

第十届中国国际复合材料会议关于复合材料设计的 宏观力学、细观力学与微观力学的讨论和研究动向

蒋咏秋

(西安交通大学建工学院, 西安 710049)

1. 概况

国际复合材料会议是该领域水平最高的学术会议。自1975年召开第一届会议以来,每隔两年举行一次,迄今已举行了十届。第十届中国国际复合材料会议于1995年8月在加拿大温哥华北90哩的威士特勒(Whistler)举行,与会学者720人,来自40个国家。14名中国学者参加了本届会议。会议交流论文690篇,其中口头报告570篇,墙展120篇,大会邀请报告5篇。中国代表宣读论文12篇,墙展9篇,另加入文集论文13篇,共34篇,占论文总数的5.78%,仅次于美、英、日、加、德居第六位。根据国际复合材料会议执行委员的规定,中国在第六届至第九届被评审入选的论文累计达222篇,占论文总数的13%以上,因而获得会议13票表决权,仅次于美国居第二位。我作为会议国际顾问委员会的委员认为,授予中国如此多的表决权,表明中国在复合材料研究方面取得了显著成就,在这一高科技领域的国际地位大大提高。表决的结果,第12届中国国际复合材料会议将于1999年在法国巴黎举行,上届会议已决定第11届会议定于1997年在澳大利亚的不列斯本(Brisbane)举行。

2. 重点研究领域

在聚合物基复合材料(PMC)、金属基复合材料(MMC)及陶瓷基复合材料(CMC)分会场讨论到材料设计时都涉及到界面特征与控制问题,讨论热烈。另外还有专门讨论界面及界面层的论文28篇,设有专门的分会场。因此复合材料设计与界面的关系是会议讨论热点之一。

影响材料宏观力学性能最大的是界面。复合材料的界面已经不是原来设想的两相接触面几乎没有厚度的单分子层的面,它实质上是纳米级以上厚度的界面相(Interphase)或称界面层(Interface Layer)。因为在纤维与基体相接触时,即使不发生化学反应,也可能在基体固化时,由于残余应力的作用而使临近界面基体的局部结构发生于基体本体的变化。

这种残余应力主要是在基体固化时,由于两相材料的热膨胀系数及弹性系数不匹配而产生的热应力所造成的。在CMC界面层,这种热应力有可能高达以GPa计。这样大的残余应力,会使临近界面区损伤。用电镜(SEM)可清晰地观察到其损伤机理:基体产生桥接裂纹,纤维拔出和界面脱粘,其脱粘长度指向基体裂纹尖端逐渐减少。显然,残余应力的存在会严

重影响复合材料的宏观性能。为此，人们一直希望能定量地测定它的影响如何，这直接关系到材料设计。

在这次会议上，大家认为要定量确定残余应力对材料的宏观性能的影响，需要采取微观力学(Micromechanics)→细观力学(Mesomechanics)→宏观力学(Macromechanics)的途径来解决。但是困难很大：第一，界面层的厚度很小，只有5nm到30nm，属于微结构(纳米结构)，需弄清层内物质的化学组成、形态和分布，尽管可以用透射电镜(TEM)测定界面层的化学元素，但目前无法测定化合物。第二，界面层的物理表征更困难。因为界面层为纳米级的微区、属于微观力学，它的应用尺度在纳米(nanometer)，有别于细观力学，其应用尺度在微米(micrometer)，另一方面又在材料的内部，人们一直认为难于测定界面层的应力、应变和位移，它的弹性模量、泊松比也就无法确定了。

上述界面层应力及应变的测定，在会议上讨论很热烈。这个难题是属于微观力学。它是对一般固体材料在纳米尺度下力学行为的研究，包含纳米材料和纳米晶体。因此有人认为微观力学既然是研究纳米材料，则应属于纳米科学与技术。它是在纳米($1\text{nm}=10^{-9}$ 米)尺度上研究物质(包括原子，分子)的特性和相互作用，以及利用这些特性的多学科的高新科技。因而可以利用促使纳米科技发展的重要工具——扫描隧道显微镜(STM)来解决微观力学问题。

有人同意这样的看法，可用STM观察界面层表面的原子键结构，但必需是具有饱和性和方向性的共价键，而离子键则不具有这些特性。有人强调用STM观察界面层表面的原子结构，必须是导电的材料。而有不少CMC的界面层是不导电的。他认为在这种情况下，应改用原子力显微镜(AFM)，它是在STM基础上发展起来的其它扫描探针显微镜。AFM能控测针尖和样品之间相互作用力，也可达到原子级的空间分辨率，因而能测非导电体的原子键结构。

还有人补充说，用STM测界面层的原子结构，必须与空气不起作用，因为界面层如与空气起化学作用，会改变它的性质，在这种情况下可采用超高真空STM。

通过上面的讨论，利用STM或AFM观察界面层表面原子结构，测量具有方向性共价键的长度变化，来测量应力的方案是可行的。

西安交通大学的代表说，用STM测SiC/SiC复合材料的界面层往往得到的是不连续材料，有时也能得到犬牙交错锯齿状的界面结构，观察到的原子键结构不清晰，难于测定它的应变。界面层是第三相材料，受工艺参数(压力、温度、密度等)影响很大。估计控制工艺参数有可能获得具有连续性质的材料，以测出原子键结构，从而获得应变的数据。

会上美国明尼苏达大学航空与力学系的代表显示了清晰的五彩原子键结构图。他们是用巨型计算机(Supercomputer)模拟得出来的。他们改变了以往常用原子对势来描述原子间键合，认为势不能确切表达界面层的弹性模量，且当原子所处环境与规整晶格排列有偏差时，对势表达是不充分的。他们采用的是Daw和Baskes提出的原子镶嵌方法(Embedded Atom Method)。该法是对原子对势理论的一个有效修正，在势基础上，引入了原子所处位置密度对势能的影响。考虑了原子周围的晶格环境，为描述微观缺陷下原子运动提供了有效工具。

与会者认为采用大规模计算手段来模拟材料因微损伤的原子键结构是可行的，可以与用STM和AFM进行实测平行地进行，来测定应变。

另一方面，测定界面层的弹性模量，还需要应力的确定。此外，上面已提到界面层的该

项残余应力的大小与方向也会影响复合材料宏观性能。虽然已有许多力学模型可估算这种残余应力,但结果相差甚大。与会者认为,用激光拉曼光谱仪测量界面与相邻纤维的振动频率,根据纤维标定可确定界面层的残余应力,这是可行的测定方法。根据实测结果,可鉴定出合理的力学模型以估算残余应力。西安交通大学的代表补充说,他们分别用材料方法、弹性力学(广义平面应变及空间问题)建立了力学模型,并和激光拉曼光谱仪(LRS)测定的结果进行了比较,认为用三维轴对称的力学模型分析残余应力与实验结果吻合较好。

讨论中还一致认为,由于残余应力的存在而导致复合材料界面损伤是属于Ⅰ型和Ⅱ型的混合型断裂形式。但材料的断裂韧性与 K_1 及 K_2 (Ⅰ型及Ⅱ型的应力强度因子)有关,因而是 K_1 及 K_2 的二次幂函数;有人提出是 K_1/K_2 的函数。这涉及到纤维与基体,是属于细观断裂力学的范畴(Mesomechanics of fracture)。如考虑界面层的影响,就属于微观断裂力学。它们已形成断裂力学的一个新分支,不仅对复合材料的界面断裂分析很重要,而且对涂层材料分析与设计也很重要。至于复合材料的断裂韧性是宏观力学性能。

界面层残余应力的方向和大小,界面层的化学和物理性能,都与复合材料加工的工艺参数如压力、温度和密度等密切相关。因此,工艺参数与复合材料宏观性能密切相关。与会者认为,对复合材料进行设计,通过微观、细观、宏观力学的分析,以达到预期的宏观性能,一定要提出相应的工艺参数。

3. 建议

近年来,在国际上开展着争夺高科优势的激烈竞争,各国都在以先进复合材料为重点,研究高性能结构材料。为此,他们都在微观结构理论指导下大力进行材料设计,研究与应用工艺相结合,以发展现代材料科学技术。以美国为例,美国的国家科学基金会《项目指南》中明确提出复合材料设计的研究,其成果中必须有达到预期性能的相应的工艺参数,因此要求科技人员与新材料生产的公司密切配合。

为了跟踪和赶上现代材料科学技术的发展,建议我国加强扶植材料设计的研究领域,采用微观、细观与宏观力学相结合的路线,重点放在界面层的表征研究和界面层的控制及设计研究。在微结构的测试方面也要大力加强。有先进的界面分析设备(含STM、AFM、LRS等)的各研究单位要有机地组织起来,建议设立界面工程中心,形成网络,充分发挥这些先进仪器的作用。

对于复合材料界面层的化学表征及力学表征方面要作为重点课题进行,弄清界面层的化学组成(含化合物)和应力、应变与位移的测定。因为界面层的弹性模量和泊松比等影响材料宏观性能很大。其中界面层应变是根据原子键结构的测定,应与在原子分子水平上的计算机模拟相结合。如果在这方面能有所突破,我国在界面控制与设计进而在材料设计方面将能赶上并超过国际水平。

为了使科学技术迅速转化为生产力,建议国家自然科学基金会和国家863高科技委员会要求新材料设计的研究成果必须有达到材料预期的宏观性能的各项工艺参数。