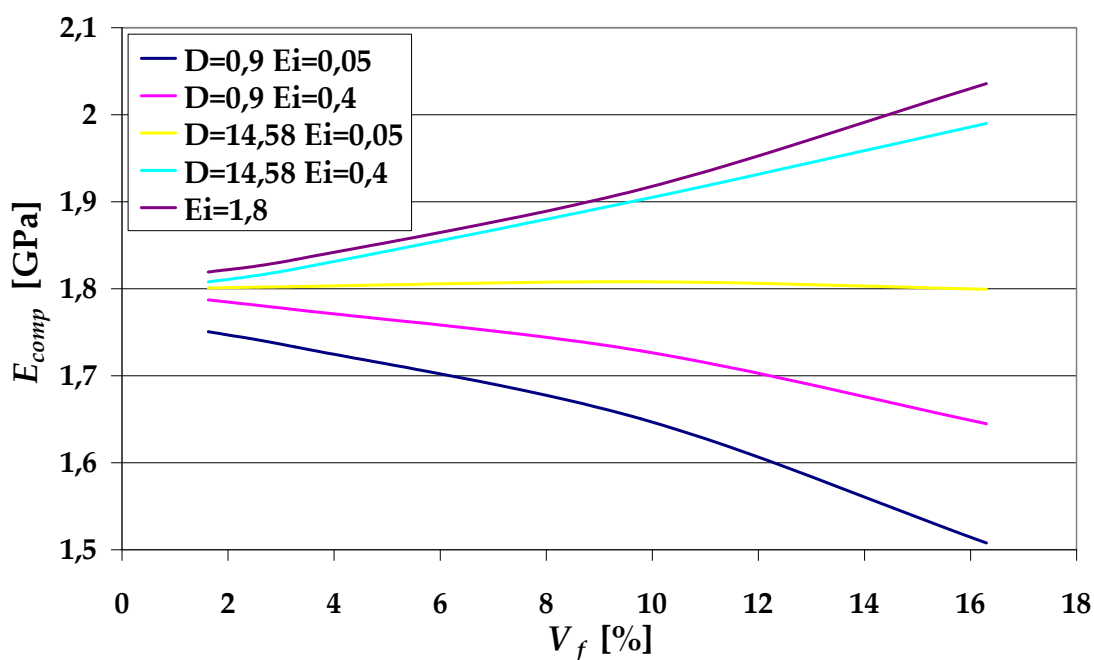
V předchozí kapitole bylo ukázáno, že pomocí použitého konečno-prvkového modelu jsme schopni spolehlivě odhadnout celkový modul pružnosti kompozitu E_{comp} . Byl tedy sestaven další model, který již obsahoval třetí fázi; mezivrstvu. Byl sledován zejména vliv velikosti částice D a modulu pružnosti mezivrstvy E_i na celkový modul pružnosti E_{comp} . Na obr. 5.6 je vykreslena závislost celkového modulu pružnosti E_{comp} na objemovém množství částic plniva V_f pro modul pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,4$ GPa a pro různé velikosti

částice. Tloušťka mezivrstvy do značné míry ovlivňuje právě celkový modul pružnosti. Pokud je částice malá, mezivrstva hraje významnější roli a dochází k poklesu celkového modulu pružnosti. S rostoucí velikostí částice zároveň roste i celkový modul pružnosti.



Obr. 5.6: Závislost celkového modulu pružnosti kompozitu E_{comp} na objemovém množství částic plniva V_f pro $E_i = 0,4$ GPa.

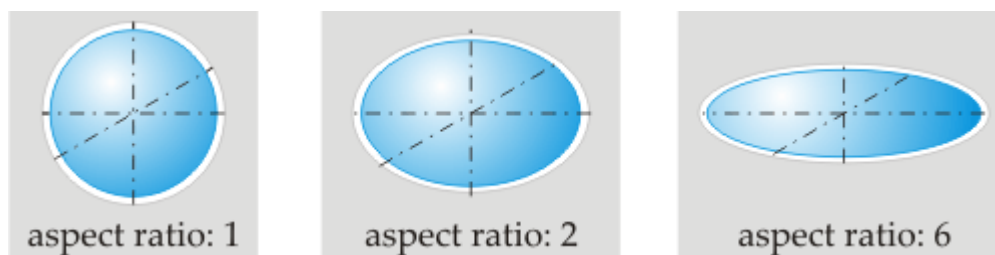
Na dalším grafu (obr. 5.7) je opět závislost celkového modulu pružnosti na objemovém množství, tentokrát pro různé velikosti částic a různé moduly pružnosti mezivrstvy. Je zde patrný trend, že s rostoucím modulem pružnosti mezivrstvy roste i celkový modul pružnosti kompozitu. Je zde také uvedena jedna zajímavá konfigurace, kdy při velikosti částice $D = 14,58$ μm a modulu pružnosti mezivrstvy 0,05 GPa prakticky nedochází ke změně celkového modulu pružnosti s rostoucím objemovým množstvím částic (ten zůstává konstantní přibližně 1,8 GPa). Fialová křivka ($E_i = 1,8$ GPa) pak v podstatě představuje kompozit bez mezivrstvy. Zde dostáváme nejvyšší hodnoty celkové modulu pružnosti kompozitu.



Obr. 5.7: Závislost celkového modulu pružnosti kompozitu E_{comp} na objemovém množství částic plniva V_f .

5.1.1.4 Vliv tvaru částic na modul pružnosti kompozitu E_{comp} [xxv]

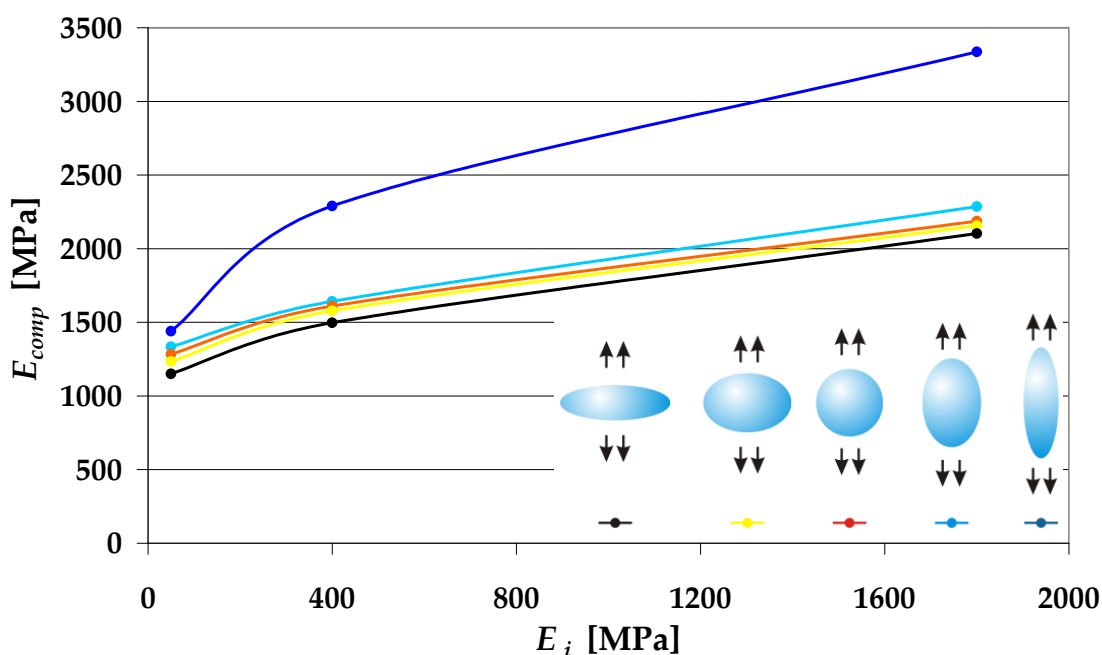
Na mechanické vlastnosti částicového kompozitu má nemalý vliv také tvar použitého plniva. Jak bylo uvedeno v kap. 4.2, jako plnivo do kompozitu se používají částice nejrůznějších tvarů. K popisu tvaru částice byla zavedena charakteristika známá jako „aspect ratio“ (velikostní faktor). Ten udává poměr největšího a nejmenšího rozměru částice.



Obr. 5.8: Různé tvary částic použité pro MKP výpočet.

Částice s velkým tvarovým faktorem většinou výrazně zlepšují vlastnosti v konkrétním směru (tuhost, pevnost v tahu), částice s malým tvarovým faktorem ovlivňují kompozit globálně (modul pružnosti či houževnatost). Co se týče aplikace výsledků na částicový kompozit CaCO_3 , byly pro modelování a následný konečno-prvkový výpočet zvoleny tři tvary, které mohou reprezentovat extrémní geometrické tvary částic plniva a to kulový (velikostní faktor 1), elipsoidní (velikostní faktor 2) a elipsoidní s větším velikostním faktorem (velikostní faktor 6) (obr. 5.8).

Pokud je uvažován částicový kompozit bez mezivrstvy, dostáváme nejvyšší hodnoty modulu pružnosti E_{comp} . Se snižujícím se modulem pružnosti mezivrstvy klesá i celkový modul pružnosti kompozitu. Významný pokles tuhosti kompozitu lze pozorovat zejména tam, kde je modul pružnosti mezivrstvy asi pětkrát menší než modul matrice. Naopak, s rostoucí velikostí částice D se zároveň zvyšuje celkový modul pružnosti E_{comp} . Toto je zejména způsobeno tím, že při rostoucí velikosti částic zůstává konstantní tloušťka mezivrstvy, a proto se její vliv na celkový modul pružnosti snižuje.



Obr. 5.9: Závislost celkového modulu pružnosti kompozitu E_{comp} na modulu pružnosti mezivrstvy E_i pro různé hodnoty velikostního faktoru a a různé směry zatížení σ_{appl} (velikost částice $D = 0,9 \mu\text{m}$ a objemové množství částic $V_f = 9,78 \%$).

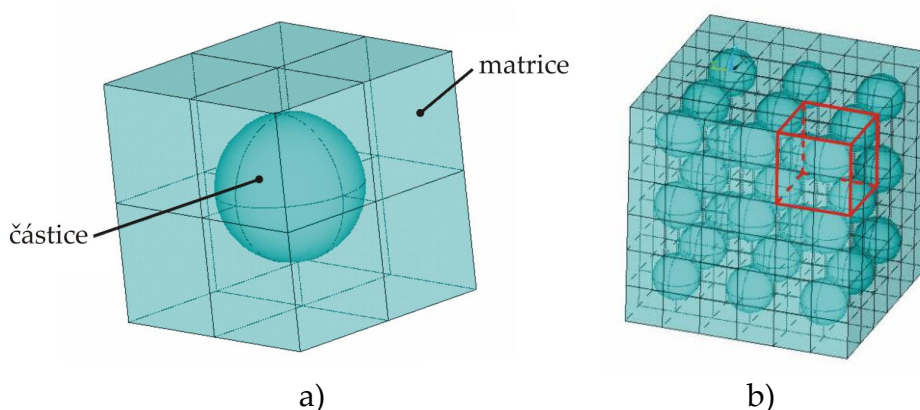
Z hlediska orientace částic lze vyslovit závěr, že může hrát významnou roli, zejména pak pro větší velikostní faktor. Pokud je elipsoidní částice v matrici zatížena v podélném směru, dochází k výraznému vyztužení kompozitu z hlediska celkového modulu pružnosti kompozitu E_{comp} (obr. 5.9). Z porovnání pro různě zatížené elipsoidní částice a kulové částice lze najít při určení hodnot modulů pružnosti kompozitu významné rozdíly pro částice s velikostním faktorem 6 a větším. Z praktického hlediska se v kompozitu částice či agregáty částic tohoto typu příliš nevyskytují a jedná se spíše o ojedinělé případy. Nejběžnější typ částic a agregátů má velikostní faktor v rozmezí 1-2, což výsledné vlastnosti kompozitu příliš neovlivní.

Lze tedy vyslovit závěr, že pokud se v matrici vyskytují částice s velikostním faktorem přibližně 1-2, je možné je považovat při výpočtu za kulaté. Pro jiné typy kompozitů (kde se vyskytují různorodé tvary částic) ale může hrát

orientace částic významnou roli a může vést k výsledným silně ortotropním vlastnostem.

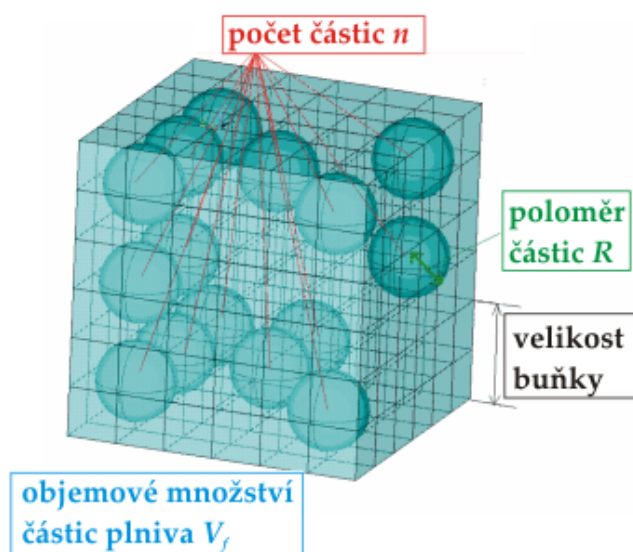
5.1.1.5 Určení vlivu nerovnoměrnosti rozložení částic v kompozitu

Jako další byl studován vliv nerovnoměrného rozložení částic v matici [xxii]. Model částicového kompozitu byl tentokrát vytvořen jako dvoufázové kontinuum částice-matrice. Byla vytvořena tzv. reprezentativní objemová buňka (RVE) (obr. 5.10a) a pomocí ní byl sestaven model (obr. 5.10b) pro numerickou simulaci. Ten se skládal ze 27 jednotkových buněk (pole buněk 3x3x3).



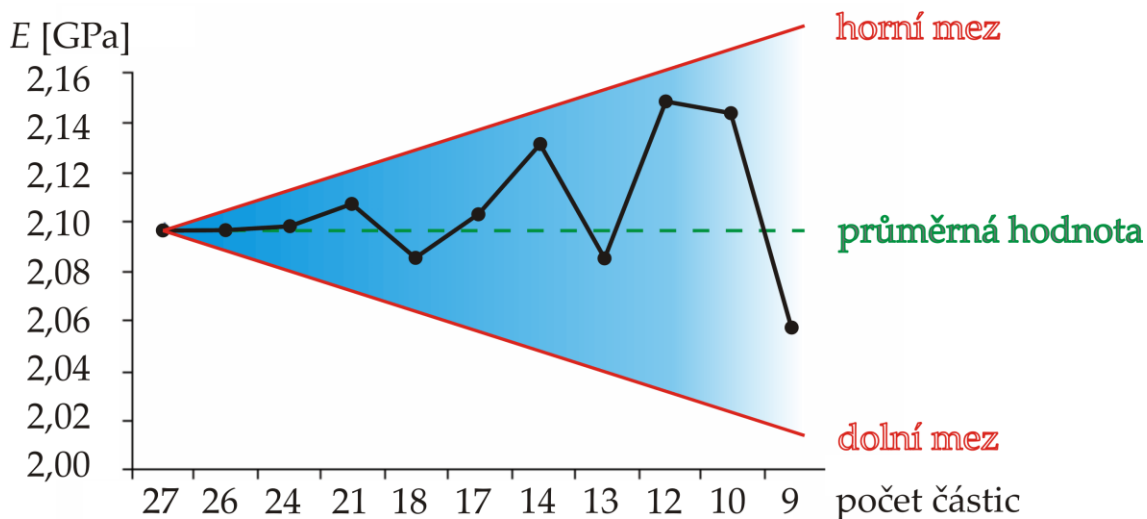
Obr. 5.10: a) reprezentativní objemová buňka (RVE), b) výpočtový model.

Pro určení vlivu nehomogenity rozložení částic v kompozitu byla provedena celá řada simulací, kdy se zmenšoval počet částic a zvětšoval jejich poloměr (aby bylo zachováno objemové množství) – na sobě závislé parametry jsou znázorněny na obr. 5.11.



Obr. 5.11: Příklad nerovnoměrného rozdělení částic s popisem parametrů.

Jak se ukázalo, při zachování stejného objemového množství je vliv nerovnoměrnosti rozložení částic na celkový modul pružnosti kompozitu E_{comp} zanedbatelný (obr. 5.12) [xxii].



Obr. 5.12: Modul pružnosti E_{comp} pro různý počet částic.

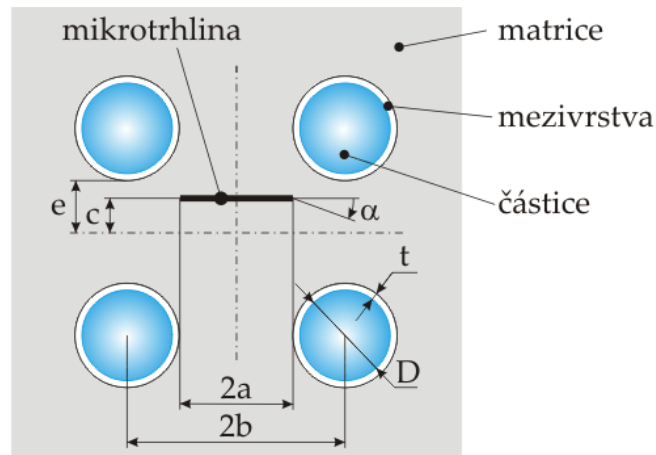
5.1.2 Šíření mikrotrhlin v částicovém kompozitu

5.1.2.1 Numerický model

Scílem modelovat relaci mezi chováním mikrotrhliny s mikrostrukturou kompozitu byl vytvořen model k určení směru dalšího šíření mikrotrhliny v částicovém kompozitu. Vzhledem k tomu, že na chování mikrotrhliny v částicovém kompozitu mají vliv částice především v její bezprostřední blízkosti, byl navržen model mikrotrhliny obklopený čtyřmi částicemi (obr. 5.13). Celý příklad byl modelován jako 2D úloha. Z hlediska stanovení směru dalšího šíření mikrotrhliny v částicovém kompozitu nemá toto zjednodušení podstatný vliv. Model zároveň obsahuje několik dalších zjednodušujících předpokladů, kterými jsou především kulový tvar částic plniva a rovnoměrné rozložení částic v kompozitu.

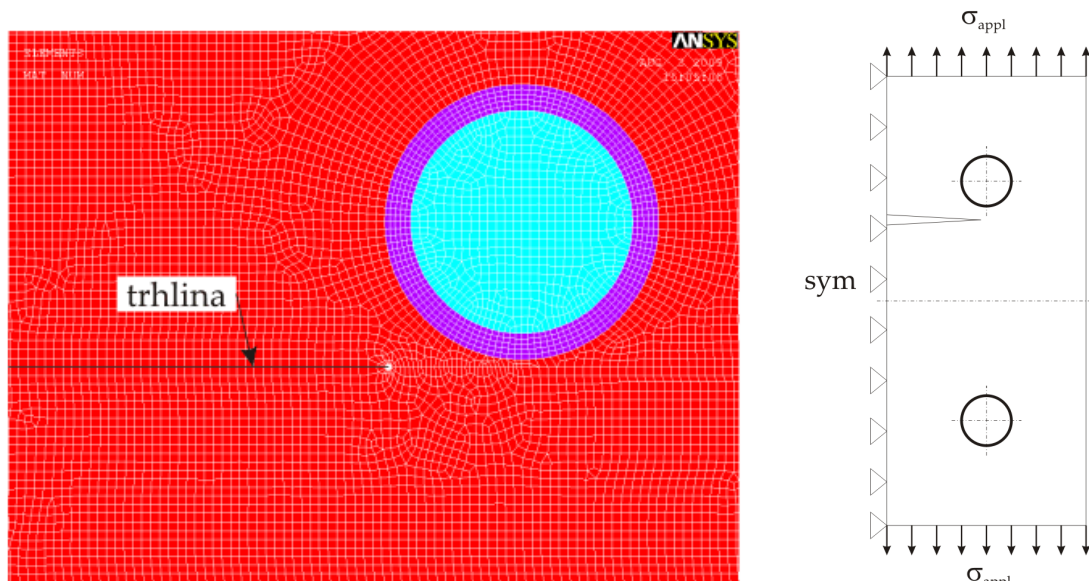
Pro numerické modelování byly použity elementy typu PLANE82. Tyto elementy jsou osmiuzlové a pro daný model naprosto postačující. Takto sestavené konečno-prvkové modely obsahovaly cca 50 000 elementů.

Na uvedeném obrázku (obr. 5.13) je patrná geometrie použitá v modelu, na dalším je zobrazen příklad konečno-prvkové sítě a použité okrajové podmínky (obr. 5.14). Při modelování tohoto problému bylo využito symetrie a celé těleso bylo zatíženo napětím σ_{appl} .



Obr. 5.13: Geometrie modelu pro určení chování mikrotrhliny v polymerním částicovém kompozitu PP-CaCO₃.

Na obr. 5.13 je rovněž zobrazen úhel α , který představuje směr dalšího šíření mikrotrhliny v kompozitu. Kladnou hodnotou tohoto úhlu se míní situace, kdy se mikrotrhlina odklání od částice. Pokud je úhel α záporný, znamená to, že je mikrotrhlina k částici přitahována.

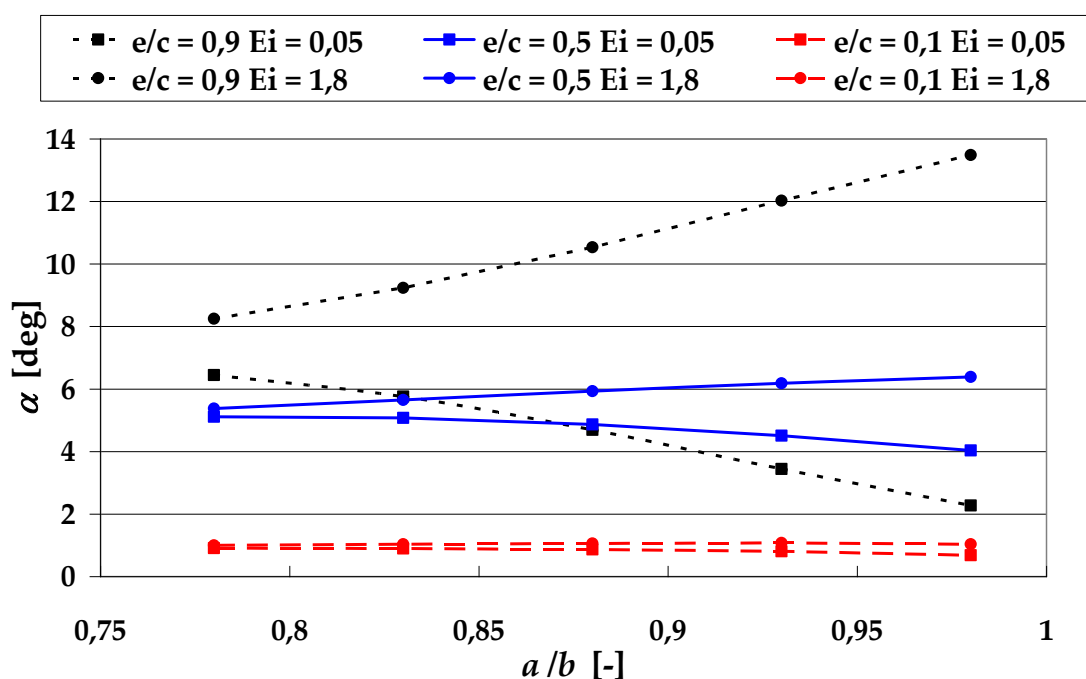


Obr. 5.14: Příklad vytvořené konečno-prvkové sítě (velikost částice $D = 0,9 \mu\text{m}$, $e/c = 0,95$, $a/b = 0,9$, tloušťka mezivrstvy $t = 117 \text{ nm}$) a použité okrajové podmínky.

5.1.2.2 Vliv umístění mikrotrhliny v matrici [vii]

Jak je patrné z obr. 5.13, mikrotrhlina se může nacházet v matrici v různé vzdálenosti od částice vyjádřené poměrem e/c . Bylo tedy nezbytné určit, jak významně umístění mikrotrhliny ovlivní získané výsledky. Při modelování byly zvoleny 3 základní konfigurace. První je téměř uprostřed mezi dvěma částicemi ($e/c = 0,1$), druhá ve třech čtvrtinách mezi dvěma částicemi ($e/c = 0,5$) a třetí v těsné blízkosti jedné z částic ($e/c = 0,9$). Zároveň každá tato konfigurace

byla spočtena pro částici bez mezivrstvy a pro částici s mezivrstvou (tloušťka $t = 50$ nm, $E_i = 0,05$ GPa). Výsledky z těchto modelů jsou zobrazeny v grafu na obr. 5.15. Pro mikrotrhlinu umístěnou téměř uprostřed je vliv částic zcela zanedbatelný a mikrotrhlina má tendenci se šířit stále kolmo na směr zatížení. Zcela odlišná situace nastává, pokud se mikrotrhlina nachází v blízkosti částice (v grafu černé křivky). Když se v kompozitu mezivrstva nenachází ($e/c = 0,9$ a $E_i = 1,8$ GPa), mikrotrhlina je odpuzována tuhou částicí. Čím blíže se přitom vrchol mikrotrhliny u částice nachází, tím větší je úhel odklonu od částice. Pokud je ovšem mikrotrhlina uvažována, dochází zcela zřetelně k tzv. stínícímu efektu. Ten můžeme vysvětlit tak, že i přes svou malou tloušťku dokáže mezivrstva díky svým materiálovým vlastnostem „přitahovat“ mikrotrhlinu a v konečném důsledku nedochází k tak výraznému odklonu mikrotrhliny od částice.

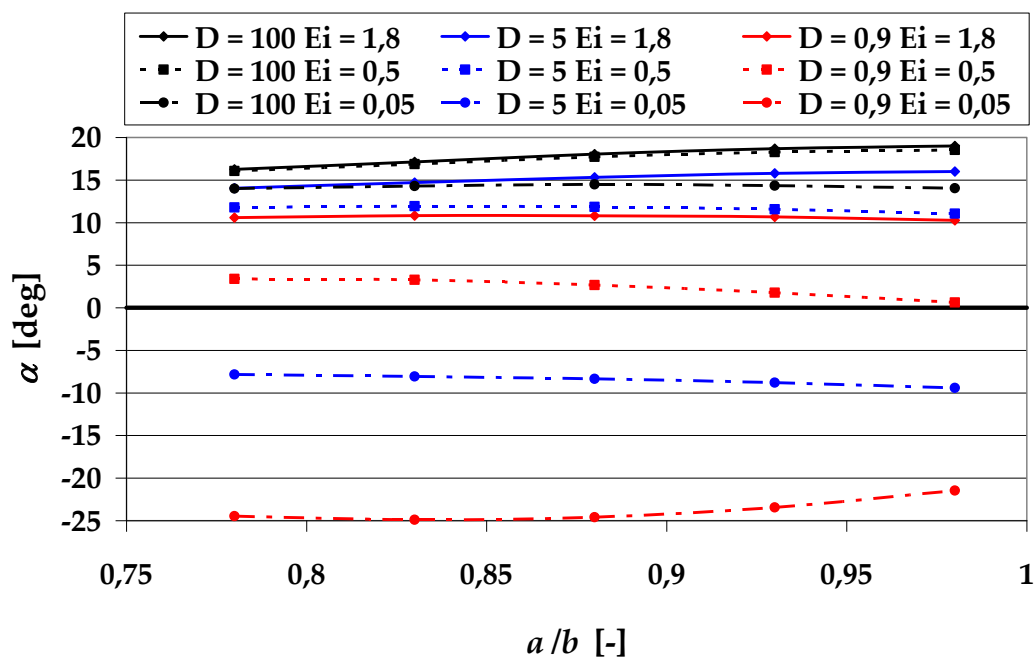


Obr. 5.15: Závislost směru šíření α na velikosti mikrotrhliny a/b pro různé vzdálenosti mikrotrhliny od částice e/c a různé hodnoty modulu pružnosti mezivrstvy E_i (velikost částice $D = 10$ μm , tloušťka mezivrstvy $t = 50$ nm a objemové množství částic $V_f = 35$ %).

Je zřejmé, že k největšímu ovlivnění dochází, pokud je mikrotrhlina uvažována v těsné blízkosti částice ($e/c = 0,9$). Proto je v dalším modelována především tato konfigurace a jsou prezentovány výsledky získané pro mikrotrhlinu v těsné blízkosti částice.

5.1.2.3 Určení vlivu mezivrstvy na směr šíření mikrotrhlin v matrici [xiii],

Mezivrstva hraje při určování směru dalšího šíření mikrotrhliny v kompozitu významný vliv. Nejprve byl studován vliv velikosti samotné částice v kombinaci s různými materiálovými vlastnostmi mezivrstvy. Výsledky jsou zobrazeny na obr. 5.16.

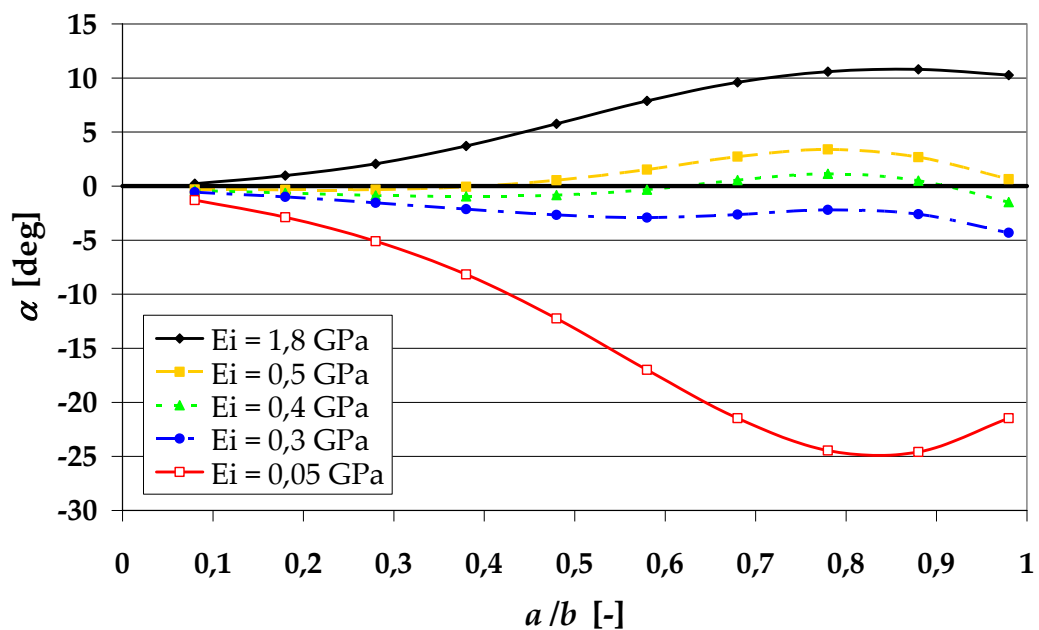


Obr. 5.16: Závislost směru šíření α na velikosti mikrotrhliny a/b pro různé velikosti částic D a různé hodnoty modulu pružnosti mezivrstvy E_i (objemové množství částic $V_f = 25\%$).

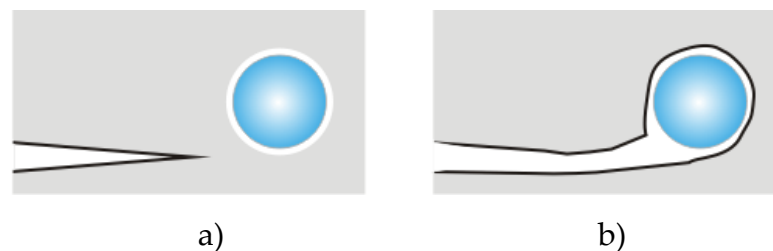
Z uvedených výsledků je patrné, že pokud uvažujeme velké částice (v našem případě $D = 100 \mu\text{m}$), ať už má mezivrstva jakékoliv vlastnosti, téměř nedochází k ovlivnění mikrotrhliny a ta má tendenci se od částice odklánět a šířit se volně matricí. Již při velikosti částice $5 \mu\text{m}$ (modré křivky) můžeme vidět výrazné ovlivnění ve směru šíření mikrotrhliny. Zatímco pro $E_i = 1,8 \text{ GPa}$ a $E_i = 0,5 \text{ GPa}$ dochází stále k odpuzování mikrotrhliny částicí, pro modulu pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,05 \text{ GPa}$ je již mikrotrhlina k částici přitahována. Ještě výrazněji je tento trend patrný pro částice o velikosti $0,9 \mu\text{m}$. Zde už pro hodnotu $E_i = 0,5 \text{ GPa}$ dochází k tomu, že sice mikrotrhlina není částicí přitahována, ale není ani odpuzována a tudíž nemá tendenci se odklánět. V konečné fázi pak dojde k interakci mikrotrhliny a částice. Pro hodnotu modulu pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,05 \text{ GPa}$ pak dochází již k výraznému přitahování mikrotrhliny částicí a úhly α dosahují hodnot až 25° .

S ohledem na předchozí výsledky byla modelována mikrotrhlina v těsné blízkosti částice o velikost $0,9 \mu\text{m}$. Na uvedeném grafu (obr. 5.17) je vykreslena závislost směru šíření mikrotrhliny α na poměru a/b . Z výsledků je zřejmé, že pokud se mezivrstva v kompozitu vůbec nevyskytuje ($E_i = E_m = 1,8 \text{ GPa}$),

mikrotrhlina má tendenci odklánět se od tuhé částice ($E_p = 72$ GPa). V opačném případě, pokud mezivrstvě v kompozitu uvažujeme, je zde patrný vliv na směr dalšího šíření. S klesající hodnotou modulu pružnosti mezivrstvy E_i zároveň klesá hodnota úhlu značícího odklon mikrotrhliny od částice a to až k hodnotě E_i kolem 0,4 GPa, dojde k otočení trendu (za stávajících podmínek, viz obr. 5.17). Pokud uvažujeme mezivrstvě poddajnou ($E_i = 0,05$ GPa), dochází pro uvedenou konfiguraci ke stínícímu efektu a mikrotrhlina je k částici s mezivrstvou přitahována. To má za následek kontakt vrcholu mikrotrhliny nejprve s mezivrstvou a postupně s částicí. Na rozhraní částice-matrice pak dojde k odtržení mezivrstvy, uvolnění tuhé částice a tím pádem k otupení vrcholu mikrotrhliny (obr. 5.18). To způsobuje zvýšení disipace plastické energie při šíření mikrotrhlin. Při uvedeném množství částic v matrici (objemové množství částic $V_f = 25$ %) dochází k postupnému otupování vrcholu mikrotrhliny a to může mít za následek podstatné zlepšení lomových vlastností částicového kompozitu.

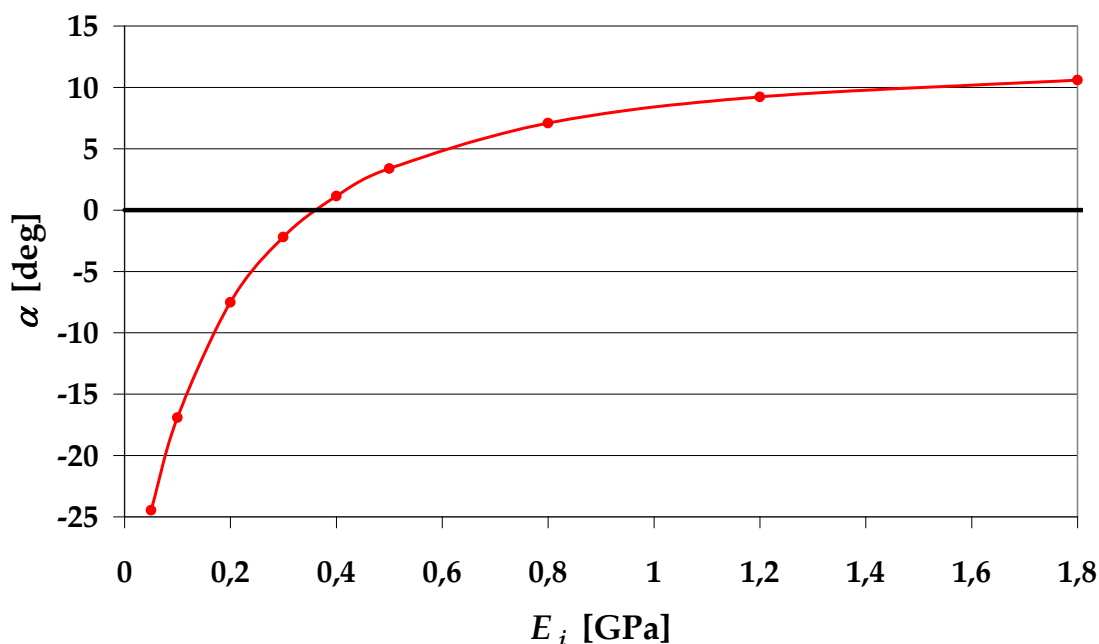


Obr. 5.17: Závislost směru šíření α na poměru a/b pro různé hodnoty Youngova modulu pružnosti mezivrstvy E_i (výsledky odpovídají velikosti částice $D = 0,9 \mu\text{m}$, umístění mikrotrhliny $elc = 0,9$ a objemovému množství částic $V_f = 25$ %).



Obr. 5.18: a) mikrotrhlina v blízkosti částice, b) odtržení mezivrstvy a částice - otupení vrcholu mikrotrhliny.

Na dalším grafu (obr. 5.19) je uvedena závislost směru šíření α na modulu pružnosti mezivrstvy E_i pro jednu konkrétní konfiguraci. Je zde patrné, že s rostoucí hodnotou modulu pružnosti mezivrstvy E_i postupně roste hodnota úhlu α k nule. Pro tento případ je zlomová hodnota E_i přibližně 0,38 GPa, kdy dochází zcela k otočení trendu směru šíření mikrotrhliny a to tak, že mikrotrhlina začíná být částicí odpuzována.

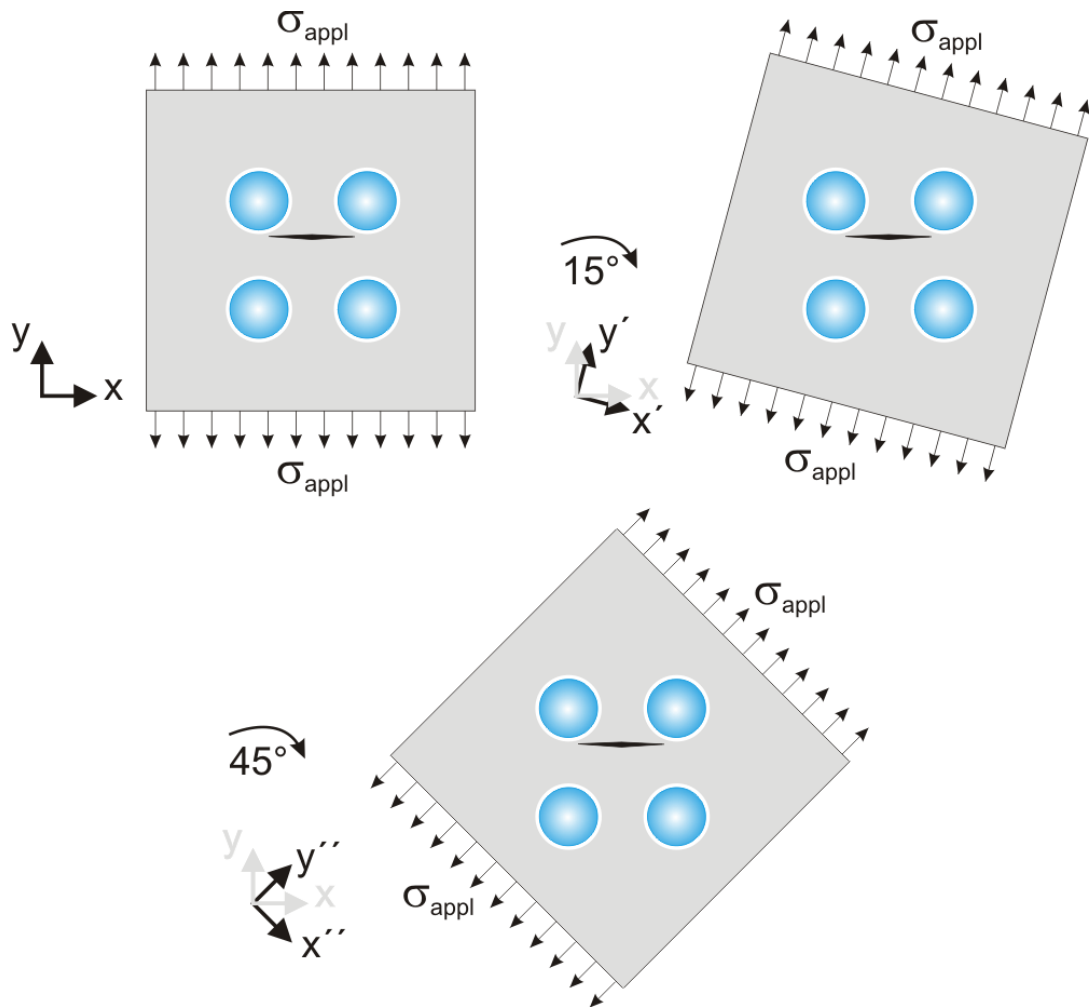


Obr. 5.19: Závislost směru šíření α na modulu pružnosti mezivrstvy E_i (výsledky odpovídají velikosti částice $D = 0,9 \mu\text{m}$, poměrům $a/b = 0,78$ a $e/c = 0,9$ a objemovému množství částic $V_f = 25 \%$).

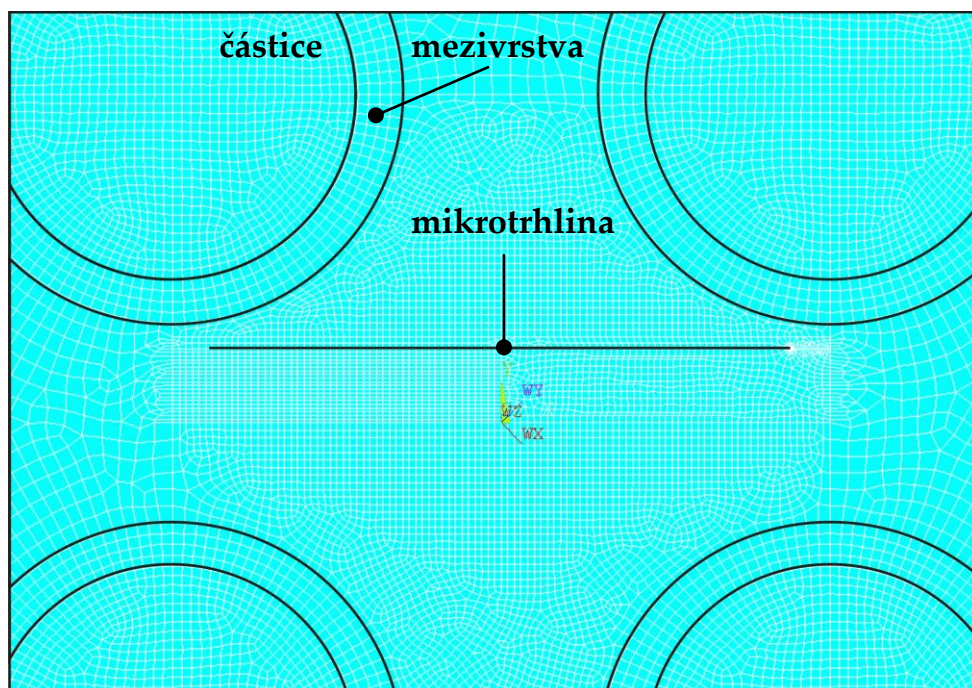
5.1.2.4 Vymezení vlivu směru zatížení kompozitu na chování mikrotrhlin [xxii]

K výpočtu stanovení vlivu směru zatížení byl tentokrát sestaven model se čtyřmi částicemi (zde není možno využít symetrie). Směr zatížení kompozitu se měnil od čistého tahového módu I (úhel zatížení 0°) až po úhel 45° , obr. 5.20. Byla opět sledována především konfigurace mikrotrhliny v těsné blízkosti částice s mezivrstvou.

Na obr. 5.22 je uvedena závislost směru dalšího šíření α na velikosti mikrotrhliny (poměr a/b). Jsou zde srovnány hodnoty homogenních případů pro jednotlivé směry zatížení σ_{appl} s hodnotami získanými pro konfiguraci částice s mezivrstvou, kdy je modul pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,05$ GPa.

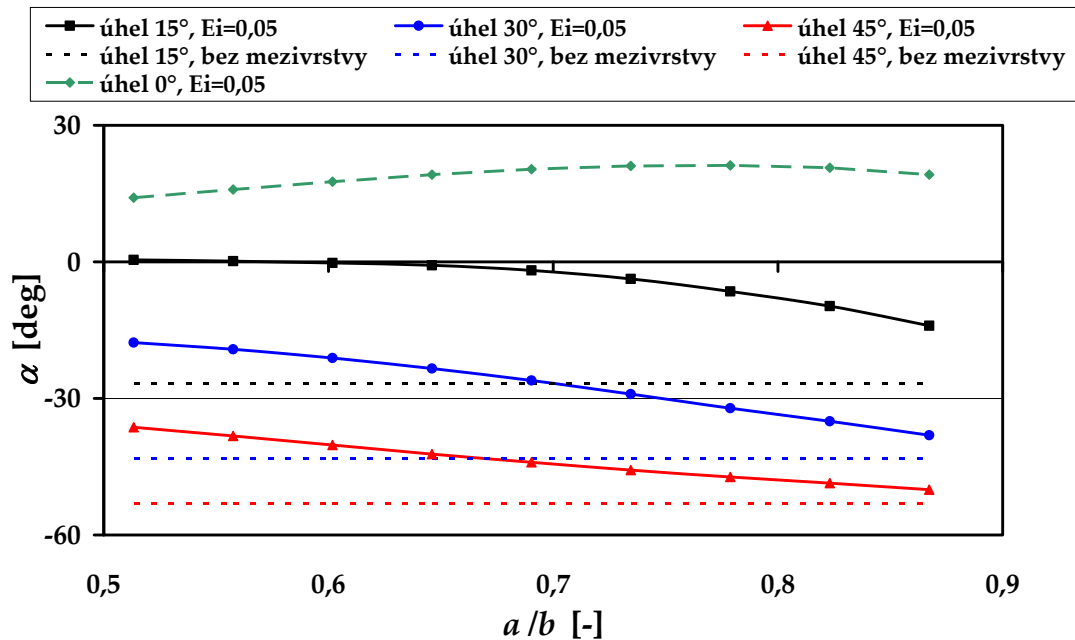


Obr. 5.20: Různé směry zatížení kompozitu.



Obr. 5.21: Příklad MKP síť.

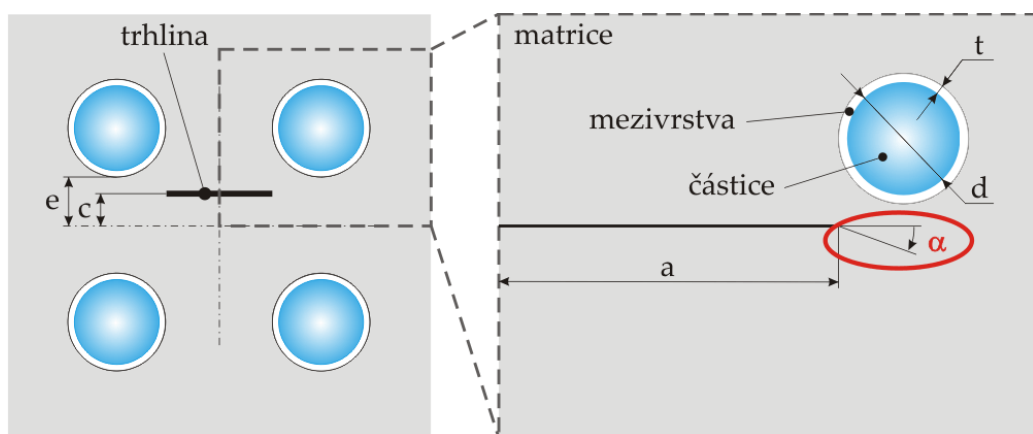
Z uvedeného grafu (obr. 5.22) je patrné, že směr dalšího šíření mikrotrhliny je ve skutečnosti superpozicí homogenního případu a vlivu mezivrstvy obklopující částici. Tzn., že pokud je mezivrstva poddajná, mikrotrhlina je k této mezivrstvě přitahována a opět dojde k dekohezi částice a k otupení vrcholu mikrotrhliny.



Obr. 5.22: Závislost směru šíření mikrotrhliny α na velikosti mikrotrhliny (a/b) pro různé směry zatížení (objemové množství částic $V_f = 25\%$).

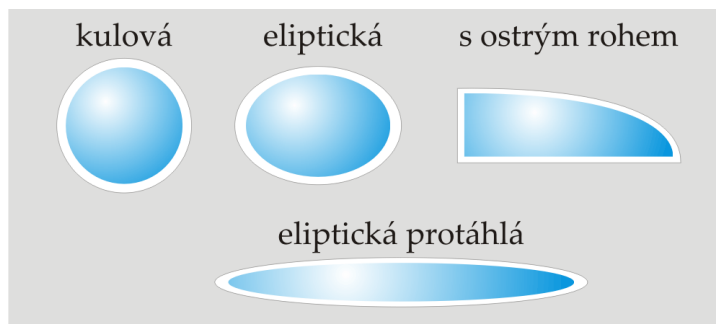
5.1.2.5 Vliv tvaru částic na chování mikrotrhlin [xvii], [xxi], [xxvi]

Jak bylo uvedeno v kap. 4.2, tvar částice plniva v kompozitu se může výrazně lišit. Proto bylo nutné postihnout také tento vliv na chování mikrotrhliny v matici kompozitu. Při numerickém modelování byl navržen pro tento účel zjednodušený konečno-prvkový model, který obsahoval mikrotrhlinu v blízkosti jedné částice (obr. 5.23).



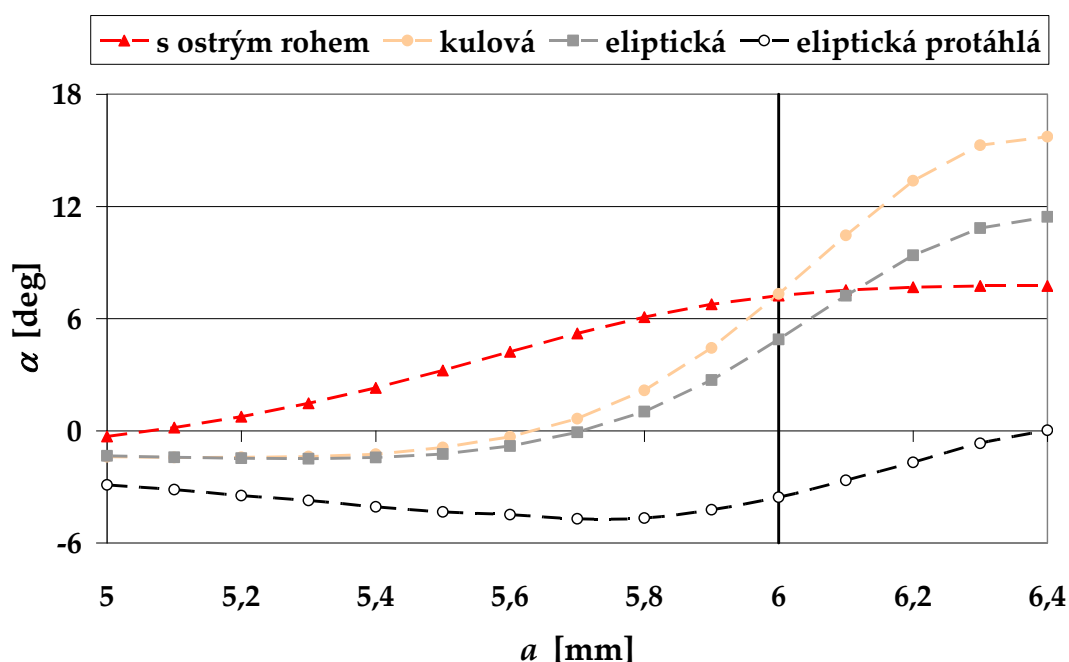
Obr. 5.23: Zjednodušený konečno-prvkový model pro výpočet vlivu tvaru částic.

Na základě experimentálních pozorování bylo zvoleno několik tvarů, od kulatých až po částice s ostrým rohem, viz obr 5.24.



Obr. 5.24: Tvary částic použité při modelování kompozitu.

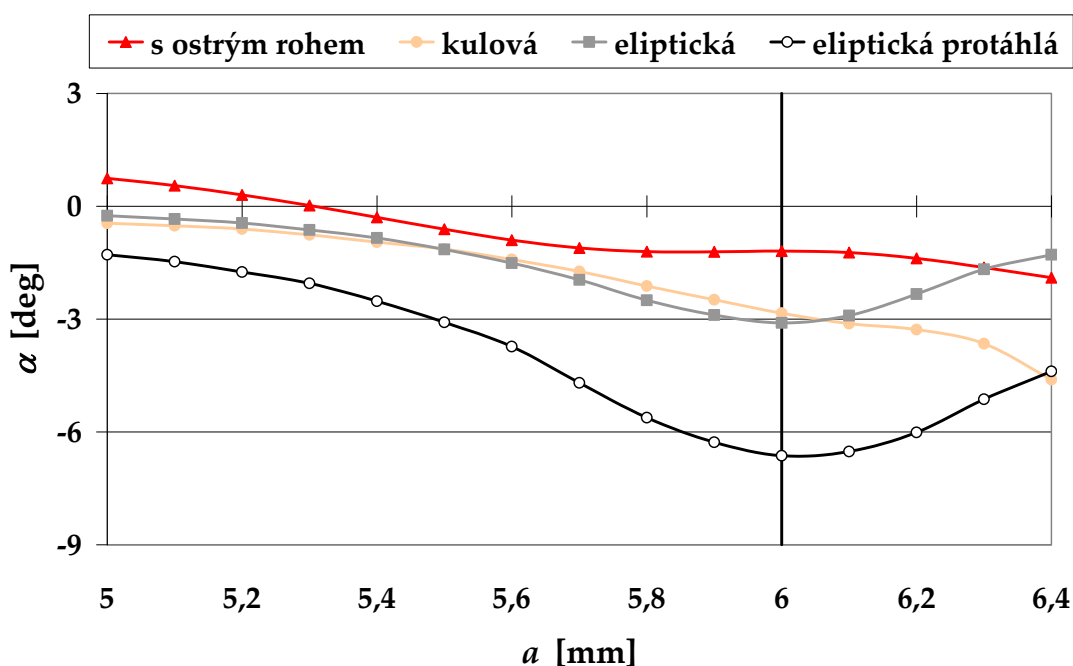
V dalším textu jsou prezentovány typické výsledky získané z výpočtu. Pro všechny tvary částic byly modelovány dvě základní situace, a to model obsahující mezivrstvu a model bez mezivrsty. Nejprve je tedy uveden graf závislosti směru šíření mikrotrhliny α na délce mikrotrhliny a pro různé tvary částic bez mezivrsty (obr. 5.25). Na tomto grafu je zřetelné, že až s výjimkou velmi protáhlé eliptické částice, je směr dalšího šíření mikrotrhliny α kladný. To má za následek, že se mikrotrhlina odklání od částice a má tendenci se šířit matricí a tuhým částicím se vyhýbat.



Obr. 5.25: Závislost směru šíření mikrotrhliny α na délce mikrotrhliny a pro různé tvary částic bez mezivrsty.

Na dalším grafu (obr. 5.26) je stejná závislost s tou odlišností, že model obsahuje třetí fázi; mezivrstvu. Na rozdíl od předchozích výsledků, zde můžeme vidět, že směr dalšího šíření mikrotrhliny α je v podstatě vždy

záporný. To znamená, že je mikrotrhlina šířící se v kompozitu tuhou částicí s poddajnou mezivrstvou přitahována.



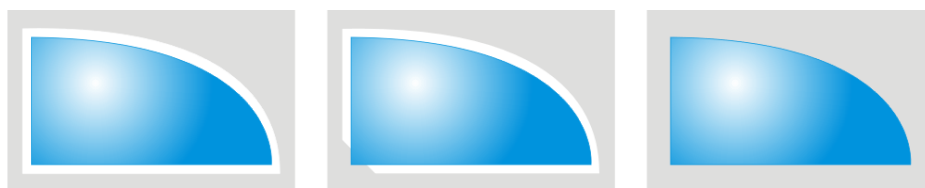
Obr. 5.26: Závislost směru šíření mikrotrhliny α na délce mikrotrhliny a pro různé tvary částic s mezivrstvou ($E_i = 0,4$ GPa).

To vede ke konečné konfiguraci, kdy mikrotrhlina proniká mezivrstvou a dochází k odtržení mezivrstvy, uvolnění částice a tím k otupení vrcholu samotné mikrotrhliny.

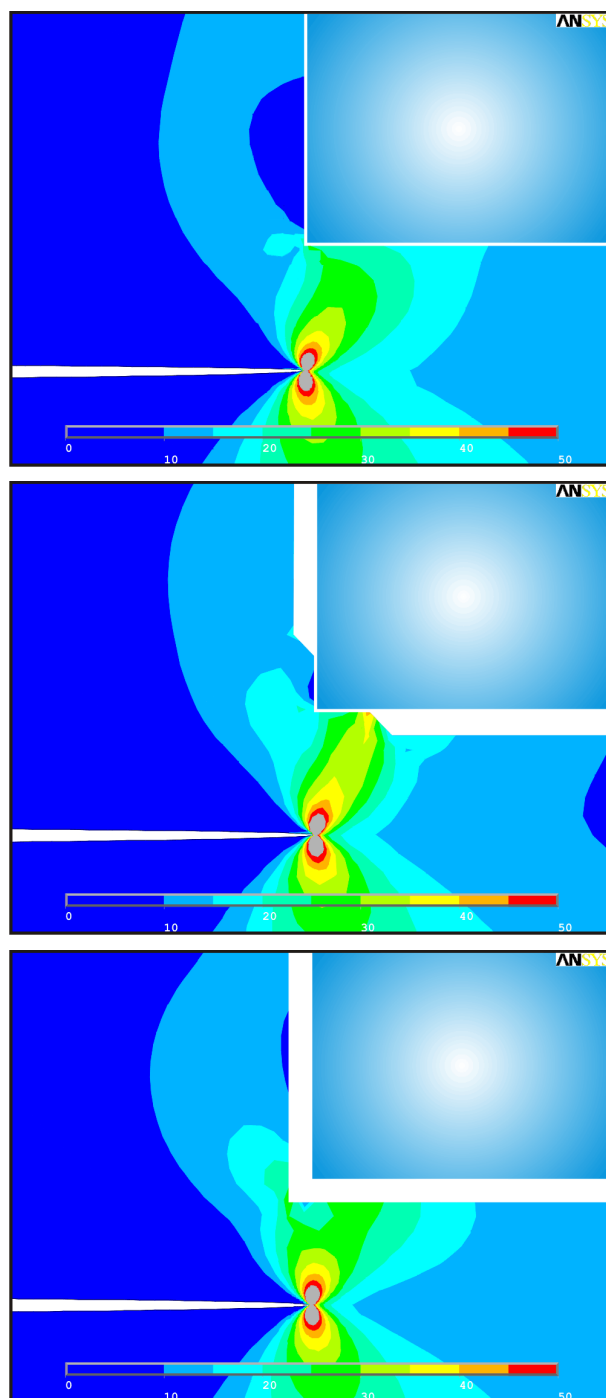
Z uvedených závislostí je rovněž patrné, že pokud je velikostní faktor přibližně 1, tvar částice nemá na změnu směru šíření mikrotrhliny významný vliv. To platí i pro částici s ostrým rohem. Zde ostrý roh sice mění napěťové pole kolem částice, pokud je ovšem částice dokonale mezivrstvou obstoupena, na výsledný trend (mikrotrhlina je přitahována) nemá tento další singulární koncentrátor podstatný vliv.

5.1.2.6 Vliv imperfekce mezivrstvy [xvii], [xxi]

Otázkou zůstává, co když není mezivrstva dokonalá nebo je v určitých místech zeslabená či dokonce chybí úplně. K tomuto byl opět sestaven model částice s mikrotrhlinou. Pro sledování trendů byla zvolena částice s ostrým rohem; a to s mezivrstvou, s částečnou mezivrstvou a bez mezivrstvy (obr. 5.27).



Obr. 5.27: Typy částic použité pro sledování vlivu imperfekce mezivrstvy.



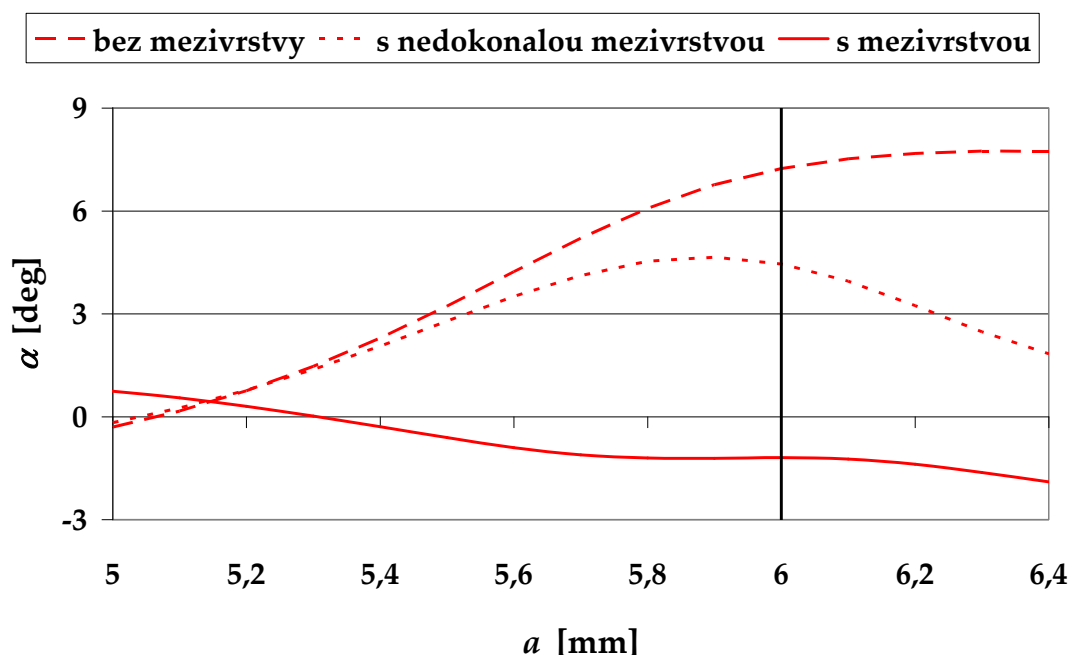
Obr. 5.28: Příklad rozdělení napětí v okolí vrcholu mikrotrhliny pro různé konfigurace.

Jak je patrné z obr. 5.29, přítomnost mezivrstvy hraje významnou roli při šíření mikrotrhliny v kompozitu. Pokud se mezivrstva v kompozitu vůbec nenachází, mikrotrhlina je při šíření od částice odpuzována a stále více se od ní odklání (částice má mnohem vyšší modul pružnosti než matrice).

V opačném případě se mezivrstva nachází kolem celé částice. Tato konfigurace neznamená, že by byla mikrotrhlina měkkou mezivrstvou doslova přitahována, nicméně tato mezivrstva tvoří dostatečný stínící efekt k tomu, aby mikrotrhlina nebyla od částice odpuzována. Při interakci mikrotrhliny a mezivrstvy dojde

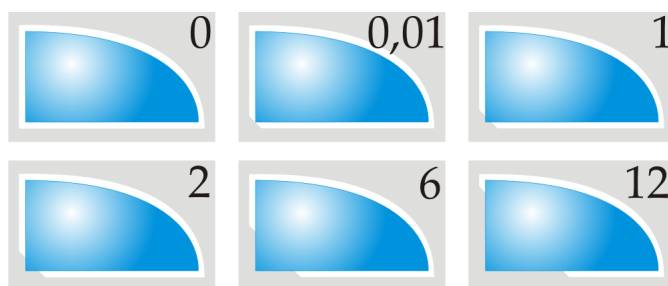
k odtržení částice od matrice. Tím zároveň dojde k otupení vrcholu mikrotrhliny a snížení napětí na vrcholu mikrotrhliny. To vše má pak za následek, že k dalšímu šíření mikrotrhliny je potřeba mnohem více energie.

Někde mezi těmito krajními případy se nachází třetí konfigurace, kdy mezivrstva není dokonalá a je v jednom místě porušená. Na uvedeném grafu (obr. 5.29) je tento stav prezentován prostřední tečkovanou křivkou. Je zde patrné, že chybějící mezivrstva nemá tak dokonalý stínící efekt a mikrotrhlina má tendenci se chovat jako v případě částice bez mezivrstvy. Pokud se ovšem mikrotrhlina nachází již pod částicí, mezivrstva zde začíná hrát podstatnou roli a opět dochází k interakci mikrotrhliny s částicí.



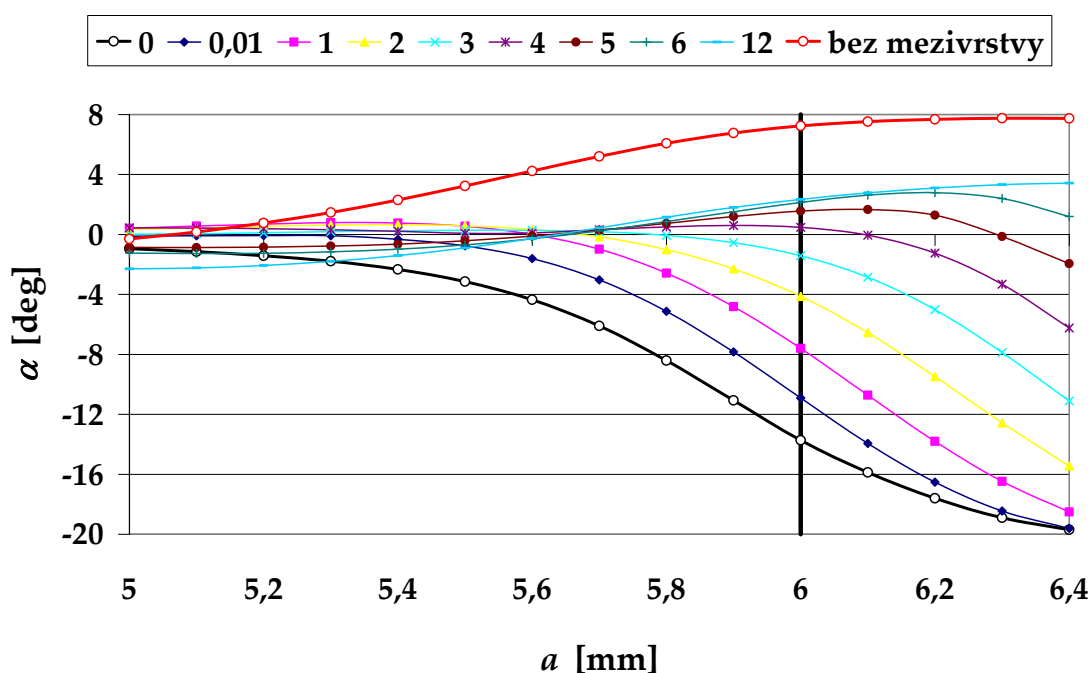
Obr. 5.29: Závislost směru šíření mikrotrhliny α na délce mikrotrhliny a pro různé typy částic ($E_i = 0,4$ GPa).

Další otázkou bylo, jestli takto zvolená konfigurace, kdy je odhalen právě roh částice a je tak vytvořen další koncentrátor napětí, nehraje podstatný vliv na určování dalšího směru šíření mikrotrhliny. Proto byly provedeny další výpočty s různou mírou nedokonalosti mezivrstvy, viz obr. 5.30 (uvedená čísla značí, jak velká část mezivrstvy chybí).



Obr. 5.30: Použité typy částic s různou mírou nedokonalosti mezivrstvy.

Výpočet byl proveden pro modul pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,05$ GPa a velikost částice odpovídala velikosti částice $D = 0,9$ μm . Výsledky jsou prezentovány na následujícím grafu (obr. 5.31). Jestliže je částice dokonale ošetřena a mezivrstva je proto po celém povrchu, dochází k výraznému přitahování mikrotrhliny k částici s mezivrstvou, a to již v poměrně velké vzdálenosti od částice. Oproti tomu je vidět, že už při malém poškození mezivrstvy dochází k ovlivnění směru dalšího šíření mikrotrhliny. Zejména pak dochází ke zmenšení oblasti, ve které je mikrotrhlina ovlivněna stínícím efektem mezivrstvy, a tudíž je k částici přitahována. Při velkém poškození mezivrstvy (v našem případě 12) se již chování mikrotrhliny blíží situaci, jako by se zde mezivrstva už nevyskytovala.



Obr. 5.31: Závislost směru šíření mikrotrhliny α na délce mikrotrhliny a pro různé typy částic ($E_i = 0,05$ GPa).

5.2 Chování trhliny v blízkosti rozhraní

Cílem prací uvedených v následujícím textu je zejména ověřit si možnosti aplikací přístupů klasické a zobecněné LELM na řešení sledované problematiky. Jedná se zejména o možnosti odhadu lomových parametrů v případě obecných koncentrátorů napětí a jejich lomově-mechanický popis. V řadě případů je jako model takového koncentrátoru použit ostrý V-vrub případně trhlina s vrcholem na rozhraní dvou materiálů. Pozornost je rovněž věnována výpočtům souvisejícím s charakteristikami trhlín šířících se v okolí nehomogenit. Získané výsledky a poznatky jsou pak aplikovány na porušování kompozitních trubek. Uvedené práce tvoří nezbytnou část disertace a poznatky získané při řešení dále uvedených problémů byly využity při modelování a výpočtech vlastností částicového kompozitu. I když uvedené výpočty

a postupy z velké části časově předcházely analýze chování částicového kompozitu, jsou uvedeny z důvodů lepší čitelnosti práce až v závěru disertace.

V prvních člancích je navázáno na diplomovou práci [i], kde bylo studováno chování trhliny v blízkosti rozhraní dvou materiálů [ii], [iii], [v], [x]. Druhá oblast zájmu byla zaměřena na chování V-vrubu a spolehlivé určení směru dalšího šíření trhliny [iv], [viii]. Následovalo studium šíření trhlin ve vícevrstvých trubkách [vi], [ix], [xi], [xviii]. Další část se již zabývala samotnými částicovými kompozity, kde byly hledány nejvhodnější parametry pro výrobu částicových kompozitů s požadovanými výslednými vlastnostmi [vii], [xii], [xiii], [xiv], [xv], [xvi], [xvii], [xix], [xx], [xxi], [xxii].

V člancích [i], [ii], [iii], [v], [x] bylo ukázáno, že sama existence rozhraní má značný vliv na chování trhliny. Tento vliv je tím významnější, čím blíže se rozhraní trhliny nachází. Bylo studováno chování trhlin v povrchových vrstvách. Oproti chování trhlin v bimateriálovém tělese v případě tenkých povrchových vrstev namáhaných tahem neplatí tvrzení o závislosti stáčení trhliny k (případně od) rozhraní na hodnotě poměru materiálových parametrů vrstvy a podkladu. Dominantním chováním trhliny v tenké povrchové vrstvě za zvolených konkrétních okrajových podmínek (charakterizovaných zejména způsobem a orientací vnějšího namáhání) je tendence vedoucí k šíření trhliny kolmo na rozhraní.

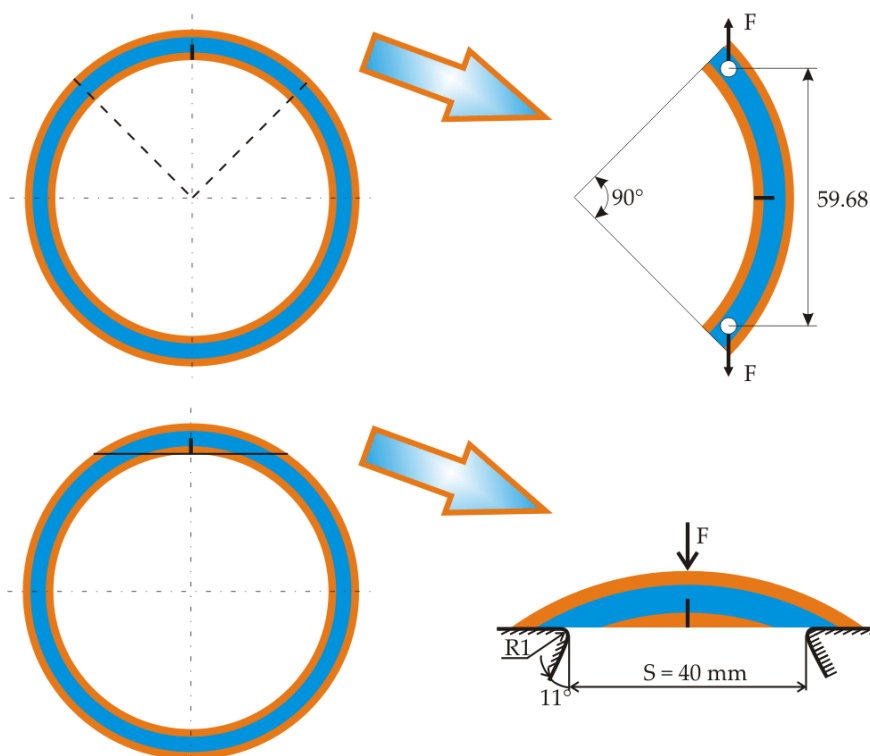
5.2.1 Vícevrstvé trubky

V technické praxi se stále častěji lze setkat s konstrukcemi z vícevrstvých materiálů, které využívají lepších vlastností kompozitního materiálu vzhledem k vlastnostem původních samostatných homogenních materiálů. Při posuzování lomového chování těchto součástí je nutné určit základní lomové parametry jednotlivých materiálových komponentů. V [vi] jsou analyzovány vzorky používané pro stanovení hodnot lomové houževnatosti polymerních materiálů pro konstrukce třívrstvé trubky používané pro rozvod vody a plynu [56]. Pozornost byla věnována zejména stanovování charakteristik materiálu střední vrstvy trubky, který je pro praktické využívání trojvrstvé trubky rozhodující.

Problematické jsou případy, kdy se vrchol trhliny nachází v těsné blízkosti materiálového rozhraní. Obecně platí, že v případě, kdy se trhlinka šíří z materiálu s menší hodnotou Youngova modulu pružnosti do materiálu tužšího, dochází v blízkosti rozhraní k poklesu hodnoty faktoru intenzity napětí a obráceně. Pro řešení problematiky trhlin s vrcholem na rozhraní je nutné využít zobecněné postupy lineárně-elastické lomové mechaniky. Na základě např. kritéria středního napětí je potom možné určit kritické aplikované

zatížení, při kterém trhlina projde přes rozhraní a začne se šířit v druhém materiálu [34].

V rámci práce byly navrženy dva typy zkušebních C-vzorků (pro zkoušku tříbodovým ohybem a zkoušku tahem, viz obr. 5.32), na kterých byla provedena analýza lomově-mechanického chování.



Obr. 5.32: Vzorky používané pro stanovení hodnot lomové houževnatosti polymerních materiálů.

Byly zjišťovány základní parametry LELM (tzn. součinitel intenzity napětí K a T-napětí, resp. parametr biaxiality B). Aplikací principů dvouparametrové lomové mechaniky bylo dokázáno, že přenos hodnoty lomové houževnatosti naměřené na navržených C-vzorcích (získaných z reálných trubek) dává konzervativní výsledky. Použití navržených C-vzorků při popisu lomového chování třívrstvých trubek dává výsledky, které vedou ke spolehlivým odhadům životnosti.

5.2.2 V-vruby

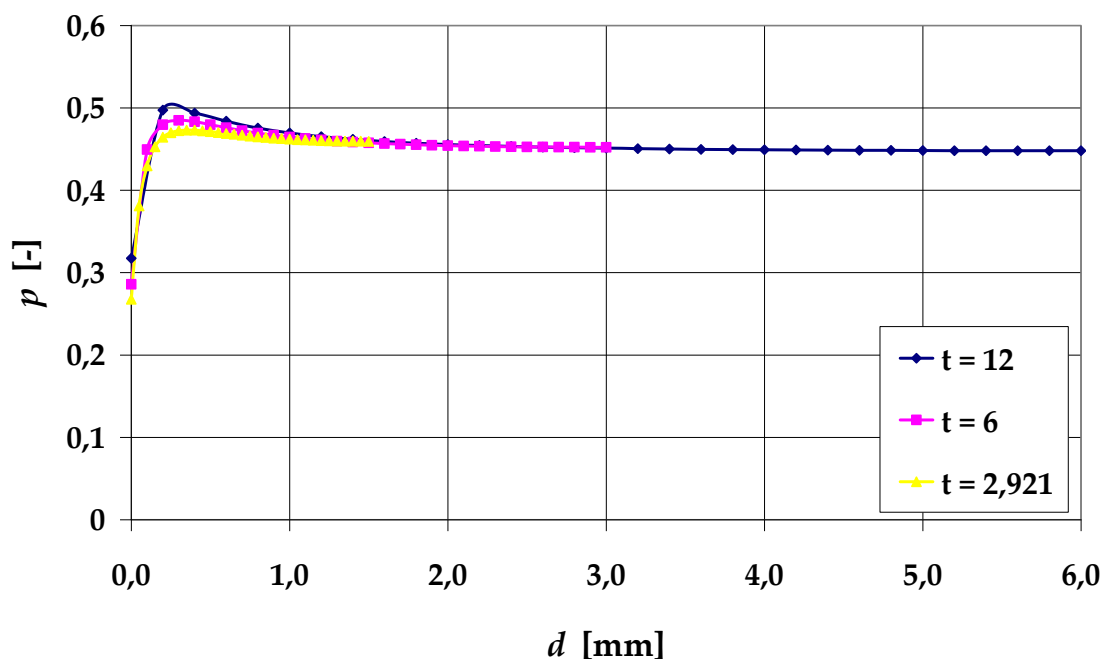
V [viii] je kladen důraz na změnu rozdělení napětí vyvolanou vlivem volného povrchu a je odhadován vliv této změny na chování trhliny šířící se z vrcholu V-vrubu. Interakce V-vrubu s volným povrchem může u součástí o malých tloušťkách způsobit změnu charakteru rozdělení napětí a v neposlední řadě i změnu exponentu singularity napětí. Běžně používaný popis V-vrubu získaný analyticky na základě klasického dvourozměrného řešení předpokládá

singularitu napětí typu $1/r^p$ [85] (platí pro ostrý V-vrub v homogenním materiálu). Napjatost u čela V-vrubu v blízkosti volného povrchu je ovšem složitější a musí se řešit jako prostorová úloha. Ukazuje se, že při interakci V-vrubu s volným povrchem se k výše uvedené singularitě typu $1/r^p$ superponuje tzv. rohová singularita typu $1/r^\lambda$ ($0 < \lambda < 1$), viz [2], [3], [7]. Proto tedy nelze použít klasický popis V-vrubu odvozený a platný pro singularitu typu $1/r^p$.

V literatuře [54] se uvádí, že analyticky určená hodnota exponentu singularity napětí je např. pro velikost V-vrubu 45° 0,456. Srovnáním této hodnoty s hodnotou získanou pomocí přímé metody na 2D modelu tělesa s V-vrubem (exponent singularity 0,4436) můžeme říci, že tento postup je dostatečně přesný. Rozdíl mezi analytickým řešením a přímou metodou se pohyboval u všech sledovaných konfigurací pod hranicí 5 %.

Při samotném sledování vlivu tloušťky tělesa na exponent singularity uvažujeme model s oboustranným V-vrubem. Geometrie modelu byla zvolena následovně: délka vzorku $L = 203,2$ mm, šířka $2w = 40,64$ mm, tloušťka $t = 2,921$ mm (pro porovnání bylo vše spočítáno ještě pro tloušťky 6 a 12 mm), hloubka vrubu $v = 5,08$ mm a celý vzorek byl zatížen aplikovaným zatížením $\sigma_{appl} = 10$ MPa.

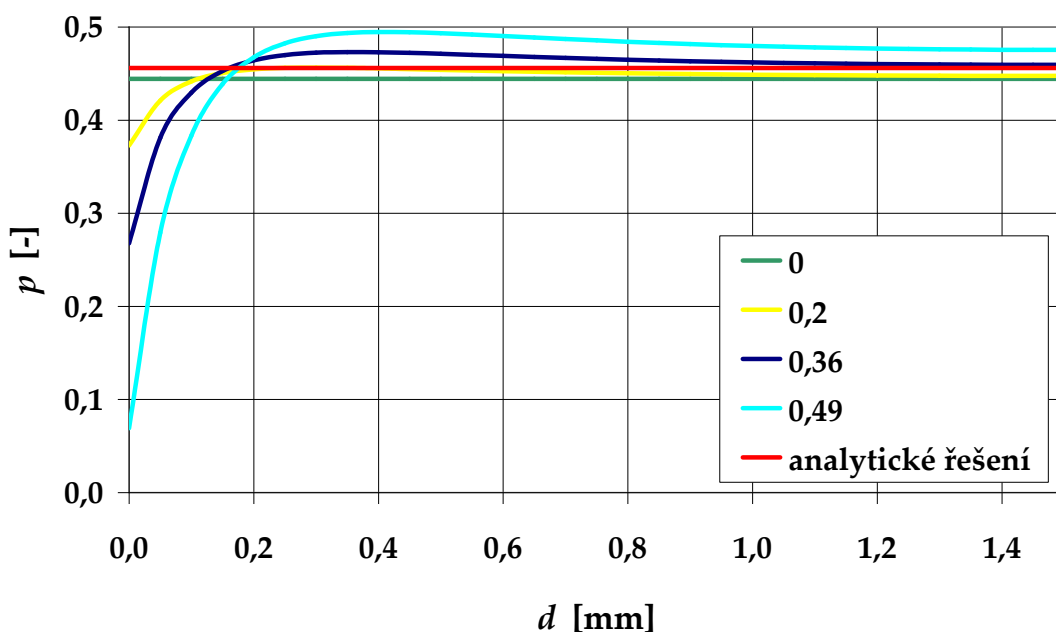
Na obr. 5.33 je vidět závislost změny velikosti exponentu singularity určeného pomocí přímé metody v závislosti na tloušťce vzorku. Celkem byly zkoumány tři vzorky s rozdílnou tloušťkou 3, 6 a 12 mm.



Obr. 5.33: Závislost singularity napětí p na vzdálenosti d od volného povrchu pro tloušťky tělesa 3, 6 a 12 mm.

Z grafu je patrné, že uprostřed vzorku velikost exponentu singularity odpovídá analytickému řešení 2D tělesa s V-vrubem. Když se blížíme k volnému povrchu ($d = 0$ mm), dochází ke změně singularity napětí a na volném povrchu je velikost exponentu singularity nejmenší. Zde je již dominantní rohová singularita. Z obr. 5.33 je vidět, že oblast, kde je vlivem volného povrchu singularita ovlivněna, je v tomto případě nezávislá na tloušťce tělesa. Oblast, kterou rohová singularita ovlivňuje, je tedy jednoznačně definována pouze velikostí Poissonova čísla. To je v souladu s experimentálním pozorováním [17] které ukazuje, že velikost ovlivněné oblasti závisí pouze na materiálu, nikoli na geometrii vzorku.

Pro $\nu = 0$ těleso s V-vrubem není ovlivněno existencí rohové singularity vůbec, pro materiály s Poissonovým číslem blízkým 0,5 je potom vliv volného povrchu na singulární chování maximální. Tyto výsledky jsou vidět na obr. 5.34.



Obr. 5.34: Závislost singularity napětí p na vzdálenosti d od volného povrchu pro různé hodnoty Poissonova čísla.

Pro Poissonovo číslo $\nu = 0$ je velikost singularity napětí v podstatě totožná s analytickým 2D řešením po celé tloušťce vzorku. To prokazuje, že vliv volného povrchu je v tomto případě zanedbatelný. S rostoucí velikostí Poissonova čísla klesá velikost rohové singularity a zároveň se zvětšuje oblast, kterou změna singularity ovlivňuje. Pro $\nu = 0,49$ pro sledovanou tloušťku vzorku se ani uprostřed třídimensionální řešení neztotožní se singularitou odpovídající 2D řešení. Pro takováto tělesa tedy nelze 2D aproximaci vůbec použít. Protože singularita roste směrem ke středu zkušební tělesa,

z V-vrubu se budou přednostně iniciovat trhliny ve středu tělesa, kde je singularita silnější.

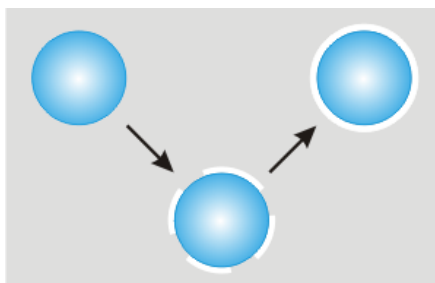
Důležitým závěrem je fakt, že pomocí přímých metod uvedených v [iv], [viii] dokážeme poměrně přesně odhadnout nejen hodnotu exponentu singularity pro 2D případ, ale především můžeme kvantitativně velmi dobře určit hodnotu exponentu singularity i pro složitější 3D tělesa. Ukazuje se, že hodnota exponentu singularity na povrchu tělesa je ovlivněna zejména Poissonovým číslem.

6 Shrnutí výsledků a jejich diskuze

Cílem předkládané práce bylo navrhnout model částicového kompozitu, který by zejména umožnil popsat a vysvětlit mechanismy jeho zhouževnatění v souvislosti s existencí mezivrstvy mezi částicemi a maticí. Model je zpracován numericky za pomoci metody konečných prvků pro specifické materiálové vlastnosti jednotlivých komponentů. Speciální pozornost je věnována odhadu mechanických vlastností reálné struktury odpovídající polymerní matici plněné částicemi CaCO_3 , pro kterou byly provedeny všechny výpočty.

Obecně je známo a evidentní, že pokud poddajnou matici vyztužíme tuhými částicemi, dojde k růstu celkového modulu pružnosti kompozitu. Zároveň ale poklesne lomová houževnatost - v podstatě dojde ke zkřehnutí kompozitu. Z hlediska mnoha aplikací je právě tento jev nežádoucí. Při plnění matrice tuhými částicemi se na rozhraní mezi maticí a částicí může iniciovat mezivrstva, která má rozdílné vlastnosti od matrice i částice, (obr. 6.1). Vznik a velikost mezivrstvy je zároveň ovlivněna technologickým procesem při výrobě kompozitu. Velikost a vlastnosti mezivrstvy mohou významně ovlivnit mechanické vlastnosti kompozitu, zejména pak jeho lomovou houževnatost.

částice CaCO_3 upravený CaCO_3



AKTIVACE CaCO_3

Obr. 6.1: Tvorba mezifáze mezi částicí a maticí.

S ohledem na komplexní hodnocení vlastností sledovaného částicového kompozitu jsou výsledky práce rozděleny do dvou hlavních částí: (i) z hlediska makroúrovně je to sledování vlivu jednotlivých složek na celkový modul pružnosti kompozitu, (ii) z hlediska mikroúrovně je to studium šíření mikrotrhliny v matici, její ovlivnění přítomnými částicemi a mezivrstvou a diskuze možnosti zhouževnatění částicového kompozitu. V souvislosti s předpokládanými aplikacemi kompozitu je jeho výsledné složení diktováno kompromisem mezi nárůstem (případně poklesem) hodnot celkového modulu pružnosti a související změnou hodnoty jeho lomové houževnatosti. K dosažení takto formulovaného cíle byly použity předpoklady a podmínky lineární lomové mechaniky. Tato skutečnost vyžadovala podrobný a pečlivý rozbor

zejména chování trhliny v okolí rozhraní dvou různých materiálů včetně odpovídající citlivostní analýzy v souvislosti s volbou odpovídajících sítí metody konečných prvků (MKP) při výpočtu základních lomově-mechanických parametrů. Na druhé straně mohou však být získané výsledky zatížené chybou vyvolanou nedostatečnou znalostí základních materiálových a geometrických parametrů popisujících zejména vlastnosti mezivrstvy. V tomto směru můžeme v některých případech hovořit pouze o trendech vedoucích k jednotlivým změnám v materiálových vlastnostech. Nicméně i tyto výsledky jsou významné a z hlediska přípravy materiálu s požadovanými vlastnostmi poskytují cenné návody. Řada výsledků, které byly získány výpočtem pro přesně definované vlastnosti částicového kompozitu polymerní matrice plněné částicemi CaCO_3 , mají obecný charakter a s určitými modifikacemi je lze aplikovat i pro jiné struktury. Poznamenejme rovněž, že některé ze získaných výsledků byly použity pro řešení aplikačních úloh souvisejících obecně s nehomogenními tělesy (např. kompozitní trubky).

6.1 Makroúroveň: Celkový modul pružnosti kompozitu

Z literatury jsou dobře známy analytické vztahy, které dokážou odhadnout modul pružnosti kompozitu, např. [11], [16], [26], [64]. Tyto vztahy jsou odvozeny za předpokladu, že se kompozit skládá pouze z matrice a částic. V případě existence mezivrstvy (experimentálně pozorované např. v pracích [45], [60], [61]) se ukazuje, že právě její vlastnosti (geometrické a materiálové) mohou významně ovlivnit celkové vlastnosti kompozitu, a je proto je nezbytné zahrnout ji do modelování a následných výpočtů. V řadě případů jsou vlastnosti mezivrstvy klíčové.

Nejprve byl vytvořen 3D model zahrnující pouze matrici a částici. Pomocí tohoto modelu bylo provedeno srovnání numerických výpočtů s výsledky získanými pomocí obecně uznávaných analytických vztahů (55)-(60). Jak je ukázáno na obr. 5.5, pomocí numerického modelování jsme schopni dosáhnout kvantitativně i kvalitativně dobré shody s těmito vztahy.

Následně byl navržen složitější model (obr. 5.3), který v sobě zahrnuje i třetí fázi; mezivrstvu. Na tomto modelu byl sledován vliv zejména velikosti částice a modulu pružnosti mezivrstvy na celkový modul pružnosti kompozitu. Z grafu na obr. 5.6 je zřejmý trend, kdy se při zvětšování velikosti částice zvětšuje také modul pružnosti kompozitu. To lze vysvětlit tak, že pokud uvažujeme tloušťku mezivrstvy konstantní, se zvětšením velikosti částic klesá procentuální zastoupení mezivrstvy v kompozitu, a tudíž dochází ke zvyšování vlivu samotné částice. Obecně platí, že se zvětšujícím se objemovým množstvím částic zároveň roste také celkový modul pružnosti. Lze ale nalézt určité případy, kdy tomu tak není. Na obr. 5.6 je vidět, že pro danou konkrétní konfiguraci, velikost částice $0,9 \mu\text{m}$ a modul pružnosti mezivrstvy $0,4 \text{ GPa}$

dochází k jevu, kdy se zvětšujícím se objemovým množstvím částic neroste celkový modul pružnosti kompozitu.

Na obr. 5.7 můžeme vidět vliv nejen velikosti částice, ale je zde také vliv modulu pružnosti mezivrstvy. Nejvyšších hodnot modulu pružnosti kompozitu dosahuje konfigurace bez mezivrstvy (křivka $E_i = 1,8$ GPa). Změna modulu pružnosti mezivrstvy výrazně ovlivňuje celkový modul pružnosti kompozitu. To je patrné pro obě uvedené velikosti částic. Čím poddajnější je mezivrstva, tím horší výsledky mechanických vlastností kompozitu dostáváme. Při konfiguraci velikost částice $14,58 \mu\text{m}$ a modul pružnosti mezivrstvy $0,4$ GPa dostáváme velice dobré hodnoty celkového modulu pružnosti kompozitu, dokonce se blíží hodnotám pro kompozit bez mezivrstvy. Díky tomu, že se zde vyskytuje relativně poddajná mezivrstva ($0,4$ GPa) a zároveň nedochází k výraznému poklesu celkového modulu pružnosti, zdá se být tato konfigurace jednou z možností, jak by se daly zlepšit lomové vlastnosti částicového kompozitu. Pokud máme takto velkou částici a mezivrstva je ještě poddajnější ($E_i = 0,05$ GPa), nedochází sice ke zvýšení modulu pružnosti kompozitu vzhledem k modulu pružnosti matrice (pro všechna objemová množství je přibližně $1,8$ GPa), ale takto poddajná mezivrstva výrazně ovlivňuje napjatost kolem částice a zejména pak podporuje zvýšení houževnatosti kompozitního materiálu.

Tento numerický model byl mírně modifikován pro studium vlivu tvaru částice na celkový modul pružnosti. Byly zvoleny tři tvary částic, které reprezentují jednotlivé geometrické tvary částic plniva. Těmi jsou: (i) kulový tvar (velikostní faktor 1), (ii) elipsoidní tvar (velikostní faktor 2) a (iii) elipsoidní s větším velikostním faktorem (velikostní faktor 6) (obr. 5.8). Výsledky za použití těchto definovaných tvarů jsou prezentovány na obr. 5.9, kde je zobrazena závislost modulu pružnosti kompozitu na modulu pružnosti mezivrstvy právě pro různé tvary částic. Z těchto křivek je patrné, že především částice s tvarovým faktorem 6 mohou výrazněji ovlivnit hodnotu celkového modulu pružnosti kompozitu. A to jak pozitivně tak i negativně. Částice s takto velkým tvarovým faktorem jsou silně závislé na orientaci vzhledem ke směru zatěžování. Proto lze vyslovit doporučení, že pokud se v matrici vyskytují částice s velikostním faktorem přibližně 1–2, je možné je považovat při výpočtu za kulaté. Při samotné výrobě kompozitu bychom se pak měli snažit vyhnout částicím s velikostním faktorem 5 a více. Tyto částice se sice běžně v kompozitu nevyskytují, k jejich tvorbě však může docházet vlivem nedokonalé dispergace částic (tvorba agregátů a aglomerátů, viz kap. 4.2).

S nedokonalou dispergací částic v kompozitu při samotné výrobě souvisí sledování vlivu nerovnoměrnosti rozložení částic v matrici. K tomuto účelu byl navržen model bez mezivrstvy (obr. 5.10a, b). Celý výpočtový model (obr. 5.10b) obsahoval 27 reprezentativních objemových buněk; RVE

(obr. 5.10a). Byla provedena celá řada simulací, kdy se postupně zmenšoval počet částic při zachování celkového objemového množství částic. Příklad takového modelu je na obr. 5.11. Jedna sada výsledků z těchto simulací je uvedena v grafu na obr. 5.12. Je zde vidět, že s klesajícím počtem částic v modelu roste rozptyl získaných hodnot celkového modulu pružnosti kompozitu. Avšak i při malém počtu částic nedochází k výrazným odchýlkám hodnot a můžeme říci, že výsledné hodnoty modulu pružnosti kompozitu se pohybují v rozmezí +/- 5 % od hodnot pro rovnoměrné rozložení částic v matici. Tento fakt vede k závěru, že pokud nedochází k opravdu velkým shlukům (tvorbě agregátů či aglomerátů) jednotlivých částic, můžeme považovat rozložení částic v kompozitu za rovnoměrné.

6.2 Mikroúroveň: Interakce mikrotrhliny s částicemi a její vliv na zhouževnatění kompozitu

Základním předpokladem navrženého modelu zhouževnatění je stínící efekt mezivrstvy a jeho vliv na chování mikrotrhlin šířících se v matici. Proto byla věnována velká pozornost vlivu základních geometrických a materiálových parametrů mezivrstvy na interakci mezi mikrotrhlinami a částicemi. I v tomto případě byla použita metodika lineární lomové mechaniky a interakce mezi částicemi a mikrotrhlinami byla sledována pomocí kritérií založených zejména na znalosti hodnot faktoru intenzity napětí pro normálový a smykový mód. Lze jistě diskutovat oprávněnost tohoto postupu zejména v oblasti materiálových vlastností (rozšíření na plastické a viskoelastické materiály apod.). S ohledem na nedostatečné a neúplné znalosti těchto parametrů (zejména v případě mezivrstvy) však nebylo toto rozšíření zatím realizováno.

Obecně převládá názor, že přidáním tuhých částic plniva (např. CaCO_3 , slída) do poddajnější matrice (např. polyolefín, PA) dojde ke zkřehnutí výsledného kompozitu. Některé studie ovšem potvrzují, že může k nárůstu houževnatosti u polymerů plněných tuhými částicemi opravdu docházet, např. [91]. Jedním z možných aspektů zhouževnatění studovaného částicového kompozitu je ovlivnění interakce mikrotrhlin s částicemi změnou vlastností mezivrstvy.

Pro odhad vlivu částic na chování mikrotrhliny v kompozitu byl navržen model mikrotrhliny obklopený čtyřmi částicemi (obr. 5.13). Celý příklad byl modelován jako 2D úloha. Ukázka konečno-prvkové sítě spolu s okrajovými podmínkami je uvedena na obrázku 5.14. Pro všechny použité modely platí dva základní předpoklady: (i) rovnoměrné rozložení částic v matici a (ii) dokonalá adheze mezi maticí, částicí a mezivrstvou.

V první řadě byl určen vliv umístění mikrotrhliny v matici (poměr e/c v obr. 5.13) na směr dalšího šíření mikrotrhliny. Ten je vyjádřen v grafu na obr. 5.15. V případě mikrotrhliny umístěné blíže jedné částic je určitý vliv

patrný, ovšem k zcela zásadnímu ovlivnění dochází u mikrotrhliny umístěné v těsné blízkosti částice (poměr $e/c = 0,9$). Zde mají silný vliv i materiálové vlastnosti částice. Pokud se v kompozitu mezivrstva vůbec nenachází, mikrotrhlina je tuhou částicí odpuzována. Na druhou stranu, pokud je mezivrstva velmi poddajná, tvoří stínící efekt; tzn. minimalizuje vliv tuhé částice, v určitých případech dokáže mikrotrhlinu k tuhé částici i přitahovat. Na obr. 5.15 je zřetelné, jak dokáže poddajná mezivrstva zcela změnit směr dalšího šíření mikrotrhliny. V případě mikrotrhliny v blízkosti částice je hodnota úhlu změny směru šíření mikrotrhliny α pro kompozit bez mezivrstvy přibližně 14° a pro kompozit s mezivrstvou 2° . V obou případech to jsou kladné hodnoty, tudíž dochází k odklonu mikrotrhliny od částice, nicméně hodnota 2° je v podstatě zanedbatelná a lze konstatovat, že v daném případě není mikrotrhlina částicí téměř ovlivněna (především není odpuzována).

V dalších výpočtech byla soustředěna pozornost především na mikrotrhlinu v blízkosti částice s mezivrstvou a tyto výsledky jsou rovněž prezentovány.

Jak se ukázalo, mezi hlavní veličiny ovlivňující směr dalšího šíření mikrotrhliny v matici kompozitu patří modul pružnosti kompozitu E_i (tloušťka mezivrstvy byla brána jednotná a to 117 nm [45]). V důsledku toho byl studován vliv modulu pružnosti mezivrstvy, navíc v souvislosti s velikostí částic. Výsledky jsou uvedeny na obr. 5.16. Z těch je zřejmé, že pokud jsou uvažovány velké částice ($D = 100 \mu\text{m}$), přítomnost mezivrstvy nemá na směr šíření mikrotrhliny takřka žádný vliv a dochází vždy k odpuzování mikrotrhliny částicí. Se zmenšující se velikostí částic roste zároveň vliv mezivrstvy, ten je dobře vidět pro případ částice o velikosti $D = 0,9 \mu\text{m}$. Zde se hodnota úhlu směru šíření mikrotrhliny α pohybuje v rozmezí od 10° (mikrotrhlina je odpuzována) pro $E_i = 1,8 \text{ GPa}$ až po -25° (mikrotrhlina je přitahována) pro $E_i = 0,05 \text{ GPa}$. Ke přitahování mikrotrhliny k částici dochází rovněž v případě velikosti částice $D = 5 \mu\text{m}$ a modulu pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,05 \text{ GPa}$.

S ohledem na výše uvedené výsledky byl blíže studován případ částice o velikosti $D = 0,9 \mu\text{m}$, kde byl sledován pro celou délku mikrotrhliny vliv různých hodnot modulů pružnosti mezivrstvy E_i na směr dalšího šíření α . Na obr. 5.17 jsou vykresleny nejzajímavější výsledky. Celý graf je ohraničen dvěma křivkami, shora je to pro případ kompozitu bez mezivrstvy, zespodu pak křivkou odpovídající nejmenší hodnotě modulu pružnosti mezivrstvy E_i . Tři zbývající křivky pro hodnoty $E_i = 0,3 \text{ GPa}$, $E_i = 0,4 \text{ GPa}$ a $E_i = 0,5 \text{ GPa}$ tvoří při dané konfiguraci přechodovou část, kde v případě $E_i = 0,5 \text{ GPa}$ je mikrotrhlina ještě nepatrně odpuzována, ale v případě $E_i = 0,3 \text{ GPa}$ je již nepatrně přitahována. S rostoucí délkou mikrotrhliny se pro tyto případy hodnoty α příliš nemění, na rozdíl od krajních křivek. Zde s rostoucí délkou mikrotrhliny výrazně roste úhel α ať do kladných hodnot pro kompozit bez

mezivrstvy či do záporných pro případ mezivrstvy s modulem pružnosti $E_i = 0,05$ GPa.

Dále byl vyjádřen směr šíření mikrotrhliny α jako funkce modulu pružnosti mezivrstvy E_i pro konkrétní konfiguraci ($D = 0,9 \mu\text{m}$, $a/b = 0,78$, $e/c = 0,9$ a $V_f = 25\%$), viz obr. 5.19. Se snižující se hodnotou E_i se mění zároveň i hodnota α . Postupně klesá k nule, a přibližně pro modul pružnosti mezivrstvy $E_i = 0,38$ GPa dojde k tomu, že mikrotrhlina začíná být přitahována. S dalším snižováním E_i výrazně klesá i hodnota α . Podobná hodnota modulu pružnosti mezivrstvy se dá najít pro jakoukoliv konfiguraci.

Kromě vlivu mezivrstvy byl také studován vliv směru zatížení kompozitu na chování mikrotrhliny v matrici. Výsledky (obr. 5.22) těchto výpočtů přinesly závěr, že směr dalšího šíření mikrotrhliny α je ve skutečnosti pouze superpozicí vlivu mezivrstvy a homogenního případu. To prakticky znamená, že má mikrotrhlina tendenci stáčet se do směru kolmého na zatížení, a to je korigováno vlivem mezivrstvy na směr šíření mikrotrhliny.

Ke studiu různých tvarů částic a možného vlivu na chování mikrotrhliny byl vytvořen zjednodušený konečno-prvkový model s mikrotrhlinou a jednou částicí (obr. 5.23). S ohledem na pozorování reálně používaných plniv byly navrženy kromě kulové částice ještě další tři tvary (obr. 5.24). Byl proveden výpočet kompozitu bez mezivrstvy i s mezivrstvou.

U kompozitu bez mezivrstvy (obr. 5.25) se ukázalo, že se zmenšující se vzdáleností vrcholu mikrotrhliny od částice roste hodnota úhlu směru dalšího šíření, je mikrotrhlina stále více odpuzována. Výjimku zde tvoří eliptická silně protáhlá částice, kdy je mikrotrhlina k této částici přitahována. Tento jev lze vysvětlit tím, že samotný plochý tvar částice značně mění napjatost v okolí částice a může tak zastiňovat vliv tahového napětí kolmého na částici. Co se týče rozdílů získaných výsledků z hlediska tvaru částic, lze vyslovit závěr, že v podstatě nezáleží, jestli je částice kulová nebo eliptická (velikostní faktor 1–2). Částice s ostrým rohem vykazuje nejhorší vlastnosti, mikrotrhlina má v tomto případě tendenci se odklánět již ve značné vzdálenosti od částice.

Pokud se kolem částice vyskytuje mezivrstva (obr. 5.26), pro všechny uvedené tvary plniva je hodnota α záporná, tzn. mikrotrhlina je přitahována. I v tomto případě se chová mikrotrhlina v podstatě stejně pro kulovou i eliptickou částici plniva. Velice dobře z pohledu šíření mikrotrhliny v matrici vychází protáhlá eliptická částice, kde dochází k přitahování mikrotrhliny výrazným způsobem. Dokonce i v případě částice s ostrým rohem je vliv mezivrstvy silnější než samotný vliv ostrého rohu, který sám o sobě tvoří silný koncentrátor napětí.

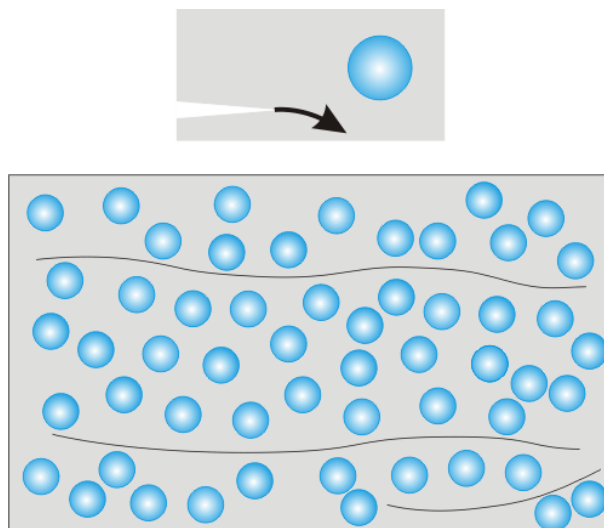
Z výše uvedených závislostí je patrné, že pokud je velikostní faktor přibližně 1, tvar částice nemá na změnu směru šíření mikrotrhliny významný vliv. To platí do značné míry také pro částice s ostrým rohem. Ostrý roh sice mění napěťové

pole kolem částice, v důsledku mezivrstvy, která dokonale kryje celou částici, však nemá na výsledný trend (mikrotrhlina je přitahována) tento další singulární koncentrátor napětí podstatný vliv.

Jak je uvedeno výše, jestliže je mezivrstva kolem částice s ostrým rohem dokonalá, tzn. dokonale obklopuje celou částici, nemá samotný vliv ostrého rohu podstatný význam pro chování mikrotrhliny v blízkosti takovéto částice. Nabízela se pochopitelně otázka, co když není mezivrstva dokonalá a např. při přípravě kompozitu je právě kolem ostrého rohu poškozená. Je ukázáno (obr. 5.29), že pokud je mezivrstva určitým způsobem porušena, mikrotrhlina má tendenci se se zvětšující velikostí chovat spíše jako by šlo o částici bez mezivrstvy. Pokud se ale vrchol mikrotrhliny nachází pod ostrým rohem, dochází pro případ částice s takto porušenou mezivrstvou ke zvětšování vlivu poddajné mezivrstvy a mikrotrhlina se naopak začíná chovat jako v případě částice s dokonalou mezivrstvou.

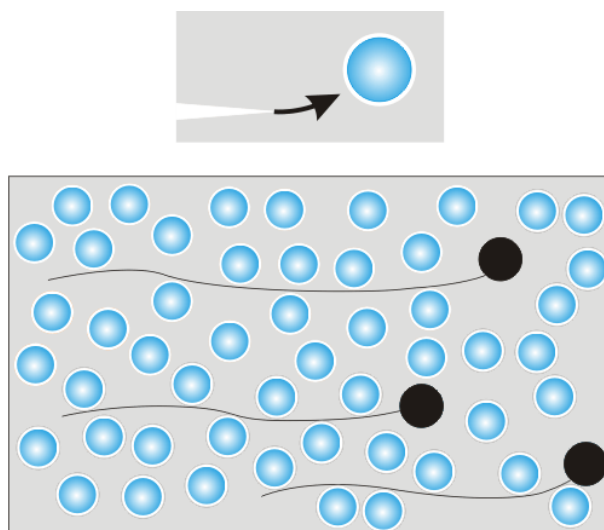
Poškození mezivrstvy ale může být různě velké, proto byly následně provedeny výpočty, které měli odhalit právě vliv velikosti poškození mezivrstvy na chování mikrotrhliny v matrici kompozitu. K větší přehlednosti výsledků (většímu rozptylu výsledných hodnot α) byla zvolena poddajnější mezivrstva ($E_i = 0,05$ GPa). Nejlepší výsledky z hlediska přitahování mikrotrhliny byly dosaženy pro částici s dokonalou mezivrstvou. Z výsledků však vyplývá (obr. 5.31), že již malé poškození mezivrstvy do značné míry ovlivňuje chování mikrotrhliny, tzn. vliv mezivrstvy je mnohem menší. Čím více je pak mezivrstva poškozena, dochází ve výsledcích k posunu jakoby ke konfiguraci kompozitu bez mezivrstvy.

Pokud je mezivrstva v kompozitu zanedbatelná, popřípadě se zde vůbec nenachází (obr. 6.2), mikrotrhliny se volně šíří matricí a tuhým částicím se mají tendenci vyhýbat. Takovýto kompozit má pak vynikající pevnostní charakteristiky, na druhou stranu z hlediska lomové houževnatosti je jeho použitelnost omezena.



Obr. 6.2: Šíření mikrotrhlin - kompozit bez mezivrstvy.

V případě kompozitu s částicemi pokrytými mezivrstvou (obr. 6.3) může její existence vyvolat stínící efekt. Dochází ke změně napjatosti v okolí částice tak, že je šířící mikrotrhlina přitahována k tuhé částici. Při kontaktu mikrotrhliny s mezivrstvou dochází k odtržení mezivrstvy a vytvoření dutiny. To má za následek otupení vrcholu mikrotrhliny, snížení koncentrace napětí v jejím okolí, poklesu hnací síly a v konečné fázi k jejímu zastavení (zakotvení). K jejímu dalšímu šíření je potřeba mnohem větší energie a to vede ke zlepšení lomových vlastností kompozitu. Tento efekt je v prostoru navíc spojen se zakotvením čela trhliny jednotlivými částicemi a jeho následným vyhýbáním (crack bowing). Čelo trhliny se stává komplikovanější a tvoří prostorovou křivku. Oba tyto procesy vedou ke zvýšení absorpce energie při šíření trhliny a tedy i ke zvýšení houževnatosti kompozitu a jsou ovlivnitelné skladbou jednotlivých jeho složek, přičemž klíčovou úlohu zde představují geometrické a materiálové vlastnosti mezivrstvy.



Obr. 6.3: Šíření mikrotrhlin - kompozit s mezivrstvou.

7 Závěr

Práce je věnována modelování procesů, které vedou ke zvýšení houževnatosti polyolefinové matrice přidáním submikroskopických částic CaCO_3 a to při zachování její tuhosti. Byl vytvořen model popisující chování počáteční mikrotrhliny v matrici s ohledem na geometrické a materiálové vlastnosti částic a matrice s uvážením existence mezivrstvy. Jako hlavní mechanismus zhouževnatění byl uvažován proces související s dekohezí matrice a částic plniva vyvolané interakcí mikrotrhlin a částic.

Cíle práce byly splněny, zejména pak byly dosaženy následující výsledky:

- (1) Byl vytvořen model částicového kompozitu, který popisuje relaci mezi tuhostí a jeho mikrostrukturou. Model byl navržen jako třífázové kontinuum včetně zahrnutí geometrických a materiálových vlastností matrice, částic a mezivrstvy.
- (2) Ke sledování makrovlastností, kterou je např. modul pružnosti, byl navržen 3D model - tzv. jednotková buňka (RVE), kde bylo možno díky využití symetrie modelovat pouze osminu částice. Z hlediska studování šíření mikrotrhlin v matrici byl navržen 2D model opět za využití symetrie.
- (3) Byl sestaven numerický postup založený na metodě konečných prvků, který umožňuje získat pomocí navrženého modelu parametry nezbytné pro popis lomově-mechanického chování studované struktury.
- (4) Na základě navrženého modelu byla popsána interakce mikrotrhliny a částice jako funkce materiálového složení (s důrazem na materiálové vlastnosti mezivrstvy) a geometrického uspořádání kompozitu. Byl sledován vliv objemového množství částic, velikosti a tvaru částic, dále pak vliv umístění mikrotrhliny v matrici kompozitu.
- (5) Byl kvantifikován vliv mezivrstvy (zejména pak tloušťky a materiálových vlastností) a vliv tvaru a velikosti částic na směr dalšího šíření mikrotrhliny.
- (6) Bylo analyzováno chování mikrotrhliny v blízkosti materiálových a geometrických nehomogenit, navíc s důrazem na vliv poškození mezivrstvy.
- (7) Byly provedeny modelové výpočty na mikro i makroúrovni pro reálné geometrické a materiálové parametry jednotlivých složek kompozitu (polypropylenová matrice a částice CaCO_3).
- (8) V rámci studia částicových kompozitů bylo studováno chování trhlin v blízkosti obecných koncentrátorů napětí.

Disertační práce navazuje na tradiční výzkum Ústavu fyziky materiálů AV ČR, v. v. i. v oblasti lomové mechaniky. Všechny výpočty z hlediska šíření mikrotrhlin byly provedeny na 2D modelech. V další fázi řešení by bylo vhodné vzít v úvahu prostorový tvar čela trhliny a tím uvážit ještě další aspekty zhouževnatění.

V této souvislosti poznamenejme, že byl podán postdoktorandský grantový projekt, který by měl navázat na výsledky této disertační práce. Zde by měl být kladen důraz především na spolehlivější určení vstupních materiálových veličin a následné modelování kompozitu pro reálnější materiálové modely.

Výsledky obsažené v této práci byly dosaženy v rámci řešení grantů:

- | | |
|----------------------|--|
| GAAV č. 1QS200410502 | Vlastnosti konstrukčních materiálů vyvíjených a v krátkodobém horizontu použitelných v dopravě, zdravotnictví a energetice |
| GAAV č. KJB200410803 | Zobecnění lineární elastické lomové mechaniky na problémy šíření trhlin v nehomogenních materiálech |
| GAČR č. 101/05/0227 | Studium lomového chování kompozitních trubek z polyolefinů |
| GAČR č. 101/05/0320 | Řešení obecných koncentrátorů napětí v anisotropních heterogenních prostředích pomocí kombinace MKP a techniky spojitě rozložených dislokací |
| GAČR č. 101/08/1623 | Inovační postupy pro odhad zbytkové životnosti těles s únavovými trhlinami |
| GAČR č. 106/05/H008 | Víceúrovňový design pokrokových materiálů |
| GAČR č. 106/06/P239 | Vliv volného povrchu na šíření únavové trhliny |
| GAČR č. 106/07/1284 | Houževnatost polyolefinových kompozitů se submikroskopickými částicemi |
| GAČR č. 106/08/1409 | Role struktury sesíťované polymerní matrice v částicovém kompozitu. Víceúrovňové modelování a experimentální ověření. |
| GAČR č. 106/09/H035 | Víceúrovňový design pokrokových materiálů |

8 Seznam použitého označení a zkratk

a	... délka trhliny
A_k	... koeficient Williamsova rozvoje
B	... faktor biaxiality
C, C_{1ij}, C_{2ij}	... konstanty
d	... definovaná vzdálenost před vrcholem trhliny
E	... Youngův modul pružnosti
E_{comp}	... celkový modul pružnosti kompozitu
E_i	... modul pružnosti mezivrstvy
E_m	... modul pružnosti matrice
E_p	... modul pružnosti částice
EPLM	... elesto-plastická lomová mechanika
$F^{(N)}$... síly působící na těleso
G	... hnací síla trhliny
H	... zobecněný faktor intenzity napětí
H_{IC}	... kritická hodnota zobecněného faktoru intenzity napětí
K_I, K_{II}, K_{III}	... faktory intenzity napětí pro jednotlivé módy zatěžování
K_{IC}	... lomová houževnatost
L	... lomově-mechanické veličiny
L_C, L_{IC}	... kritické hodnoty lomově-mechanických veličin
LELM	... lineárně-elastická lomová mechanika
MKP	... metoda konečných prvků
MTS	... „maximum tangential stress“ = maximální tangenciální napětí
p	... exponent singularity napětí
q	... parametr závislý na úhlu otevření V-vrubu
$D(R)$... velikost (poloměr) částice
r, θ	... polární souřadnice
r_0	... vzdálenost od kořene trhliny
r_p	... velikost (poloměr) plastické zóny
RVE	... „representative volume element“ = reprezentativní objem
S	... Sihův faktor hustoty deformační energie
S_c	... kritická hodnota Sihova faktoru hustoty deformační energie
SEM	... skenovací elektronový mikroskop
T	... T-napětí
t	... tloušťka mezivrstvy

V_f	... objemové množství částic
w	... hustota deformační energie
w_t	... charakteristický rozměr tělesa
α	... směr šíření trhliny
α_V	... úhel otevření V-vrubu
λ_k	... exponenty nekonečné řady
μ	... modul pružnosti ve smyku
ν	... Poissonovo číslo
Σ	... hodnotu (zobecněného) faktoru hustoty deformační energie
σ	... normálové napětí
σ_{appl}	... aplikované napětí
σ_{crit}	... kritická hodnota napětí
$\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}, \tau_{yx}$... složky tenzoru napětí
$\sigma_{\theta\theta}$... tangenciální napětí
$\bar{\sigma}$... střední hodnota napětí
σ_0	... mez kluzu
$\Phi(x, y)$... Airyho funkce napětí

9 Literatura

8.1 Vlastní publikované práce

- [i] Majer, Z.: *Numerická analýza růstu povrchové trhliny v ochranných vrstvách*, Diplomová práce FSI VUT v Brně, Brno, 2006
- [ii] Majer, Z.: *Numerická analýza růstu povrchové trhliny v ochranných vrstvách*, Problémy lomové mechaniky VI, Brno, pp. 51-58, 2006
- [iii] Šestáková, L., Majer, Z., Náhlík, L., Knésl, Z.: *Numerical Analysis of a Surface Crack in Protective Layers*, Engineering mechanics 2006, Svratka, pp. 348-349, 2006
- [iv] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L., Knésl, Z.: *Estimation of Critical Values for Crack Propagation from Sharp V-notch*, Engineering Mechanics 2007, Svratka, pp. 167-168, 2007
- [v] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L.: *Chování trhlín v tenkých ochranných vrstvách*, SEMDOK 2007, Súlov, Slovensko, pp. 84-87, 2007
- [vi] Šestáková, L., Majer, Z.: *Numerická analýza nehomogenních vzorků používaných pro měření lomově mechanických parametrů polyethylenu*, Křehký lom 2007, Brno, pp. 145-156, 2007
- [vii] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L., Knésl, Z.: *Influence of particles-matrix interphase on stress distribution in particulate composite with polymer matrix*, Applied and Computational Mechanics 2007, Vol. 1, Nečtiny, pp. 143-148, 2007
- [viii] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L.: *Influence of the Singularity Induced by the Free Surface on Behaviour of Thin Body with a V-notch*, Applied Mechanics 2007, Malenovice, pp. 155-156, 2007
- [ix] Šestáková, L., Majer, Z., Fiedler, L., Knésl, Z.: *K-Calibration of Specimens used for Lifetime Estimation of Multilayer Pipes*, 11. Problemseminar "Deformation und Bruchverhalten von Kunststoffen", poster num. 33 (4 p.), Merseburg, Německo, 2007
- [x] Majer, Z.: *Vliv materiálového rozhraní na změnu směru šíření trhliny*, Víceúrovňový design pokrokových materiálů 07, Ostrava, pp. 37-44, 2007
- [xi] Nezbedová, E., Fiedler, L., Majer, Z., Vlach, B., Knésl, Z.: *Fracture Toughness of Multi-layer Pipes*, Strength of Materials, Vol. 391, pp. 146-149, 2008
- [xii] Prod'Homme, G., Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L.: *The Effect of Particle Distribution in Polypropylene Composites on Mechanical Properties*, Applied Mechanics 2008, Wisla, Polsko, pp. 47-48, 2008

- [xiii] Hutař, P., Majer, Z., Náhlík, L., Šestáková, L., Knésl, Z.: *The Influence of Particle Size on the Fracture Toughness of PP-based Particle Composite*, Mechanics of Composite Materials, Vol. 45, pp. 281-286, 2009
- [xiv] Hutař, P., Majer, Z., Knésl, Z., Náhlík, L., Šestáková, L., Prod'Homme, G.: *Computational estimation of micro-crack behaviour in polypropylene copolymer*, 8th World Congress on Computational Mechanics WCCM8, Venice, Itálie, 2008 (CD)
- [xv] Nezbedová, E., Knésl, Z., Hutař, P., Majer, Z., Veselý, P.: *Effect of Particles Size and Density on Fracture Toughness of Polypropylene Particulate Composite*, 17th European Conference on Fracture, Brno, 1576-1583, ISBN 978-80-214-3692-3, 2008 (CD)
- [xvi] Hutař, P., Knésl, Z., Majer, Z., Prod'homme, G., Náhlík, L., Nezbedová, E., Veselý, P.: *Some aspects of particulate polymer composite behaviour*, Mechanika kompozitních materiálů a konstrukcí, Praha, pp.60-66, 2008
- [xvii] Knésl Z., Hutař P., Majer Z., Náhlík L.: *Particle shape effect on fracture toughness of PP-based composite*, 5th International conference on fracture of polymers, composites and adhesives, Les Diablerets, Švýcarsko, 2008 (abstract)
- [xviii] Majer, Z., Šestáková, L., Náhlík, L., Hutař, P., Knésl, Z.: *Numerical analysis of a crack approaching the interface of two dissimilar materials*, 13th International Conference Polymeric Materials, Halle/Saale, Německo, 2008 (abstract)
- [xix] Nezbedová, E., Knésl, Z., Hutař, P., Majer, Z., Veselý, P.: *Toughness versus stiffness of PP particulate composites*, 13th International Conference Polymeric Materials, Halle/Saale, Německo, 2008 (abstract)
- [xx] Nezbedová, E., Knésl, Z., Hutař, P., Majer, Z., Veselý, P.: *Modelling of fracture behaviour of PP particulate composites on micro level*, SAMPE Europe – SEICO 08, Paris, Francie, 2008 (CD)
- [xxi] Majer, Z., Knésl, Z., Hutař, P.: *Vliv tvaru částice na změnu směru šíření trhliny v částicovém kompozitu*, Víceúrovňový design pokrokových materiálů 2008, Velké Bílovice, pp.35-42, 2008
- [xxii] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L., Knésl, Z.: *The influence of loading direction on micro-crack behaviour in polymer composite*, Applied and Computational Mechanics 2008, Vol. 2, Nečtiny, pp. 285-290, 2008
- [xxiii] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L.: *Numerické modelování částicového polymerního kompozitu: vliv tvaru*, Applied Mechanics 2009, Bratislava, Slovensko, pp. 61-62, 2009

- [xxiv] Nezbedová, E., Hutař, P., Knésl, Z., Náhlík, L., Majer, Z., Pospíšil, L.: *Toughness versus stiffness of particulate composites: experimental approaches and modeling*, 15th International Conference on Composite Structures, Porto, Portugalsko, 2009, Zasláno do Composite Structures
- [xxv] Hutař, P., Náhlík, L., Majer, Z., Knésl, Z.: *The effect of particle properties on crack behaviour in polymer composites*, CMAS 2009, Bratislava, Slovensko, na CD, 2009
- [xxvi] Majer, Z., Hutař, P., Náhlík, L., Knésl, Z., Nezbedová, E.: *Crack Behaviour in Polymeric Composites Filled by Rigid Particles*, 12th International Conference on Fracture, Ottawa, Canada, 2009

8.2 Použitá literatura

- [1] Anderson, T., L.: *Fracture Mechanics Fundamentals and Applications* (2nd edition), CRC Press, London, 1995
- [2] Bažant, Z., P., Estenssoro, L. F.: *Surface singularity and crack propagation*, International Journal of Solids and Structures, Vol.15, pp. 405-429, 1979
- [3] Benthem, J., P.: *State of stress at vertex of a quarter-infinite crack in half-space*, International Journal of Solids and Structures, Vol.13, pp. 479-492, 1977
- [4] Bohatý, P.: *Beta izotaktický polypropylen*, Disertační práce, FSI VUT Brno, 2004
- [5] Brdička, M.: *Mechanika kontinua*, Nakladatelství ČSAV Praha, 1959
- [6] Ciullo, P., A.: *Industrial minerals and their uses: a handbook and formulary*, Noyes Publication, USA, pp. 605, 1996, ISBN 0-8155-1408-5
- [7] Dauge, M.: „Simple“ corner-edge asymptotic, Internet publication, <http://www.maths.univ-rennes1.fr/dauge/publis/corneredge.pdf>, 2000
- [8] Demjén, Z., Pukánszky, B., Nagy, J.: *Evaluation of interfacial interaction polypropylene/surface treated CaCO₃ composites*, Composites Part A, Vol. 29, pp. 323-329, 1998
- [9] Divišová, L.: *Vliv jemnosti plniv na strukturu zkušebních objektů z PP*, Diplomová práce, FCH VUT Brno, 2004
- [10] Dubnikova, I., L., Berezina, S., M., Antonov, A., V.: *Effect of rigid particle size on the toughness of filled polypropylene*, Journal of Applied Science, Vol. 94, pp. 1917-1926, 2004
- [11] Einstein, A.: *Investigation on theory of Brownian movement*, New York: Dover, 1956
- [12] Erdogan, F., Sih, G., C.: *On the Crack Extension in Plates under Plane Loading and Transverse Shear*, Journal of Basic Engineering, Vol. 85, pp. 519-527, 1963
- [13] Fekete, E., Pukánszky, B.: *Surface coverage and its determination: Role of acid-base interactions in the surface treatment of mineral fillers*, Journal of Colloid and Interface science, Vol. 194, pp. 269-275, 1997
- [14] Fu, S.-Y., Feng, X.-Q., Lauke, B., Mai, Y.-W.: *Effects of particle size, particle/matrix interface adhesion and particle loading on mechanical properties of particulate-polymer composites*, Composites: Part B, Vol. 39, pp. 933-961, 2008
- [15] Gdoutos, E., E.: *Problems of mixed mode crack propagation*, The Netherlands, Martinus Nijhoff, 1984
- [16] Guth, E.: *Theory of filler reinforcement*, J. Apply. Phys., Vol. 16, pp. 20-25, 1945
- [17] Heyder, M., Kun, G.: *3D fatigue crack propagation: Experimental studies*, International Journal of Fatigue, Vol. 28, pp. 627-634, 2006

- [18] Hsieh, C., L., Tuan, W., H.: *Elastic properties of ceramic-metal particulate composites*, Materials Science and Engineering A, Vol. **393**, pp. 133-139, 2005
- [19] Hutař, P.: *Dvoupárametrový popis malých trhlin ovlivněných polem napětí obecných koncentrátorů*, Disertační práce, FSI VUT Brno, 2004
- [20] Chambers, A., C., Hyde, T., H., Webster, J., J.: *Mixed mode fatigue crack growth at 550_C under plane stress conditions in jethete M152*, Engineering Fracture Mechanics, Vol. **39**, pp. 603-619, 1991
- [21] Ingraffea, A., R., Manu, C.: *Stress-intensity factor in three dimensions with quarter-point elements*, International Journal of numerical methods, Vol. **15**, pp. 1427-1445, 1980
- [22] Irwin, G., R.: *Onset of Fast Crack Propagation on High Strength Steel and Aluminium Alloys*, Sagamore Research Conference Proceedings, Vol. **2**, pp. 289-305, 1956
- [23] Jančář, J., Dibenedetto, A., T., Dianselmo, A.: *Effect of Adhesion on the Fracture Toughness of Calcium Carbonate-Filled Polypropylene*, Polymer Engineering and Science, Vol. **33**, pp. 559-563, 1993
- [24] Jančář, J.: *Kompozitní materiály (1.část)*, FCH VUT Brno, pp. 1-193, 2003, ISBN 80-214-2443-5
- [25] Karger-Kocsis, J.: *Polypropylene: an A-Z reference*, Novel corp., Springer-verlag, 1999
- [26] Kerner, E., H.: *The elastic and thermoelastic properties of composite media*, Proc. Phys. Soc. B, Vol. **69**, pp. 808-813, 1956
- [27] Khan, S., M., A., Khraisheh, M., K.: *Analysis of mixed mode crack initiation angles under various loading conditions*, Engineering Fracture Mechanics, Vol. **67**, pp. 397-419, 2000
- [28] Kim, G.-M., Michler, G., H.: *Micromechanical deformation processes in toughened and particle-filled semicrystalline polymers: Part 1. Characterization of deformation processes in dependence on phase morphology*, Polymer, Vol. **39**, pp. 5689-5697, 1998
- [29] Kiss, A., Fekete, E., Pukánszky, B.: *Aggregation of CaCO₃ particles in PP composites: Effect of surface coating*, Composites Science and Technology, Vol. **67**, pp. 1574-1583, 2007
- [30] Knésl, Z., Hutař, P., Seitzl, S.: *Výpočet faktoru intensity napětí metodou konečných prvků*, Výpočty konstrukcí metodou konečných prvků, pp. 69-80, 2002
- [31] Knésl, Z.: *The application of the strain energy density concept to the determination of a crack propagation direction initiated at a sharp notch tip*, ACTA TECHNICA ČSAV, Vol. **38**, pp. 221-234, 1993
- [32] Knésl, Z., Knápek, A.: *Lomově – mechanický popis trhliny s vrcholem v bi-materiálovém rozhraní*, Inženýrská mechanika 96, pp. 71-76, Svratka, 1996

- [33] Knésl, Z., Kubáček, K., Bednář, K.: *Evaluation of the biaxiality parameter using the finite element method*, Acta Technica CSAV, Vol. **42**, pp. 175-201, 1997
- [34] Knésl, Z., Bednář, K.: *Dvoupárametrová lomová mechanika - výpočet parametrů a jejich hodnoty*, Ústav fyziky materiálů, Brno, 1998
- [35] Knésl, Z., Náhlík, L., Radon, J., C.: *Influence of interface on fatigue threshold values in elastic bimaterials*, Computational Materials Science, Vol. **28**, pp. 620-627, 2003
- [36] Knésl, Z.: *A criterion of V-notch stability*, International Journal of Fracture, Vol. **48**, pp. 79-83, 1991
- [37] Kunz, J.: *Základy lomové mechaniky*, Vydavatelství ČVUT, Praha, 1994
- [38] Labour, T. et al.: *Influence of the beta crystalline phase on the mechanical properties of unfilled and CaCO₃ filled polypropylene*, Polymer, Vol. **42**, pp. 7127-7135, 2001
- [39] Larsson, S., G., Carlsson, A., J.: *Influence of non-singular stress terms on small scale yielding at crack tips in elastic-plastic materials*, Stockholm, 1972
- [40] Leever, P., S., Radon, J., C.: *Inherent stress biaxility in various fracture specimen geometries*, International Journal of Fracture, Vol. **19**, pp. 311-325, 1982
- [41] Liang, J. Z.: *Evaluation of dispersion of nano-CaCO₃ particles in polypropylene matrix based on fractal Method*, Composites: Part A, Vol. **38**, pp. 1502-1506, 2007
- [42] Ma, Ch., G., Mai, Y., L., Rong, M., Z., Ruan, W., H., Zhang, Q., Z.: *Phase structure and mechanical properties of ternary polypropylene/elastomer/nano-CaCO₃ composites*, Composites Science and Technology, Vol. **67**, pp. 2997-3005, 2007
- [43] Manu, C.: *Quarter-point elements for curved crack fronts*, Computers & Structures, Vol. **17**, pp. 227-231, 1983
- [44] Michler, G., H., Baltá-Calleja, F., J.: *Mechanical Properties of Polymer based on Nanostructure and Morphology*, CRC Press, pp. 784, 2005, ISBN 1574447718
- [45] Móczó, J., Fekete, E., Pukánszky, B.: *Acid-base interactions and interphase formation in particulate-filled polymers*, The Journal of Adhesion, Vol. **78**, pp. 861-875, 2002
- [46] Móczó, J., Pukánszky, B.: *Polymer micro and nanocomposites: Structure, interactions, properties*, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Vol. **14**, pp. 535-563, 2008
- [47] Moore, E., P. et al.: *Polypropylene Handbook - Polymerisation, Charakterization, Properties, Applications*, Hanser Publisher, Munich, 1996
- [48] Murakami, Y. and Co-editors: *Stress intensity factors handbook*, Vol. **1**, The Society of Mat. Science & Elsevier Science, 1987
- [49] Murakami, Y. and Co-editors: *Stress intensity factors handbook*, Vol. **2**, The Society of Mat. Science & Elsevier Science, 1987

- [50] Murakami, Y. and Co-editors: *Stress intensity factors handbook*, Vol. 3, The Society of Mat. Science & Elsevier Science, 1992
- [51] Murakami, Y. and Co-editors: *Stress intensity factors handbook*, Vol. 4, The Society of Mat. Science & Elsevier Science, 2001
- [52] Murakami, Y. and Co-editors: *Stress intensity factors handbook*, Vol. 5, The Society of Mat. Science & Elsevier Science, 2001
- [53] Náhlík, L., Knésl, Z., Klusák, J.: *Crack initiation criteria for singular stress concentrations – An Application to a Crack Touching a Bimaterial Interface*, Engineering MECHANICS, Vol.15, pp. 99-114, 2008
- [54] Náhlík, L.: *Odhad hodnoty exponentu singularity napětí a prahového napětí pro šíření trhliny přes rozhraní dvou ortotropních materiálů*, Problémy lomové mechaniky VI, pp. 59-68, 2006
- [55] Náhlík, L.: *Šíření únavových trhlin v okolí rozhraní dvou elastických materiálů*, Disertační práce, FSI VUT Brno, 2002
- [56] Nezbedová, E., Knésl, Z., Vlach, B., Lach, R., Grellmann, W.: *Fracture Behaviour of Three-layer PE-HD Pipe*, Proceedings of the 11th Problem seminar: Deformation and fracture behaviour of plastic materials, 2007, Merseburg
- [57] Obadal, M.: *Asistovaná krystalizace polymerů*, Habilitační práce, UTB Zlín, 2005
- [58] Owen, D., R., J., Fawkes, A., J.: *Engineering Fracture Mechanics: Numerical Methods and Applications*, Pineridge Press Ltd, Swansea, U.K., 1983
- [59] Pian, T., H., H., Moriya, K.: *Numerical method in fracture mechanics*, Swansea University Press, Swansea, pp. 363-373, 1978
- [60] Pukánszky, B., Tudos, F.: *Indirect determination of interphase thickness from the mechanical properties of particulate filled polymers*, Controlled Interphases in Composite Materials, pp. 691-700, 1990
- [61] Pukánszky, B.: *Interfaces and interphases in multicomponent materials: past, present, future*, European Polymer Journal, Vol. 41, pp. 645-662, 2005
- [62] Pukánszky, B.: *Polypropylene: Structure, blends and composites*, Vol. 1, pp.224, 1995, ISBN 0412614200
- [63] Qian, J., Fatemi, A.: *Mixed Mode Fatigue Crack Growth: A Literature Survey*, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 55, pp. 969-990, 1996
- [64] Ravichandran, K., S.: *Elastic Properties of Two-Phase Composites*, Journal of the American Ceramic Society, Vol. 77, pp. 1178, 1994
- [65] Renne, K., Yang, M., S., Móczó, J., Choi, H., J., Pukánszky, B.: *Analysis of the debonding process in polypropylene model composites*, European Polymer Journal, Vol. 41, pp. 2520-2529, 2005
- [66] Rice, J., R.: *A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentrations by Notches and Cracks*, Journal of Applied Mechanics, Vol. 35, pp. 379-386, 1968

- [67] Rokle, D., P., Cartwright, D., J.: *Stress intensity factors*, The Hillington Press, London, 1976
- [68] Rotheron, R., N.: *Particulate-Filled Polymer Composites* (2nd Edition), Rapra Technology Ltd., Shawsbury (UK), pp. 542, 2003, ISBN: 1-85957-382-7
- [69] Sadd, M., H.: *Elasticity: Theory, Applications and Numerics*, Elsevier, USA, 2005, ISBN 0-12-605811-3
- [70] Seitzl, S.: *Dvoupárametrový popis směru šíření únavových trhlin při kombinovaném namáhání*, Soutěž vědeckých a výzkumných prací doktorandů FSI –2001, Brno 2001, na CD
- [71] Sih, G. C.: *Mechanics of Fracture Initiation and Propagation*, Kluwer, 1991
- [72] Sih, G. C.: *Mechanics of Fracture. Methods of analysis and solutions of crack problems (Volume 1)*, Noordhoff International Publishing, Leyden, 1973
- [73] Sih, G., C., Barthelemy, B., M.: *Mixed-mode fatigue crack growth predictions*, Engineering Fracture mechanics, Vol. **13**, pp. 439-451, 1980
- [74] Sih, G., C.: *A special theory of crack propagation*, Mechanics of Fracture, Noordhoff Intern. Publishing, 1977
- [75] Sih, G., C.: *Strain-energy-density factor applied to mixed mode crack problems*, International Journal of Fracture, Vol. **10**, pp. 305-321, 1974
- [76] Sih, G., C., Ho, J., W.: *Sharp notch fracture strength characterized by critical energy density*, Theoretical and Applied Fracture Mechanics, Vol. **16**, pp. 179-214, 1991
- [77] Sládek, J., Sládek, V.: *Evaluations of the T-stress for interface cracks by the boundary element method*, Engineering Fracture Mechanics, Vol. **56**, pp. 813-825, 1997
- [78] Sokolnikov, I., S.: *Mathematical Theory of Plasticity* (2nd edition), New York, 1956
- [79] Sugimura, Y., Lim, P., G., Shih, C., F., Suresh, S.: *Fracture Normal to a Bimaterial Interface: Effects of Plasticity on Crack-tip Shielding and Amplification*, Acta metal. mater., Vol. **43**, pp. 1157-1169, 1995
- [80] Suresh, S., Sugimura, Y., Ogawa, T.: *Fatigue Cracking in Materials with Brittle Surface Coatings*, Scripta METALLURGICA et MATERIALIA, Vol. **29**, pp. 237-242, 1993
- [81] Theocaris, P., S., Kardomateas, G., A., Andrianopoulos, N., P.: *Experimental study of the T-criterion in ductile fractures*, Engineering Fracture Mechanics, Vol. **17**, pp. 439-447, 1982
- [82] Tong, P., Pian, T., H., H., Orringer, O.: *Fracture mechanics analysis with hybrid "crack" finite elements*, Cambridge, 1978
- [83] Veselý, P.: *Houževnatost polyolefinových kompozitů se submikroskopickými částicemi*, Disertační práce, FSI VUT Brno, 2008
- [84] Vlk, M.: *Mezní stavy a spolehlivost*, Nakladatelství VUT v Brně, Brno, 1991
- [85] Williams, M., L.: *On the stress distribution at the base of a stationary crack*, Journal of Applied Mechanics, Vol. **24**, pp. 109-114, 1957

- [86] Wu, W., Zhang, X., Chen, J., Shen, S.: *Synthesis of nano-CaCO₃, composite particles and their application*, Journal of University of Science and Technology Beijing, Vol. **15**, Num. 1, pp. 67-74, 2008
- [87] Wu, X., Li, X.: *Analysis and modification of fracture criteria for mixed mode crack*, Engineering Fracture Mechanics, Vol. **34**, pp. 55-64, 1989
- [88] Wypych, G.: *Handbook of fillers* (Second Edition), ChemTec Publishing, Canada, pp. 831, 2000, ISBN 1-859198-19-4
- [89] Zebarjad, S., M., Tahan, M., Sajjadi, S., A.: *Influence of filler particles on deformation and fracture mechanism of isotactic polypropylene*, Journal of Materials Processing Technology, Vol. **155-156**, pp. 1459-1464, 2004
- [90] Zuiderduin, W., C., J., Westzaan, C., Huétink, J., Gaymans, R., J.: *Toughening of polypropylene with calcium carbonate particles*, Polymer, Vol. **44**, pp. 261-275, 2003
- [91] Zuiderduin, W., C., J.: *Toughening of polypropylene with calcium carbonate particles*, Polymer, Vol. **44**, Issue 1, pp. 261-275, 2003

Curriculum vitae

Jméno: Zdeněk Majer, Ing.
Datum narození: 29. května 1983
Adresa: Jívavská 6b, Šternberk 785 01
Telefon: +420 532 290 362
Rodinný stav: svobodný
Národnost: česká
E-mail: majer@ipm.cz

VZDĚLÁNÍ:

2006 - 2009 Doktorské studium na Ústavu mechaniky těles, mechatroniky a biomechaniky FSI VUT v Brně a Ústavu fyziky materiálů Akademie věd ČR v. v. i., téma disertační práce:
Lomově-mechanický model částicového kompozitu

2001 - 2006 FSI VUT v Brně, obor: Aplikovaná mechanika, téma diplomové práce:
Numerická analýza růstu povrchové trhliny v ochranných vrstvách
Studium ukončeno státní závěrečnou zkouškou dne 14. 6. 2006.

1994 - 2001 Gymnázium Šternberk, Horní náměstí 5, Šternberk.
Studium ukončeno maturitou dne 11. 6. 2001.

ODBORNÁ PRAXE:

2006 - 2009 Člen řešitelského týmu doktorských projektů GAČR č. 106/05/H008 a GAČR č. 106/09/H035: Víceúrovňový design pokrokových materiálů a spolupracovník na několika grantových projektech GAČR a GAAV.
Vyučující předmětu Pružnost a pevnost II na FSI VUT v Brně.

OCENĚNÍ:

09/2008 3. místo na soutěži posterů mezinárodní konference 5th International conference on fracture of polymers, composites and adhesives, Les Diablerets, Švýcarsko.