

УДК 539.3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СФЕРОЛИТНОЙ СТРУКТУРЫ ТЕРМОПЛАСТА КАК КОМПОЗИТНОЙ СИСТЕМЫ С УПРУГО-ПЛАСТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ\*

Гаришин О.К., Изюмов Р.И.

*ФГБУН Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Россия*

### АННОТАЦИЯ

Предложена компьютерная модель полиолефина (термопласта), описывающая его механические свойства на микро и макроуровне с учетом наличия в структуре надмолекулярных кристаллитных образований в виде сферолитов. Эти материалы (полиэтилен, полипропилен и т.д.) являются частично кристаллизующимися полимерами, то есть в них можно наблюдать хорошо выраженную структурную неоднородность на нано-, мезо- и микроуровне. Рассматриваемые в работе сферолитные образования состоят из ламелей (гибкие тонкие пластины из уложенных в поперечные петли из полимерных макромолекул) и аморфной полимерной фазы между ними. В сферолите ламели исходят радиально из одного общего ядра (зародыша), заполняя сферическое пространство вокруг него. Благодаря такому строению эти образования характеризуются хорошо выраженной механической анизотропией.

Непосредственный анализ деформации сферолита как «конструкции» (с учетом детальной морфологии структуры) практически невозможен из-за его чрезвычайно сложной геометрии. Поэтому в основу модели был положен феноменологический подход. Сферолит представлялся в виде радиально анизотропного включения, в котором механические свойства в радиальном направлении определялись ламелями, а тангенциальном – аморфной фазой.

Сферолитную структуру моделировали в виде регулярной решетки, состоящую из радиально анизотропных упругих или упругопластических включений. При этом использовалась гипотеза об аффинном характере деформирования структуры. То есть предполагалось, что внутренние области сферолита изменяют свою форму также, как и весь сферолит в целом. Степень кристалличности сферолита (соотношение кристаллической и аморфной фаз) варьировали за счет изменения его радиальной и тангенциальной жесткостей.

Расчеты вели на гексагональной ячейке периодичности с учетом соответствующих условий симметрии. Краевые задачи (как в упругой, так и упруго-пластической постановке) решали численно – методом конечных элементов. В результате были построены зависимости, позволяющие провести оценку влияния структурных характеристик сферолита на эффективные механические свойства термопласта.

**Ключевые слова:** полиолефины; термопласты; сферолиты; микроструктура; анизотропия; упругость; пластичность

## MODELING OF THE SPHERULITIC STRUCTURE OF THERMOPLASTIC AS A COMPOSITE SYSTEM WITH ELASTIC-PLASTIC PROPERTIES

Garishin O.K., Izyumov R.I.

*Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia*

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-08-00756.

## ABSTRACT

Computer model of a polyolefin (thermoplastic) describing its mechanical properties at micro and macro levels is proposed. It takes into account the presence of supramolecular crystallite formations (spherulites) in the structure. These materials (polyethylene, polypropylene, etc.) are semi-crystalline polymers, so their structure is strongly heterogeneous. Spherulites consist of lamellas (flexible thin plates composed of macromolecules laid in transverse loops) and an amorphous phase between them. Lamellas emanate radially from one common nucleus, filling the spherical space around it.

Direct analysis of spherulite deformation, taking into account the detailed morphology of the structure, is practically impossible because of its extremely complex geometry. Therefore, a phenomenological approach was used while modeling. Spherulite was represented as a radially anisotropic inclusion, in which the mechanical properties in radial direction were determined by lamellas, and in tangential – by amorphous phase.

The spherulitic structure was modeled as a regular lattice of radially anisotropic elastic or elastoplastic inclusions. The hypothesis of the affine nature of structure deformation was also used. That is, it was assumed that the inner regions of the spherulite change their shape as well as the whole one. The degree of spherulite crystallinity (the ratio of crystalline and amorphous phases) was varied by changing its radial and tangential stiffness.

Computer simulation was carried out on a hexagonal cell of periodicity. Boundary problems of cell elongation (both in elastic and elastic-plastic formulation) were solved numerically – using the finite element methods.

As a result, the dependencies allowing an assessment of the influence of the spherulite structural characteristics on the effective mechanical properties of thermoplastic were constructed.

**Keywords:** polyolefines; thermoplastics; spherulites; microstructure; anisotropy; elasticity; plasticity

## ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время детали и конструкции из пластмасс (термопластических полимеров или термопластов) и композитов на их основе широко применяются в самых различных областях промышленности. Их основными достоинствами по сравнению с металлическими изделиями являются малая массовая плотность, высокая коррозионная устойчивость, хорошие тепло и электроизоляционные свойства. Эти материалы легко поддаются различным видам механической обработки, хорошо льются и формуются. К недостаткам можно отнести более низкую прочность, то есть пластмассовые детали, как правило, используют в тех элементах конструкций и механизмов, где нагрузки относительно невелики.

Основными промышленными термопластами являются полимеры полиолефиновой группы [1,2]. Первое место в промышленном производстве занимают полиэтилен (ПЭ) и полипропилен (ПП). Данные материалы являются частично кристаллизующимися полимерами и даже в чистом виде имеют сложную многоуровневую иерархическую структуру. То есть в них можно наблюдать хорошо выраженную структурную неоднородность на нано-, мезо- и микроуровне [3,4]. В работе [5] дана следующая иерархия основных структурных уровней, обычно вовлекаемых в деформацию в частично кристаллических полимерах:

- 1) сегменты макромолекул ( $\approx 0.1-1$  нм);
- 2) ламели (толщина  $\approx 10$  нм);
- 3) сферолитные структуры ( $\approx 0.1-1000$  мкм);

4) макроуровень (от 10 мм и выше).

Сегменты макромолекул могут располагаться в пространстве хаотически (аморфная фаза), или образовывать участки с упорядоченной структурой – кристаллиты. Первыми кристаллиты в полиолефинах исследовали Тилл [6], Келлер [7] и Фишер [8]. Ламели – самая общая морфологическая форма кристаллитов в полиолефинах. Для них известно множество геометрических форм: гексагональные, квадратные, со скругленными краями и т.д. [9]. В полиолефинах они чаще всего имеют вид тонких длинных пластинок, разделенных слоями аморфной фазы. Пластины состоят из уложенных в петли (перпендикулярно плоскости ламели) макромолекул (рис.1). Вследствие такой геометрии ламели легко изгибаются при деформировании материала. Реально под действием термических напряжений при кристаллизации полимера ламели скручиваются вдоль длинной оси, причем чем выше температура кристаллизации, тем этот эффект сильнее [5,10-14]. Ламели обладают сильной упругой анизотропией, поэтому их ориентация играет важную роль в деформационных процессах. Большинство макромолекул ламели намного длиннее ее толщины, т.е. цепи многократно складываются и возвращаются в ламель [3].

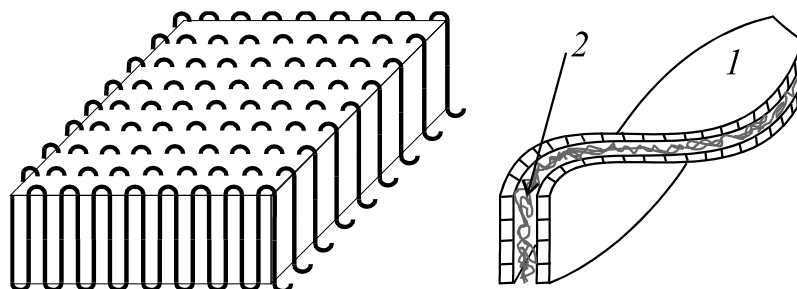


Рис.1. Схематичное изображение ламели. 1 – ламель, 2 – аморфная фаза.

Следующим по иерархии структурным уровнем в полиолефинах являются сферолиты. Это поликристаллические образования, состоящие из ламелей и аморфной фазы между ними. Как правило, образование сферолита начинается из зародыша (центра кристаллизации). Ламели в большинстве случаев растут радиально из одного общего ядра, заполняя сферическое пространство. Увеличение сферолита происходит до тех пор, пока растущие образования не начнут сталкиваться друг с другом. Границы, разделяющие сферолиты, обычно плоские, хотя могут иметь и форму гиперболоида. Таким образом, образуется полигональная сферолитная структура [9,10,15,16] (рис.2). Очень часто и разрушение таких материалов проходит по границам сферолитов.

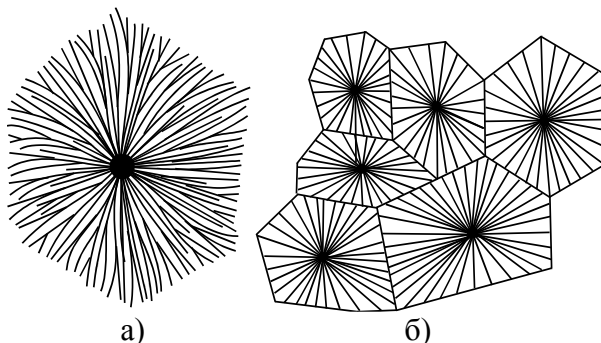


Рис.2. Схематичное изображение морфологии отдельного сферолита (а) и структуры их взаимного расположения (б).

Размер сферолита зависит от величины переохлаждения при кристаллизации. Для ПЭ в обычных условиях характерный размер сферолита достигает приблизительно 100 мкм. При воздействии внешних сил кристаллизация может привести к образованию сферолитов вытянутой формы [17,18].

Ламели в сферолитах имеют форму тонких жестких пластин, разделенных аморфными слоями. В процессе роста сферолита ламели могут разветвляться, образуя небольшие углы с исходными. Эти вторичные ламели также жесткие и плоские. При упаковке в сферолите они «подстраиваются» к уже существующей структуре [19].

Основная цель данных исследований состояла в моделировании механических (упругих и упругопластических) свойств термопластов на микроуровне с учетом их сферолитной структуры, а также изучении взаимосвязи между внутренним строением полимера и его макроскопическим поведением.

## **1. СТРУКТУРНО-ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СФЕРОЛИТА**

Вышеописанные полиолефины являются частично кристаллизующимися полимерами, состоящими из двух хорошо выраженных фаз: относительно жесткой кристаллитной и мягкой аморфной. То есть по своей сути эти материалы являются структурно-неоднородными композитными системами (даже при отсутствии в них других "инородных" наполнителей). Наличие столь сложного внутреннего строения обуславливает и сложный характер их механического поведения (как следствие различных по природе обратимых и необратимых структурных изменений, происходящих при деформировании).

Для того чтобы оценить, как сферолитная структура влияет на макросвойства полиолефина, была предложена следующая модель.

С точки зрения механики сферолиты можно рассматривать как композит, в котором ламели являются жесткими включениями в виде длинных тонких пластин, встроенными в мягкую аморфную матрицу. Непосредственный анализ деформации сферолита как "конструкции" (с учетом детальной морфологии структуры) представляется весьма затруднительным ввиду его чрезвычайно сложной геометрии (как это уже было отмечено во введении). Ситуация усугубляется еще и тем, что в различных частях сферолита ламели ориентированы под различными углами к направлению нагрузки и, соответственно, деформируются по-разному.

Поэтому в основу модели был положен феноменологический подход к описанию геометрии и механических свойств кристаллитной структуры. В модели сферолит представлялся в виде радиально анизотропного включения с эффективными механическими характеристиками, подбираемыми из условия соответствия реальным макросвойствам полимера.

При этом использовалась гипотеза об аффинной деформации сферолита, то есть предполагается, что все внутренние области изменяют свою форму также, как и сферолит в целом. Первая модель аффинной деформации предложена в 1964 г. [20], затем модифицирована в [21]. Сферолит (в отличие от нашего подхода) в этих моделях считался изотропным и однородным. Для того уровня развития вычислительной техники это было вполне приемлемое предположение, значительно облегчающее практические расчеты.

В соответствии с [9,10,15,16] структуру полиолефина моделировали в виде правильной гексагональной решетки (плоское деформированное состояние) из шестиугольных включений – сферолитов. То есть материал рассматривался как механически неоднородная среда с регулярной упорядоченной структурой. Такое допущение позволило применить классический метод регуляризации, давно и хорошо известный в механике композиционных материалов [22-29]. Суть его состоит в использовании свойств симметрии регулярной решетки для перехода к краевой задаче о деформировании области конечных размеров (ячейке периодичности), которая уже может быть решена известными методами механики сплошных сред. Основное достоинство метода в том, что всю необходимую информацию можно получить из анализа НДС в ячейке периодичности.

В реальности сферолит является трехмерным телом, но на качественном уровне происходящие в нем процессы и явления можно исследовать и в двухмерной постановке (рис.3а). Такой подход позволяет значительно упростить решение краевой задачи и сократить вычислительные затраты. Поэтому каждый сферолит представляли как правильный радиально-анизотропный по механическим свойствам шестиугольник. Центр анизотропии располагался в центре шестиугольника. При этом механические свойства кристаллитов (ламелей) определяли поведение сферолита в радиальном направлении, а жесткость аморфной фазы – в тангенциальном.

Расчеты вели на ячейке периодичности в виде прямоугольной области (вырезанной из правильной гексагональной решетки), показанной на рис.3б. Поэтому соотношение ее сторон равнялось  $\text{tg}60^\circ=1.73205$ . Соответственно, линия границы между сферолитами делила большую сторону области в соотношении 2 к 1. На макроуровне тело, представленное набором таких ячеек, является макроизотропным, и для описания его упругих свойств достаточно одного параметра –  $E$  (модуль Юнга).

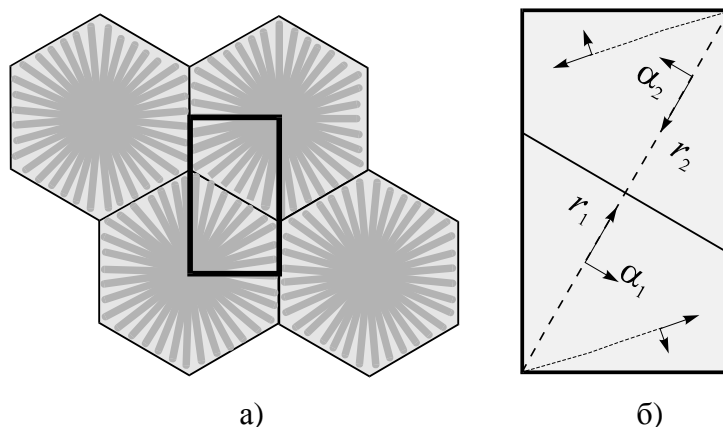


Рис.3. Моделирование «сферолитной» структуры полиолефина (а) и расчетная схема (б) для краевой задачи (ячейки периодичности).

В процессе компьютерного моделирования ячейка периодичности (рис.3б) подвергалась одноосному растяжению посредством раздвижения ее нижней и верхней границ по вертикали. При этом противоположные границы ячейки в процессе деформации оставались параллельными и без искривлений. Соответствующую краевую задачу решали численно с помощью конечно-элементного пакета ANSYS (лицензионная академическая версия: Academic Research Mechanical and CFD No 106423).

## 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ СФЕРОЛИТА

Для описания упругого поведения полиолефина на микроуровне (ячейка периодичности) использовали линейно упругую модель для анизотропного тела [30] (плоское деформированное состояние). Считали, что материал ячейки несжимаемый. Задачу решали в цилиндрических координатах ( $1 \equiv r$ ,  $2 \equiv \alpha$ ,  $3 \equiv z$ ). В плоскости  $(r, \alpha)$  – задавалась радиальная анизотропия, вдоль оси  $z$  напряженно-деформированное состояние не менялось. Радиальная жесткость (модуль)  $E_r = E_1$  определяла жесткость ламелей, тангенциальная  $E_a = E_2$  – аморфной фазы. Коэффициенты Пуассона для анизотропной среды  $\nu_{12}$ ,  $\nu_{13}$ ,  $\nu_{23}$  задавались равными 0.495. Остальные коэффициенты ( $\nu_{21}$ ,  $\nu_{31}$ ,  $\nu_{32}$ ) пакет ANSYS рассчитывает автоматически в соответствии с известными соотношениями из механики анизотропных сред. Тестовые задачи для частного случая  $E_r = E_a$  (то есть, когда «анизотропное» решение должно соответствовать изотропной среде) подтвердили адекватность такого выбора.

Расчеты велись по следующему алгоритму: было принято, что аморфная фаза в сферолите является каучукоподобной и, соответственно, ее жесткость примерно такая же, как у чистого эластомера [3,31-36]. При расчетах минимальное значение  $E_a$  брали равным 1 МПа. При этом она не могла превышать жесткость ламелей  $E_r$ . Для каждого фиксированного значения  $E_r$  (оно варьировалось от 80 до 200 МПа) были построены зависимости макромодуля полимера  $E$  ( $E_a$ ,  $E_r = \text{const}$ ).

Таким образом, зная из эксперимента макромодуль материала, можно по этим зависимостям оценить соотношение радиальной и тангенциальной жесткостей в сферолите. Соответствующие графики также приведены на рис.4а. Интересно отметить, что если перестроить эти зависимости в осях  $E/E_r - E_a/E_r$ , то все кривые, соответствующие различным значениям  $E_r = \text{const}$ , практически совпадут (рис.4б). В принципе, этого и стоило ожидать, так как задача решалась в линейно упругой постановке. Но данный результат свидетельствует о достаточно высокой точности полученных численных решений.

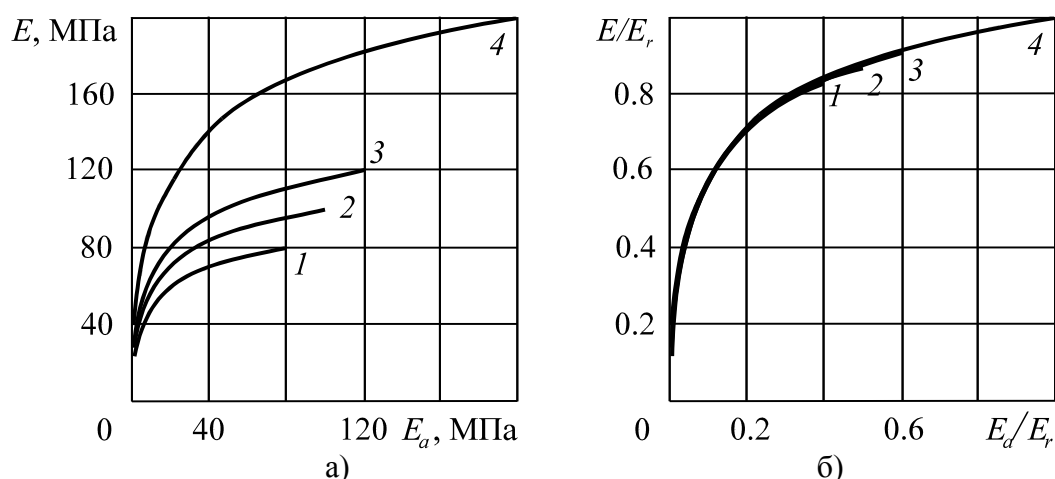


Рис.4. Зависимости между  $E$ ,  $E_r$  и  $E_a$  (упругая задача)  $E_r = 80$  МПа (1); 100 МПа (2); 120 МПа (3); 200 МПа (4).

### 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГО-ПЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СФЕРОЛИТА

При моделировании упруго-пластического поведения полиолефина сферолитную структуру представляли аналогично тому, как это делалось в упругой постановке модели. То есть она имела вид правильной гексагональной решетки (плоское деформированное состояние) из шестиугольных включений – сферолитов. Также использовалась гипотеза об аффинной деформации сферолита.

Каждый сферолит представляли как радиально анизотропное включение с центром в его середине, но уже не упругое, а упругопластическое. При этом упругие механические свойства кристаллитов (ламелей) определяли поведение сферолита в радиальном направлении, а упругая жесткость аморфной фазы – в тангенциальном.

Одноосную деформацию системы задавали посредством раздвижения нижней и верхней границ ячейки по вертикали с одновременным сближением боковых сторон по горизонтали так, чтобы выполнялось условие неизменности объема ячейки (аналогично упругой задаче). При этом границы ячейки в процессе деформирования оставались прямоугольными. Задачу решали методом конечных элементов (плоская деформация) на тех же сетках, что и в упругом случае.

Что касается пластических свойств ПЭ, то при решении упругопластической задачи использовали ассоциированный закон течения, когда связь между приращениями пластической деформации  $d\varepsilon_{ij}^p$  и напряжениями задается через поверхность текучести (пластический потенциал)  $f(\sigma_{ij})$  в следующем виде [37,38]

$$d\varepsilon_{ij}^p = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\overline{d\varepsilon}_{\text{int}}^p}{\sqrt{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}}}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}}, \quad (1)$$

где  $\overline{d\varepsilon}_{\text{int}}^p = \sqrt{(2/3)de_{mn}^p de_{mn}^p}$  – интенсивность приращений пластической деформации,  $de_{mn}^p$  – компоненты девиатора приращений пластических деформаций.

В качестве функции текучести  $f$  для анизотропной среды часто используют пластический потенциал Хилла [39-43], который в общем случае можно записать как

$$f = \sqrt{F(\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + G(\sigma_{33} - \sigma_{22})^2 + H(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + 2L\sigma_{23}^2 + 2M\sigma_{31}^2 + 2N\sigma_{12}^2}, \quad (2)$$

где  $F, G, H, L, M, N$  – константы, определяемые из опыта. В частном случае при условии, что все они равны единице, функция текучести Хилла вырождается в классический критерий Мизеса для изотропного тела [44,45], согласно которому момент возникновения пластического течения в данной точке среды определяется условием (3)

$$\sigma_{\text{int}} = \sqrt{(3/2)s_{mn}s_{mn}} > \sigma_T, \quad (3)$$

где  $s_{mn}$  – компоненты девиатора тензора напряжений,  $\sigma_{\text{int}}$  – интенсивность тензора напряжений,  $\sigma_T$  – предел текучести.

При построении модели было принято, что пластичность в сферолите развивается изотропно, а анизотропия проявляется только в упругости, то есть в качестве критерия пластичности использовали критерий Мизеса (3).

Это достаточно грубое допущение, но ввиду того, что практически отсутствует экспериментальная информация о развитии пластических процессов в сферолите на уровне его структуры, оно в данном случае вполне оправдано.

Упругопластические свойства полимера, которые закладывались в модель, определяли из экспериментов на растяжение макроскопических образцов из полиэтилена марки ПЭ 107-02К, которые были проведены в ИМСС УрО РАН. На рис.5 представлена осредненная (по результатам 5 независимых испытаний) зависимость напряжений от деформаций.

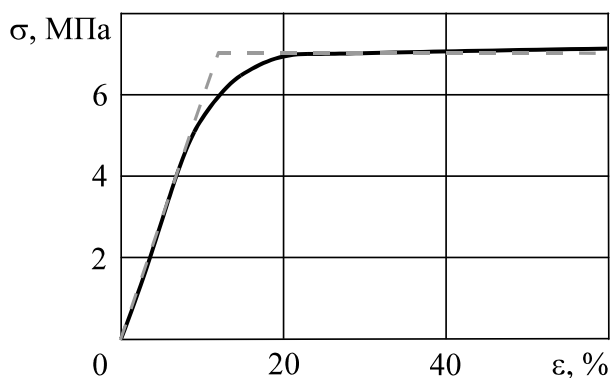


Рис.5. Осредненная кривая одноосного растяжения полиэтилена ПЭ 107-02К (сплошная линия), двухзвенная аппроксимация (штриховая линия).

При расчетах использовали двухзвенное представление этой кривой в виде ломаной линии из двух прямых. Первая прямая, исходящая из начала координат, имела наклон, соответствующий начальному макромодулю Юнга материала. В точке  $\sigma = \sigma_T$  она заканчивалась и далее механические свойства материала описывались горизонтальной прямой (идеальная пластичность).

Искомые механические макросвойства полиэтилена определяли с помощью секущего модуля  $E_\epsilon$ . Под  $E_\epsilon$  понимали модуль Юнга, рассчитанный для заданной "стандартной" деформации  $\epsilon$  в предположении, что материал линейно упругий. Оценка механической жесткости полимера по его секущему модулю при заданной стандартной деформации часто используется на практике материалововедами [46]. Такой подход позволяет количественно оценить (в первом приближении) различие между нелинейными кривыми нагружения, характерными для конечно деформируемых полимерных материалов. В случае одноосного растяжения несжимаемой среды по  $x$  ( $\epsilon = \epsilon_{xx}$ ,  $\nu = 0.5$ ) можно записать

$$E_\epsilon = 1.5(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) / (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}). \quad (4)$$

При моделировании развития упругопластических процессов в сферолите максимальную деформацию ячейки  $\epsilon$  (при которой рассчитывали секущий модуль) брали равной 10%, предел текучести  $\sigma_T = 7$  МПа (см. рис.5). Аналогично упругой задаче  $E_r$  варьировалось от 80 до 200 МПа, а  $E_a$  от 1 МПа до  $E_r$ .

Расчеты показали, что в изотропном случае ( $E_r = E_a$ ), пластичность возникала практически скачкообразно сразу во всем объеме ячейки при ее растяжении примерно до 7% (что вполне соответствует концу участка чисто упругого деформирования экспериментальной зависимости  $\sigma - \epsilon$  для ПЭ 107-02К). По мере усиления анизотропных свойств сферолита (т.е. уменьшении тангенциальной жесткости при постоянной радиальной) этот процесс развивался более плавно и растянуто «во времени». Причем размеры зон пластичности уменьшались, а локальные пластические деформации в этих зонах росли. Было установлено, что



пластические течения сначала проявлялись в центральной области сферолита, и по мере увеличения макрорастяжки распространялись на его периферию.

Графически эти процессы показаны на рис.6,7,8. Картины соответствуют значениям  $E_a$  в 60, 30 и 10 МПа, при постоянной жесткости  $E_r=100$  МПа. Результаты, полученные для других значений  $E_r$  качественно не отличались от ниже приведенных. Возникшие в результате растяжения ячейки зоны пластичности выделены темным цветом.

Исследования напряженно-деформированного состояния также показали, что локальные пластические зоны в сферолитной структуре появляются намного раньше, чем макронапряжения достигнут предела текучести.

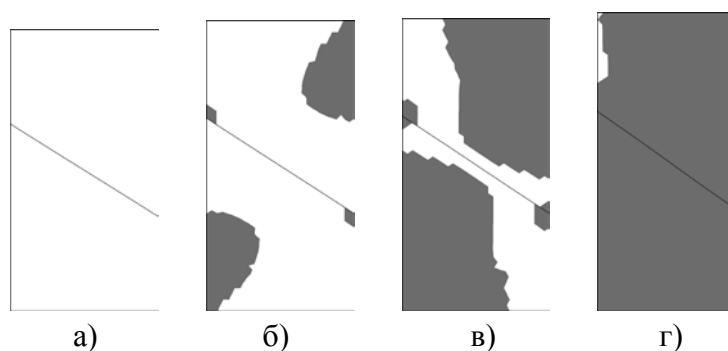


Рис.6. Развитие пластичности в сферолите в случае  $E_a=60$  МПа,  $E_r=100$  МПа.  
а)  $\epsilon_{xx}=5\%$ ; б)  $\epsilon_{xx}=7\%$ ; в)  $\epsilon_{xx}=8\%$ ; г)  $\epsilon_{xx}=10\%$ .

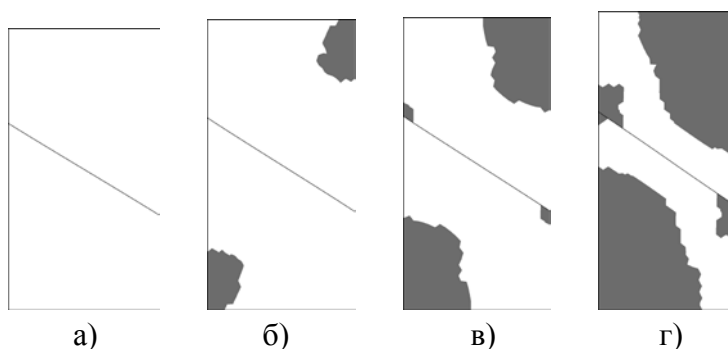


Рис.7. Развитие пластичности в сферолите в случае  $E_a=30$  МПа,  $E_r=100$  МПа.  
а)  $\epsilon_{xx}=5\%$ ; б)  $\epsilon_{xx}=7\%$ ; в)  $\epsilon_{xx}=8\%$ ; г)  $\epsilon_{xx}=10\%$ .

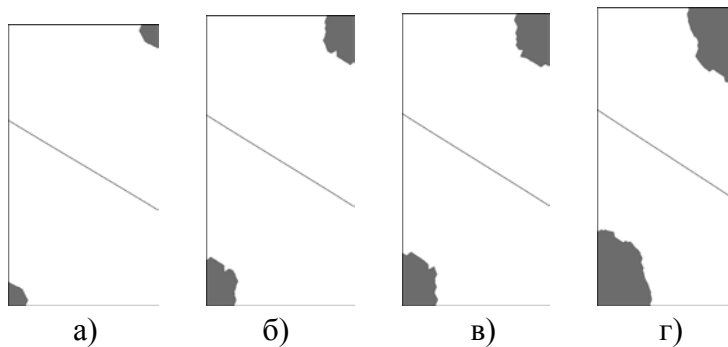


Рис.8. Развитие пластичности в сферолите в случае  $E_a=10$  МПа,  $E_r=100$  МПа.  
а)  $\epsilon_{xx}=5\%$ ; б)  $\epsilon_{xx}=7\%$ ; в)  $\epsilon_{xx}=8\%$ ; г)  $\epsilon_{xx}=10\%$ .

На рис.9 представлены зависимости максимальных значений главных пластических деформаций  $\varepsilon_1^p$  ( $\varepsilon_1^p > \varepsilon_2^p > \varepsilon_3^p$ ) от деформации ячейки  $\varepsilon_{xx}$  и жесткости аморфной фазы  $E_a$  ( $E_r=100$  МПа). Из графиков видно, что чем мягче аморфная фаза по сравнению с ламелями, тем «легче» пластически деформируется система. В изотропном теле пластические деформации соизмеримы с общей деформацией материала на макроуровне ( $\varepsilon_{xx}$ ). По мере увеличения анизотропии системы (т.е. уменьшения значений  $E_a$ ) они становятся все больше, причем их максимальные значения могут почти на порядок превышать деформацию ячейки.

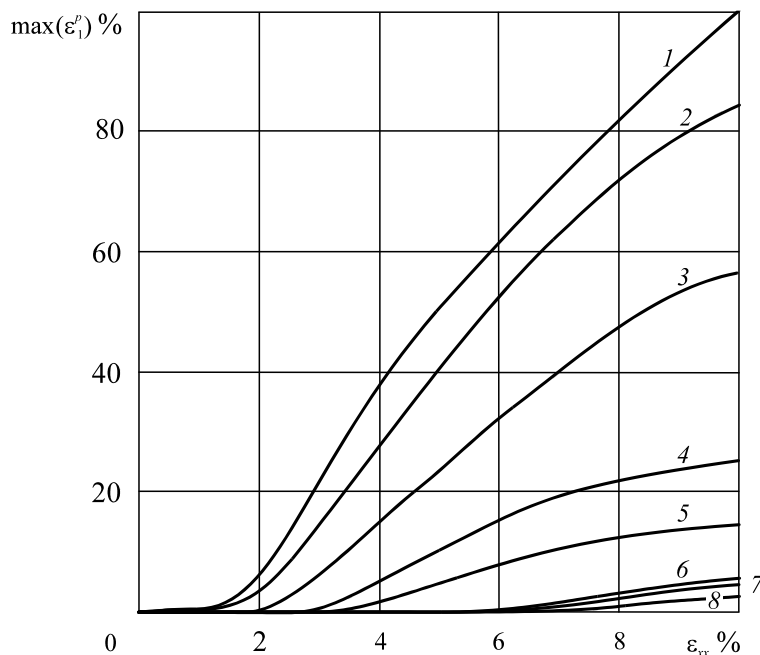


Рис.9. Зависимости максимальных значений главных пластических деформаций  $\max(\varepsilon_1^p)$  от деформации ячейки  $\varepsilon_{xx}$  и жесткости аморфной фазы  $E_a$  при постоянной жесткости ламелей ( $E_r=100$  МПа).  $\sigma_T=7$  МПа;  $E_a=1$  МПа (1); 2 МПа (2); 5 МПа (3); 10 МПа (4); 15 МПа (5); 30 МПа (6); 60 МПа (7); 100 МПа (8).

Как результат данных исследований были построены зависимости секущего модуля  $E_{\varepsilon=10\%}$  (растяжение ячейки на 10%) от  $E_r$  и  $E_a$ . Они представлены на рис.10. На графике видно, появление пластических течений вызывает «сближение» зависимостей секущего модуля  $E_{\varepsilon}$  ( $E_r$ ,  $E_a$ ). То есть пластичность способствует снижению влияния анизотропии механических свойств сферолита на макро модуль за счет выравнивания полей напряжений.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана микроструктурная упругопластическая модель полиолефина с учетом имеющихся в нем кристаллитных образований в виде сферолитов. На ее основе проведено моделирование взаимосвязи между механическими свойствами материала на макроуровне и структурными параметрами, характеризующими анизотропные свойства таких надмолекулярных образований как сферолиты. Построены соответствующие зависимости, позволяющие провести оценку

эффективного механического поведения полимера от степени анизотропии сферолита, как при упругом деформировании, так и в случае возникновения в нем пластических деформаций. В дальнейшем, по мере накопления опытных данных, планируется ввести в модель и анизотропную пластичность.

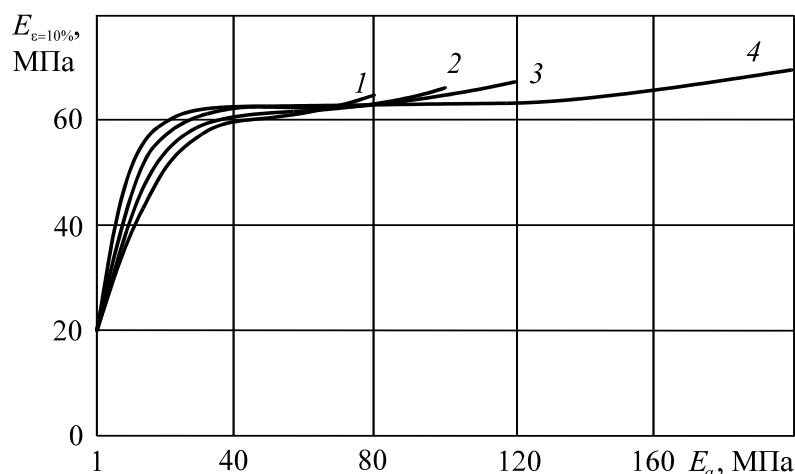


Рис.10. Зависимости между секущего модуля  $E_{\varepsilon=10\%}$  от  $E_r$  и  $E_a$ ;  $\sigma_T=7$  МПа;  $E_r=80$  МПа (1); 100 МПа (2); 120 МПа (3); 200 МПа (4).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. White J.L., Choi D.D. *Polyolefins Processing, Structure Development, and Properties*. – Munich: Carl Hansen Verlag, 2005. – 271 p.
2. Noora J. Al-Thani, Jolly Bhadra and Khadija M. Zadeh. *Polyolefin composites and nanocomposites* // *Polyolefin Compounds and Materials Fundamentals and Industrial Applications*. – 2016. – Pp.157-179.
3. Олейник Э.Ф. *Пластичность частично кристаллических гибкоцепных полимеров на микро- и мезоуровнях* // *Высокомолек. соед. Серия С*. – 2003. – Т.45. – №10. – С.1-129.
4. Crist B., Schultz J.M. *Polymer spherulites: A critical review* // *Progress in Polymer Science*. – 2016. – Vol.56. – Pp.1-63.
5. G'sell C. Haudin J.-M. Sillion B., Billardon R. *Introduction a la mecanique des polymers*. –FRANCE, Vandoeuvre-les-Nancy: INPL, 1995. – 430 p.
6. Till P.H. *The growth of single crystals of linear polyethylene* // *J. Polym. Sci.* – 1957. – Vol.24. – Pp.301-306.
7. Keller A. *A Note on single crystals in polymers: Evidence for a folded chain configuration* // *Philosophical Magazine*. – 1957. – Ser.8. – Vol.2. – Pp.1171-1175.
8. Fischer E.W. *Stufen- und spiralfomiges Kristallwachstum bei Hochpolymeren* // *Z. Naturforsch.* – 1957. – B.12a. – Pp.753-754.
9. *Handbook of Polyolefins* / Ed. by Vasile C. – New York: Marcel Dekker, 2000. – 1014 p.
10. Schultz J.M. *Microstructural aspects of failure in semicrystalline polymers* // *Polym. Eng Sci.* – 1984. – Vol.24. – Pp.770-785.
11. Michell R.M., Müller A.J. *Confined crystallization of polymeric materials* // *Progress in Polymer Science*. – 2016. – Vol.54-55. – Pp.183-213.

12. Li Z.Y., Liu R., Mai B.Y. et al. *Temperature-induced and crystallization-driven self-assembly of polyethylene-b-poly(ethylene oxide) in solution* // Polymer. – 2013. – Vol.54. – Pp.1663-1670.
13. He Z., Liang Y., Wang P., Han C.C. *Effect of lower critical solution temperature phase separation on crystallization kinetics and morphology of poly(butylene succinate)/poly(ethylene oxide) blend* // Polymer. – 2013. – Vol.54. – Pp.2355-2363.
14. Pan P., Zhao L., Yang J., Inoue Y. *Fractional crystallization and phase segregation in binary miscible poly(butylene succinate)/poly(ethylene oxide) crystalline blends: effect of crystallization temperature* // Macromol. Mater. Eng. – 2013. – Vol.298. – Pp.201-209.
15. Crist B., Schultz J.M. *Polymer spherulites: A critical review* // Progress in Polymer Science. – 2016. – Vol.56. – Pp.1-63.
16. Michell R.M., Müller A.J. *Confined crystallization of polymeric materials* // Progress in Polymer Science. – 2016. – Vol.54-55. – Pp.183-213.
17. Lee S.Y., Bassett D.C., Olley R.H. *Direct observations of differential lamellar deformation on drawing isolated polyethylene spherulites* // J. Mater. Sci. – 2000. – Vol.35. – Pp.5101-5110.
18. Lee S.Y., Bassett D.C., Olley R.H. *Lamellar deformation and its variation in drawn isolated polyethylene spherulites* // Polymer. – 2003. – Vol.44. – Pp.5961-5967.
19. Lin L., Argon A.S. *Review. Structure and plastic deformation of polyethylene* // J. Mater. Sci. – 1994. – Vol.29. – No.2. – Pp.294-323.
20. Wilchinsky Z.W. *Orientation in crystalline polymers related to deformation* // Polymer. – 1964. – Vol.5. – Pp.271-281.
21. Sasaguri K., Hoshino S., Stein R.S. *Relationship between morphology and deformation mechanisms of polyolefins* // J. Appl. Phys. – 1964. – Vol.35. – No.1. – Pp.47-57.
22. Бахвалов Н.С. *Осреднение дифференциальных уравнений с частными производными с быстро осциллирующими коэффициентами* // Доклады АН СССР. – 1975. – Т.221. – №3. – С.516-519.
23. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. *Осреднение процессов в периодических средах.* – М.: Наука, 1984. – 352 с.
24. Волков С.Д., Ставров В.П. *Статистическая механика композитных материалов.* – Минск: Изд-во Белорус. ун-та, 1977. – 208 с.
25. Победря Б.Е. *Механика композиционных материалов.* – М.: Изд-во МГУ, 1984. – 336 с.
26. Christensen R.M. *Mechanics of composite materials.* – New York: Wiley-Interscience, 2005. – 348 p.
27. Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В. *Конечно-элементное моделирование эффективных вязкоупругих свойств однонаправленных композиционных материалов* // Математическое моделирование и численные методы. – 2014. – №2. – С.28-48.
28. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Юрин Ю.В. *Численное моделирование упруго-пластического деформирования пространственно-армированных композитов* // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». – 2012. – С.40-54.
29. Беляев А.Ю., Гилева О.С., Ерофеева Е.С., Муравьева М.А., Свистков А.Л. *Модель изменения упругих свойств зубной эмали под действием различных факторов* // Вестник Пермского университета, Серия: Математика, механика, информатика. – 2011. – Вып.5(9). – С.25-28.

30. Черных К.Ф. *Введение в анизотропную упругость*. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1988. – 192 с.
31. Haward R.N., Thackray G. *The Use of a mathematical model to describe isothermal stress-strain curves in glassy thermoplastics* // Proc. R. Soc. – 1968. – Ser. A. – Vol.302. – Pp.453-472.
32. Haward R.N., Healey G., Wood A.K. *The stress-strain curve of Luflexen in tension* // J. Mater. Sci. – 2001. – Vol.36. – No.1. – Pp.21-25.
33. Асаубеков М.А. *Исследование кристаллизации, кинетики кристаллизации и растворения полимеров в вязкой среде* // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – №6-1. – С.76-82.
34. Уайт Д.Л. *Полиэтилен, полипропилен и другие полиолефины* / пер. с англ. яз. под ред. Е.С. Цобкалло. – СПб.: Профессия, 2006. – 256 с.
35. Охлопкова Т.А., Борисова Р.В., Охлопкова А.А. и др. *Микроскопические исследования деформации растяжения сферолитных структур в полимерных композиционных материалах* // Вестник Severo-Vostochnogo federal'nogo universiteta. – 2015. – №3(47). – С.75-87.
36. Okhlopko T.A., Borisova R.V., Nikiforov L.A. et al. *Supramolecular structure and mechanical characteristics of ultrahigh-molecular-weight polyethylene-inorganic nanoparticle nanocomposites* // Bull. Korean Chem. Soc. – 2016. – Vol.37. – Pp.439-444.
37. Малинин М.Н. *Прикладная теория пластичности и ползучести*. – М.: Машиностроение, 1975. – 400 с.
38. Ишлинский А.Ю., Ивлев Д.Д. *Математическая теория пластичности*. – М.: Физматлит, 2001. – 704 с.
39. Хилл Р. *Математическая теория пластичности*. – М.: Гостехиздат, 1956. – 407 с.
40. Hill R. *Constitutive modelling of orthotropic plasticity in sheet metals* // J. Mech. Phys. Solids. – 1990. – Vol.38. – No.3. – Pp.405-417.
41. Cardoso R.P.R., Adetoro O.B. *A generalisation of the Hill's quadratic yield function for planar plastic anisotropy to consider loading direction* // Intern. J. of Mechanical Sciences. – 2017. – Vol.128-129. – Pp.253-268.
42. Cansiz B., Dal H., Kaliske M. *Computational cardiology: A modified Hill model to describe the electro-visco-elasticity of the myocardium* // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2017. – Vol.315. – Pp.434-466.
43. Lou Y., Yoon J.W. *Anisotropic yield function based on stress invariants for BCC and FCC metals and its extension to ductile fracture criterion* // Intern. J. of Plasticity. – 2018. – Vol.101. – Pp.125-155.
44. Mises R. *Mechanik der plastischen Formänderung von Kristallen* // Z. Angew. Mat. Und Mech. – 1928. – Vol.8. – №3. – Pp.161-185.
45. Мизес Р. *Механика твердых тел в пластически деформированном состоянии* / В кн. Теория пластичности. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1948. – С.57-69.
46. Печковская К.А. *Сажка как усилитель каучука*. – М.: Изд-во Химия, 1968. – 215 с.

## REFERENCES

1. White J.L., Choi D.D. *Polyolefins Processing, Structure Development, and Properties*, Munich, Carl Hansen Verlag, 2005, 271 p.

2. Noora J. Al-Thani, Jolly Bhadra and Khadija M. Zadeh. *Polyolefin composites and nanocomposites*. Polyolefin Compounds and Materials Fundamentals and Industrial Applications, 2016, Pp.157-179.
3. Oleinik E.F. *Plasticity of semicrystalline flexible-chain polymers at the microscopic and mesoscopic levels*. Polym. Sci. Ser. C, 2003, Vol.45, No.1, Pp.17-117.
4. Crist B., Schultz J.M. *Polymer spherulites: A critical review*. Progress in Polymer Science, 2016, Vol.56, Pp.1-63.
5. G'sell C. Haudin J.-M. Sillion B., Billardon R. *Introduction a la mecanique des polymers*. FRANCE, Vandoeuvre-les-Nancy, INPL, 1995, 430 p.
6. Till P.H. *The growth of single crystals of linear polyethylene*. J. Polym. Sci., 1957, Vol.24, Pp.301-306.
7. Keller A. *A Note on single crystals in polymers: Evidence for a folded chain configuration*. Philosophical Magazine, 1957, Ser.8, Vol.2, Pp.1171-1175.
8. Fischer E.W. *Stufen- und spiralfomiges Kristallwachstum bei Hochpolymeren*. Z. Naturforsch, 1957, B.12a, Pp.753-754.
9. Handbook of Polyolefins / Ed. by Vasile C, New York, Marcel Dekker, 2000, 1014 p.
10. Schultz J.M. *Microstructural aspects of failure in semicrystalline polymers*. Polym. Eng. Sci., 1984, Vol.24, Pp.770-785.
11. Michell R.M., Müller A.J. *Confined crystallization of polymeric materials*. Progress in Polymer Science, 2016, Vol.54-55, Pp.183-213.
12. Li Z.Y., Liu R., Mai B.Y. et al. *Temperature-induced and crystallization-driven self-assembly of polyethylene-b-poly(ethylene oxide) in solution*. Polymer, 2013, Vol.54, Pp.1663-1670.
13. He Z., Liang Y., Wang P., Han C.C. *Effect of lower critical solution temperature phase separation on crystallization kinetics and morphology of poly(butylene succinate)/poly(ethylene oxide) blend*. Polymer, 2013, Vol.54, Pp.2355-2363.
14. Pan P., Zhao L., Yang J., Inoue Y. *Fractional crystallization and phase segregation in binary miscible poly(butylene succinate)/poly(ethylene oxide) crystalline blends: effect of crystallization temperature*. Macromol. Mater. Eng., 2013, Vol.298, Pp.201-209.
15. Crist B., Schultz J.M. *Polymer spherulites: A critical review*. Progress in Polymer Science, 2016, Vol.56, Pp.1-63.
16. Michell R.M., Müller A.J. *Confined crystallization of polymeric materials*. Progress in Polymer Science, 2016, Vol.54-55, Pp.183-213.
17. Lee S.Y., Bassett D.C., Olley R.H. *Direct observations of differential lamellar deformation on drawing isolated polyethylene spherulites*. J. Mater. Sci., 2000, Vol.35, Pp.5101-5110.
18. Lee S.Y., Bassett D.C., Olley R.H. *Lamellar deformation and its variation in drawn isolated polyethylene spherulites*. Polymer, 2003, Vol.44, Pp.5961-5967.
19. Lin L., Argon A.S. *Review. Structure and plastic deformation of polyethylene*. J. Mater. Sci., 1994, Vol.29, No.2, Pp.294-323.
20. Wilchinsky Z.W. *Orientation in crystalline polymers related to deformation*. Polymer, 1964, Vol.5, Pp.271-281.
21. Sasaguri K., Hoshino S., Stein R.S. *Relationship between morphology and deformation mechanisms of polyolefins*. J. Appl. Phys., 1964, Vol.35, No.1, Pp.47-57.
22. Bakhvalov N.S. *Osrednenie differentsial'nykh uravnenij s chastnymi proizvodnymi s bystro ostsilliruyushhimi koehffitsientami [Averaging of partial differential equations with rapidly oscillating coefficients]*. Doklady akademii nauk SSSR, 1975, Vol.221, No.3, Pp.516-519.

23. Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. *Osrednenie protsessov v periodicheskikh sredakh* [Averaging processes in periodic media]. Moskva, Nauka, 1984, 352 p.
24. Volkov S.D., Stavrov V.P. *Statisticheskaya mekhanika kompozitnykh materialov* [Statistical Mechanics of Composite Materials]. Minsk, Izdatel'stvo Belorusskogo universiteta, 1977, 208 p.
25. Pobedrja B.E. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of Composite Materials]. Moskva, Izdatel'stvo Moskovskogo gosudarstvennogo universiteta, 1984, 336 p.
26. Christensen R.M. *Mechanics of composite materials*, New York, Wiley-Interscience, 2005, 348 p.
27. Dimitrienko Iu.I., Gubareva E.A., Sborshchikov S.V. *Konechno-ehlementnoe modelirovanie ehffektivnykh vyzkouprugikh svojstv odnonapravlennykh kompozitsionnykh materialov* [Finite element modeling of the effective viscoelastic properties of unidirectional composite materials]. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody*, 2014, No.2, Pp.28-48.
28. Dimitrienko Iu.I., Sokolov A.P., Iurin Iu.V. *Chislennoe modelirovanie uprugoplasticheskogo deformirovaniya prostranstvenno-armirovannykh kompozitov* [Numerical modeling of elastic-plastic deformation of spatially reinforced composites]. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. N.Eh. Baumana, Seriya «Estestvennye nauki»*, 2012, Pp.40-54.
29. Beliaev A.Iu., Gileva O.S., Erofeeva E.S., Murav'eva M.A., Svistkov A.L. *Model' izmeneniya uprugikh svojstv zubnoj ehmalii pod dejstviem razlichnykh faktorov* [Model of changes in the elastic properties of tooth enamel under the influence of various factors]. *Vestnik Permskogo universiteta, Seriya: Matematika, mekhanika, informatika*, 2011, Iss.5(9), Pp.25-28.
30. Chernyh K.F. *Vvedenie v anizotropnuyu uprugost'* [Introduction to anisotropic elasticity]. Moskva, Nauka, Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1988, 192 p.
31. Haward R.N., Thackray G. *The Use of a mathematical model to describe isothermal stress-strain curves in glassy thermoplastics*. *Proc. R. Soc., 1968, Ser. A, Vol.302, Pp.453-472*.
32. Haward R.N., Healey G., Wood A.K. *The stress-strain curve of Luflexen in tension*. *J. Mater. Sci.*, 2001, Vol.36, No.1, Pp.21-25.
33. Asaubekov M.A. *Issledovanie kristallizatsii, kinetiki kristallizatsii i rastvoreniya polimerov v vyzkoj srede* [Investigation of crystallization, kinetics of crystallization and dissolution of polymers in a viscous medium]. *Mezhdunarodnyj zhurnal prikladnykh i fundamental'nykh issledovanij*, 2015, No.6-1, Pp.76-82.
34. White D.L. *Poliehtilen, polipropilen i drugie poliolefiny* [Polyethylene, polypropylene and other polyolefins]. Sankt-Peterburg, Professiya, 2006, 256 p.
35. Okhlopko T.A., Borisova R.V., Okhlopko A.A. et al. *Mikroskopicheskie issledovaniya deformatsii rastyazheniya sferolitnykh struktur v polimernykh kompozitsionnykh materialakh* [Microscopic studies of deformation of stretching of spherulitic structures in polymeric composite materials]. *Vestnik Severo-Vostochnogo federal'nogo universiteta*, 2015, No.3(47), Pp.75-87.
36. Okhlopko T.A., Borisova R.V., Nikiforov L.A. et al. *Supramolecular structure and mechanical characteristics of ultrahigh-molecular-weight polyethylene-inorganic nanoparticle nanocomposites*. *Bull. Korean Chem. Soc.*, 2016, Vol.37, Pp.439-444.

37. Malinin M.N. *Prikladnaya teoriya plastichnosti i polzuchesti [Applied theory of plasticity and creep]*. Moskva, Mashinostroenie, 1975, 400 p.
38. Ishlinskij A.Ju., Ivlev D.D. *Matematicheskaya teoriya plastichnosti [Mathematical theory of plasticity]*. Moskva, Fizmatlit, 2001, 704 p.
39. Hill R. *Matematicheskaya teoriya plastichnosti [Mathematical theory of plasticity]*. Moskva, Gostekhizdat, 1956, 407 p.
40. Hill R. *Constitutive modelling of orthotropic plasticity in sheet metals*. J. Mech. Phys. Solids, 1990, Vol.38, No.3, Pp.405-417.
41. Cardoso R.P.R., Adetoro O.B. *A generalisation of the Hill's quadratic yield function for planar plastic anisotropy to consider loading direction*. Intern. J. of Mechanical Sciences, 2017, Vol.128-129, Pp.253-268.
42. Cansız B., Dal H., Kaliske M. *Computational cardiology: A modified Hill model to describe the electro-visco-elasticity of the myocardium*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 2017, Vol.315, Pp.434-466.
43. Lou Y., Yoon J.W. *Anisotropic yield function based on stress invariants for BCC and FCC metals and its extension to ductile fracture criterion*. Intern. J. of Plasticity, 2018, Vol.101, Pp.125-155.
44. Mises R. *Mechanik der plastischen Formänderung von Kristallen*. Z. Angew. Mat. und Mech., 1928, Vol.8, No.3, Pp.161-185.
45. Mises R. *Mekhanika tverdykh tel v plasticheski deformirovannom [Mechanics of solids in plastically deformed state]*. V knige *Teoriya plastichnosti*. Moskva, Izdatel'stvo inostrannoj literatury, 1948, Pp.57-69.
46. Pechkovskaja K.A. *Sazha kak usilitel' kauchuka [Carbon black as a rubber enhancer]*. Moskva, Izdatel'stvo Khimiya, 1968, 215 p.

*Поступила в редакцию 22 марта 2018 года.*

---

Сведения об авторах:

Гаришин Олег Константинович – д.ф.-м.н., с.н.с., ФГБУН Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Россия; e-mail: [gar@icmm.ru](mailto:gar@icmm.ru)  
Изюмов Роман Игоревич – м.н.с., ФГБУН Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Россия; e-mail: [izumov@icmm.ru](mailto:izumov@icmm.ru)