



Doctoral Thesis

## Property predictions for short fiber and platelet filled materials by finite element calculations

**Author(s):**

Lusti, Hans Rudolf

**Publication Date:**

2003

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004554826> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

DISS. ETH NO. 15078

**Property Predictions for  
Short Fiber and Platelet Filled Materials by  
Finite Element Calculations**

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH  
for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by  
HANS RUDOLF LUSTI  
Dipl. Werkstoff-Ing. ETH  
born September 7, 1973  
citizen of Nesslau, SG

accepted on the recommendation of  
PD Dr. A.A. Gusev, examiner  
Prof. Dr. U.W. Suter, co-examiner  
Prof. Dr. P. Smith, co-examiner

2003

## ZUSAMMENFASSUNG

Eine neue, mächtige Finite-Elemente (FE) Simulationsmethode wurde kürzlich von Gusev entwickelt, die es erlaubt, die linear-elastischen, elektrischen, thermischen und Transport-Eigenschaften von mehrphasigen Werkstoffen, basierend auf realistischen 3D-Computermodellen, zu studieren. Im ersten Teil dieser Doktorarbeit wurde dieses neue Verfahren validiert, indem gemessene thermoelastische Eigenschaften mit den numerischen Voraussagen von FE-Modellen verglichen wurden, die aufgrund von mikrostrukturellen Daten von spritzgegossenen, kurzfaserverstärkten Zugproben generiert wurden. Die numerischen Voraussagen zeigten eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit allen gemessenen Eigenschaften. Die erfolgreiche Validierung erlaubte es dann, die Genauigkeit sowohl von den in der Praxis am weitesten verbreiteten mikro-mechanischen Modellen (Halpin-Tsai und Tandon-Weng) zur Voraussage der elastischen Eigenschaften von unidirektional kurzfaserverstärkten Kompositen als auch des Orientierungsmittelungs-Verfahrens zu beurteilen. Die Untersuchungen haben gezeigt, dass das Modell von Tandon-Weng wesentlich genauer ist als dasjenige von Halpin-Tsai. Trotzdem sind die Abweichungen zu gross, als dass es für Auslegungszwecke im Engineering taugen würde. Der Vergleich zwischen den Voraussagen von numerischen Berechnungen und dem Orientierungsmittelungs-Verfahren haben ergeben, dass die Orientierungsmittelung sehr geeignet ist, um die thermoelastischen Eigenschaftstensoren von jeglichen Faser- und Plättchen-Orientierungszuständen zu bestimmen. Das unter der Bedingung, dass die Orientierungsmittelung mit zuverlässigen Eigenschaftsdaten von unidirektionalen Kompositen durchgeführt wird. Mit dem numerischen Verfahren, das in dieser Arbeit verwendet wurde, können die Eigenschaften von unidirektionalen Kompositen problemlos bestimmt werden.

Numerische Berechnungen zu den thermoelastischen und Barriere-Eigenschaften von Polymer-Schichtsilikat-Nanokompositen mit perfekt ausgerichteten Silikatplättchen haben gezeigt, dass der Abfall, sowohl der Gaspermeabilität als auch des thermischen Ausdehnungskoeffizienten, durch eine gestreckte Exponentialfunktion beschrieben werden kann, die von  $x = af$  abhängt, wobei  $a$  das

Achsenverhältnis und  $f$  die Volumenfraktion der Plättchen ist. Diese Masterkurven erlauben eine rationale Auslegung der Barriere- und der thermischen Ausdehnungs-Eigenschaften von Nanokompositen mit perfekt ausgerichteten Plättchen. Es wurde ausserdem demonstriert, wie die thermische Ausdehnung von Nanokompositen mit Auslegungsdiagrammen, die von der Masterkurve abgeleitet wurden, massgeschneidert werden kann. Der Minderungseffekt von Fehlansrichtungen der Plättchen auf die Barriereigenschaften wurde auch untersucht. Die Voraussage von Fredrickson et. al. dass verdünnte Konzentrationen von zufällig orientierten Plättchen hohen Achsenverhältnisses ein Drittel so effektiv sind wie entsprechende Nanokomposite mit perfekt ausgerichteten Plättchen, wurde durch numerische Berechnungen bestätigt. Es war allerdings nicht bekannt, dass dieser Minderungseffekt im halbverdünnten Konzentrationsregime abnimmt, weil die fehlgerichteten Plättchen gemeinsam anfangen, die Diffusionswege der penetrierenden Moleküle zu vergrössern. Für typische Achsenverhältnisse und Volumenfraktionen der Plättchen in gegenwärtig existierenden Nanokompositen bewegt sich der Minderungseffekt von zufällig orientierten Plättchen im Rahmen von 40-50%.

## ABSTRACT

Recently, a new powerful finite element (FE) based simulation technique has been developed by Gusev, which allows to study the linear-elastic, electric, thermal and transport properties of multi-phase materials based on realistic 3D multi-inclusion computer models. In the first part of this thesis this new procedure has been validated by comparing measured thermoelastic properties with numerical predictions obtained with FE-models, which were generated based on microstructural data of real injection molded short fiber reinforced dumbbells. Numerical predictions showed excellent agreement with all the measured properties. The successful validation then allowed to assess the accuracy of most widely used in practice micromechanics-based models (Halpin-Tsai and Tandon-Weng) which predict the elastic properties of unidirectional short fiber composites, and also the accuracy of the orientation averaging scheme. It was found that the Tandon-Weng model is considerably more accurate than the Halpin-Tsai equations, but nonetheless deviations are too large to make this model appropriate for engineering design purposes. Comparison of direct numerical and orientation averaging predictions revealed that the orientation averaging scheme is highly suitable to determine the thermoelastic property tensors of any fiber and platelet orientation state. This under the condition that orientation averaging is done based on reliable property data of unidirectional composites. With the numerical approach employed in this work one can readily determine the properties of unidirectional composites.

Numerical calculations of the barrier and thermoelastic properties of polymer-layered silicate nanocomposites comprising perfectly aligned silicate platelets elucidated that the decline both of the gas permeability and of the thermal expansion coefficient can be described by a stretched exponential function which depends on  $x = af$ , the product of the platelet aspect ratio  $a$  and the platelet volume fraction  $f$ . These mastercurves allow to rationally design the barrier and thermal expansion properties of nanocomposites with perfectly aligned platelets. Furthermore, it has been demonstrated how the thermal expansion coefficient of nanocomposites can be tailored by using design

diagrams adapted from the mastercurve. The degrading effect of platelet misalignments on the barrier properties has also been investigated numerically. The prediction of Fredrickson et al. that dilute concentrations of randomly oriented high-aspect-ratio platelets are 1/3 as effective compared to a corresponding nanocomposite with perfectly aligned platelets was confirmed by numerical calculations. It has, however, not been known that the degrading effect decreases in the semidilute concentration regime due to the fact that the misaligned platelets start to collectively increase the tortuosity of the penetrant's diffusion path. For platelet aspect ratios and volume fractions which are typical of currently existing nanocomposites the expected degradation effect of randomly oriented platelets is in the range of 40-50%.