460 2次元多相系高分子材料の性能評価

Characterization of Two phase polymers

○ 正 西村 良弘 (物質研) 正 奥田 敏 (物質研)
正 永井 英幹 (物質研)

Yoshihiro NISHIMURA, National Institute of Materials and Chemistry, Higashi, Tsukuba

Osamu OKUDA, National Institute of Materials and Chemistry

Hideki NAGAI, National Institute of Materials and Chemistry

Key Words: Composite Materials, Polymerblend, Periodical function, Elasticity

1. 緒論

高分子複合材料は、分布状態や界面の構造等の影響で、その材料性能は大きく変化する。このようなスケールの構造は光学顕微鏡や、電子顕微鏡、X線像等で観察することができるが、このようにして観察された材料の構造と材料性能との関係を画像処理技術を使って定性的あるいは定量的に捉えようとする試みが行われるようになってきた。

本報告では、複合系を簡単のため、まず2次元分布としフーリエ変換し、歪みと分布関数の周波数成分における関係を計算し、複合系の相当材料定数行列をもとめることを試み、その有効性を議論した。

2. 理論解析

材料 α 中に弾性定数の異なる材料 β が分布しているとし、このとき分布関数 ρ を式(1)の様に考える。

$$\rho = \rho(x, y) \quad (1)$$

このような異物が多数材料中に分布しているとすると、それぞれの弾性定数行列を K_α, K_β とすると、弾性定数行列の分布 D_k は分布 ρ_k の関数であり式(2)のようになる。

$$D(\vec{x}) = (1 - \rho)D_\alpha + \rho D_\beta \quad (2)$$

系全体の、弾性定数行列の直流分 D_0 と交流分 D_1 に分解すると、それぞれ式(3)、式(4)のようになる。

$$D_0 = \frac{1}{V} \int D(\vec{x}) dV \quad (3)$$

$$D_1(\vec{x}) = D(\vec{x}) - D_0 \quad (4)$$

ここで、式(5)の様に分布関数 ρ をフーリエ変換すると、弾性定数行列は式(10)によって式(11)、(12)のようになる。なお、式(6)・(9)の置き換えを行った。

$$\rho(\vec{x}) = \sum_{lm} (\rho_{sslm} ss_{lm} + \rho_{cslm} cs_{lm} + \rho_{sclm} sc_{lm} + \rho_{cclm} cc_{lm}) \quad (5)$$

$$ss_{lm} = \frac{1}{\pi} \sin lx_1^* \sin mx_2 \quad (6)$$

$$cs_{lm} = \frac{1}{\pi} \cos lx_1^* \sin mx_2 \quad (7)$$

$$sc_{lm} = \frac{1}{\pi} \sin lx_1^* \cos mx_2 \quad (8)$$

$$cc_{lm} = \frac{1}{\pi} \cos lx_1^* \cos mx_2 \quad (9)$$

$$D(\vec{x}) = D_\alpha + (D_\beta - D_\alpha)\rho(\vec{x}) \quad (10)$$

$$D_0 = D_\alpha + (D_\beta - D_\alpha)\rho_0 \quad (11)$$

$$D_1 = (D_\beta - D_\alpha) \sum_{lm \neq 0} (\rho_{sslm} ss_{lm} + \rho_{cslm} cs_{lm} + \rho_{sclm} sc_{lm} + \rho_{cclm} cc_{lm}) \quad (12)$$

のようになる。同様に、マクロな歪み ϵ_0 とミクロな歪み ϵ_1 を式(13)、(14)のように考える。

$$\epsilon_0 = \int \epsilon(\vec{x}) dV \quad (13)$$

$$\epsilon_1(\vec{x}) = \epsilon(\vec{x}) - \epsilon_0 \quad (14)$$

系全体についての内部エネルギー ψ は式(15)の(1)・(2)のように表される。

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{2} \int_\Omega \epsilon^T D \epsilon dV \\ &= \frac{1}{2} \int_\Omega \epsilon_0^T D_0 \epsilon_0 + 2\epsilon_1^T D_1 \epsilon_0 + \epsilon_1^T (D_0 + D_1) \epsilon_1 dV \end{aligned} \quad (15)$$

すると、求めるべきひずみ分布は、Lagrangeの未定係数法⁽³⁾によって式(16)に示す汎関数の停留条件として求められる。ここで λ はLagrangeの未定係数であり、変位 u_1, u_2 と未定係数 λ について停留させればよい。

$$I = \frac{1}{2} \int_\Omega \epsilon^T D \epsilon dV - \lambda f(\epsilon) \quad (16)$$

ここで $f(\epsilon) = 0$ は境界条件である。

ϵ_1 を変数としてこの変分を求めると式(17)のようになる。

$$\delta I = \int_\Omega \delta \epsilon_1 [D_1 \epsilon_0 + (D_0 + D_1) \epsilon_1] dV + \delta \lambda f(\epsilon_1) + \lambda \delta f(\epsilon_1) \quad (17)$$

Fig1の系を考える。変位およびひずみはマクロ材料物性に関するマクロ変位およびマクロひずみとミクロな材

料物性に関するマイクロ変位およびマイクロひずみに分けて考えることができる。格子点はマイクロ変位、マイクロひずみの影響を受けないと考えられる。また系の対称性から界面の中点はやはり界面の中点に変位すると考えられるのでやはりマイクロ変位、マイクロひずみの影響を受けない。

Fig.1 Micro structure in Periodical structure
マイクロ変位ベクトル u_1 についての境界条件は式(18)のようになる。

$$u_1(\pm\pi, \pm\pi) = u_1(0, \pm\pi) = u_1(\pm\pi, 0) = 0 \quad (18)$$

ここで、マイクロ変位 u_1 を式(19)のように表わす。

$$u_1(x_1, x_2) = \sum_{l,m>0} u_{1lm}^{cs} cs_{lm} + u_{1lm}^{sc} sc_{lm} + u_{1lm}^{ss} ss_{lm} \quad (19)$$

これにより境界条件式(18)は自動的に満たされる。するとマイクロひずみ ϵ_1 は式(20) - (26)のようになる。

$$\epsilon_1 = \sum_{l,m>0, j,k=s,c} \frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1jk}} u_{1lm}^{1jk} + \frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{2jk}} u_{1lm}^{2jk} \quad (20)$$

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1cs}} = \begin{pmatrix} -l \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ss_{lm} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ m \\ \frac{m}{2} \end{pmatrix} cc_{lm} \quad (21)$$

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1sc}} = \begin{pmatrix} l \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} cc_{lm} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ m \\ -\frac{m}{2} \end{pmatrix} ss_{lm} \quad (22)$$

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1cc}} = \begin{pmatrix} l \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} cs_{lm} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ m \\ \frac{m}{2} \end{pmatrix} sc_{lm} \quad (23)$$

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1cs}} = \begin{pmatrix} 0 \\ m \\ 0 \end{pmatrix} cc_{lm} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ l \\ -\frac{l}{2} \end{pmatrix} ss_{lm} \quad (24)$$

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1sc}} = \begin{pmatrix} 0 \\ -m \\ 0 \end{pmatrix} ss_{lm} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ l \\ \frac{l}{2} \end{pmatrix} cc_{lm} \quad (25)$$

$$\frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{1cc}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ m \end{pmatrix} sc_{lm} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ l \\ \frac{l}{2} \end{pmatrix} cs_{lm} \quad (26)$$

式(20)を、式(17)に代入して停留条件を求める、任意 δu_{1lm} に対しての式(27)が0となればよい。

$$\frac{\delta I}{\delta u_{1lm}^{ijk}} = \int \frac{\partial \epsilon_1}{\partial u_{1lm}^{ijk}} (D_1 \epsilon_0 + (D_0 + D_1) \epsilon_1) dV \quad (27)$$

結局、式(28)、(29)のようになる。

$$0 = B_{ss}^{lm} (D_1 \epsilon_0^{ss} \epsilon_0 + D_0 \epsilon_1^{ss} \epsilon_0 + (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{ss}) + B_{sc}^{lm} (D_1 \epsilon_0^{sc} \epsilon_0 + D_0 \epsilon_1^{sc} \epsilon_0 + (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{sc}) \quad (28)$$

$$0 = B_{cs}^{lm} (D_1 \epsilon_0^{cs} \epsilon_0 + D_0 \epsilon_1^{cs} \epsilon_0 + (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{cs}) + B_{cc}^{lm} (D_1 \epsilon_0^{cc} \epsilon_0 + D_0 \epsilon_1^{cc} \epsilon_0 + (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{cc}) \quad (29)$$

$$B_{ss}^{lm} = \begin{pmatrix} -l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{m}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{l}{2} \\ 0 & -m & 0 \end{pmatrix} \quad (30)$$

$$B_{cc}^{lm} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{m}{2} \\ 0 & m & 0 \\ l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{l}{2} \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$B_{cs}^{lm} = \begin{pmatrix} l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{l}{2} \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$B_{sc}^{lm} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{m}{2} \\ 0 & m & 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$(D_1 \epsilon_1)_{lm}^{jk} = \int D_1 \epsilon_1^{jk} dV \quad (34)$$

$$\begin{pmatrix} (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{ss} \\ (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{sc} \\ (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{cs} \\ (D_1 \epsilon_1)_{lm}^{cc} \end{pmatrix} =$$

$$\sum_{s,t} \begin{pmatrix} k_{lmst}^{cc1} & k_{lmst}^{cc2} & k_{lmst}^{cc3} & k_{lmst}^{cc4} \\ k_{lmst}^{cs1} & k_{lmst}^{cs2} & k_{lmst}^{cs3} & k_{lmst}^{cs4} \\ k_{lmst}^{sc1} & k_{lmst}^{sc2} & k_{lmst}^{sc3} & k_{lmst}^{sc4} \\ k_{lmst}^{ss1} & k_{lmst}^{ss2} & k_{lmst}^{ss3} & k_{lmst}^{ss4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{1st}^{ss} \\ \epsilon_{1st}^{sc} \\ \epsilon_{1st}^{cs} \\ \epsilon_{1st}^{cc} \end{pmatrix} \quad (35)$$

$$k_{lmst}^{jk1} = D_{l-s, m-t}^{jk} - D_{l-s, m+t}^{jk} - D_{l+s, m-t}^{jk} + D_{l+s, m+t}^{jk} \quad (36)$$

$$k_{lmst}^{jk2} = D_{l-s, m-t}^{jk} + D_{l-s, m+t}^{jk} - D_{l+s, m-t}^{jk} - D_{l+s, m+t}^{jk} \quad (37)$$

$$k_{lmst}^{jk3} = D_{l-s, m-t}^{jk} - D_{l-s, m+t}^{jk} + D_{l+s, m-t}^{jk} - D_{l+s, m+t}^{jk} \quad (38)$$

$$k_{lmst}^{jk4} = D_{l-s, m-t}^{jk} + D_{l-s, m+t}^{jk} + D_{l+s, m-t}^{jk} + D_{l+s, m+t}^{jk} \quad (39)$$

以上から、マイクロ変位 u_1 とマクロひずみ ϵ_0 の関係が求められた。さらに、式(20)によりマイクロひずみ ϵ_1 を求めることができるので、結局、式(40)の形でマイクロひずみ ϵ_1 とマクロひずみ ϵ_0 の関係行列 $E(D_0, D_1)$ が求められる。

$$\epsilon_1 = E(D_0, D_1) \epsilon_0 \quad (40)$$

これと式(15)によりマクロ材料定数行列 M を求めることができる。

$$M = D_0 + 2 \frac{1}{V} \int E^T D_1 dV + \frac{1}{V} \int E^T (D_0 + D_1) E dV \quad (41)$$

3. 結果および結論

●2次元分布系について、マクロ弾性定数行列を求める定式化を行った。

●フーリエ変換の次数と、弾性定数行列の関係について調べた。

4. 文献

- (1) 西村 良弘、此村 靖、中山 和郎、日本機械学会論文集A編、63 611 1475-1480, 1997
- (2) 例えば藤原邦男、振動と波動、80-83、サイエンス社、(1976)
- (3) た例えば、高橋 康、量子力学を学ぶための解析力学入門、講談社、1978