



تحلیل عددی رفتار مکانیکی پلیمرهای نیمه بلوری از دیدگاه مکانیک آسیب محیط پیوسته

هادی مهدی پور^۱، مهدی گنججانی^{*۱}

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۶/۰۹/۲۷
بازنگری: ۱۳۹۷/۰۲/۱۹
پذیرش: ۱۳۹۷/۰۲/۱۹
ارائه آنلاین: ۱۳۹۷/۰۲/۳۰

کلمات کلیدی:

مکانیک آسیب محیط پیوسته
پلیمر نیمه بلوری
الگوریتم عددی
پلی اتیلن

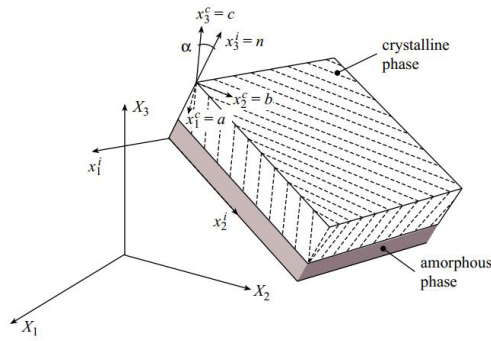
چکیده: در پژوهش حاضر، برای تحلیل رفتار پلیمرهای نیمه بلوری، با استفاده از دیدگاه مکانیک آسیب محیط پیوسته، یک مدل مکانیکی ارائه شده است. در این مدل، یک نقطه مادی از پلیمر نیمه بلوری به صورت مجموعی از توده‌ها، شامل دو فاز بلوری و بی‌شکل و صفحه مرزی فازها در نظر گرفته شده و معادلات اساسی هر یک از فازها تشریح شده است. سپس الگوریتمی عددی برای حل معادلات اساسی هر فاز به صورت مرحله به مرحله ارائه شده است. همچنین با استفاده از میانگین‌گیری حجمی، رفتار کلی ماده برحسب رفتار هر کدام از فازها مشخص گردیده است. به دلیل در دسترس بودن پارامترهای مادی برای پلی اتیلن، رفتار این ماده مورد تحلیل قرار گرفته است. نتایج عددی به دست آمده با نتایج مدل‌ها و آزمایشات قبلی مقایسه شده است، پس از تأیید اعتبار مدل ارائه شده، تأثیر پارامترهای نرخ آسیب فاز بلوری، پارامتر رهایی، نرخ آسیب فاز بی‌شکل، آسیب اشباع، مدول برشی لاستیکی و مقاومت فاز بی‌شکل بر رفتار پلی اتیلن مورد بررسی قرار گرفته است.

۱- مقدمه

مقاومتی پلی اتیلن چگالی بالا تقویت شده با فیبرهای کربنی را در برابر نفوذ در حالت شبه استاتیکی، بررسی کرده است. از دیگر موارد کاربرد متنوع این مواد می‌توان به بررسی رفتار این مواد در ساخت غشاهای مصنوعی در مهندسی ژئوتکنیک [۲] یا باتری‌های یونی [۳] اشاره کرد. با توجه به این کاربردهای فراوان، پژوهش‌های زیادی در زمینه ارائه مدل‌های ساختاری برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی پلیمرهای نیمه بلوری، صورت گرفته است. بویس و آردا [۴] به انجام تست‌های تک‌محوره کششی و فشاری بر روی نمونه پلی‌کربنات پرداختند تا رفتار تنش-کرنش حقیقی این ماده را در محدوده‌ای از نرخ کرنش، در دمای اتاق و با نرخ کرنش ثابت به دست آورند. سپس با در نظر گرفتن ناهمسان‌گردی و سخت‌شوندگی کرنشی، مدلی ارائه کردند تا داده‌های تجربی به دست آمده را بتواند پیش‌بینی کند. جی سل و همکاران [۵] تست‌های کشش تک‌محوره و برش ساده را در محدوده تغییر شکل‌های پلاستیک، بر روی نمونه‌های پلی پروپیلن انجام دادند. آن‌ها با استفاده از سیستم ویدئویی رفتار تنش-کرنش نمونه‌ها را بررسی و با استفاده از روش پراکندگی اشعه ایکس، تحلیل کردند و مدلی ویسکوپلاستیک ارائه دادند. نتیجه مهمی که از آزمایشات به دست آمد این بود که سخت‌شوندگی در تست کشش قابل ملاحظه و در تست برش قابل چشم‌پوشی بود. پژوهش‌هایی نیز در زمینه تأثیر

پلیمرهای نیمه بلوری دسته‌ای از پلیمرها هستند که ساختار مولکولی منظمی دارند. این پلیمرها کاربردهای گسترده‌ای در صنعت دارند. پلی اتیلن و پلی پروپیلن؛ به عنوان دو مثال از این مواد، نیمی از مواد پلاستیکی جهان را شامل می‌شوند؛ بنابراین تحلیل رفتار مکانیکی این مواد همواره اهمیت خاصی داشته و مورد توجه قرار گرفته است. برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی این مواد مدل‌های متنوعی ارائه شده است. دسته‌ای از این مدل‌ها، تحلیل رفتار ماده از دیدگاه مکانیک آسیب محیط پیوسته می‌باشد. در این روش رفتار ماده با معرفی متغیر آسیب بر اساس ویژگی‌های ساختاری ماده و کوپل کردن آن با معادلات حاکم، پیش‌بینی می‌شود. به منظور بهبود روش‌های ساخت و شکل‌دهی، شناخت رفتار این مواد تحت شرایط مختلف، تأثیر پارامترهای فیزیکی ماده بر رفتار مکانیکی آن و بررسی واماندگی ماده، مدل‌های ساختاری مختلفی برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی این دسته از پلیمرها ارائه شده است. به علت استفاده روزافزون از پلیمرهای نیمه بلوری در صنعت و به منظور بهبود خواص مکانیکی آن‌ها، پژوهش‌های فراوانی در زمینه کاربردهای این مواد در صنایع مختلف صورت گرفته است. به عنوان مثال فاروق [۱]، رفتار

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: ganjiani@ut.ac.ir



شکل ۱: شماتیک یک توده مرکب نیمه بلوری

Fig1: Schematic illustration of a composite inclusion

۲-۱- مدل سازی فاز بلوری

بخش بلوری پلیمرها به صورت مونتاژ سه بعدی مولکولها در یک ساختار بلوری اورترومبیک (ساختاری بلوری شامل سه محور نامساوی با زوایای قائمه) در نظر گرفته شده است [۲۱]. این بخش از مجموعه‌ای از بلورهایی بدین شکل، با جهت گیری تصادفی در فضا تشکیل می‌شود. در یک شبکه بلوری، مولکولها به وسیله پیوندهای واندروالسی در کنار هم نگه داشته می‌شوند و مکانیزم تغییر شکل پلاستیک به صورت لغزش در صفحات کریستالوگرافی خاصی تعریف می‌شود [۲۲] و فرض می‌شود تغییر شکل الاستیک قابل چشم پوشی باشد. همچنین از دیدگاه مکانیک آسیب محیط پیوسته، آسیب می‌تواند به صورت تکه تکه شدن بلور، ناشی از جدایش در صفحات کریستالوگرافی تعریف شود [۲۳]. همانند آسیب، سخت شوندگی نیز می‌تواند به سیستم‌های لغزشی مرتبط گردد. در هر نقطه مادی از بلور، ارتباط بین نرخ تغییر شکل، D^c و تنش انحرافی فاز بلوری، S^c به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$D_{ij}^c = M_{ijkl} S_{lk}^c \quad (1)$$

که در آن M_{ijkl} تانسور مرتبه چهار نرمی نامیده می‌شود [۲۴]. با فرض سالم ماندن پیوندهای کووالانسی، رابطه زیر برای نرخ تغییر شکل پلاستیک در شبکه‌ی اورترومبیک نوشته می‌شود [۲۵]:

$$c_i D_{ij}^p c_j = 0 \quad (2)$$

که در آن c_i راستای زنجیره مولکولی، در شبکه بلور است. همچنین تنش به صورت دوبخش مجزا نوشته می‌شود:

$$S_{ij}^c = S_{ij}^* + S_{ij}^\infty \quad (3)$$

که S_{ij}^* تانسور تنش کاهش یافته و S_{ij}^∞ تانسور تنش مقید هستند، با این شرط که [۲۶]:

$$S_{ij}^\infty S_{ij}^* = 0 \quad (4)$$

در معادله (۳) S_{ij}^* در راستای زنجیره مولکولی قرار می‌گیرد، که

ریزساختار اولیه و پارامترهای فیزیکی پلی اتیلن بر رفتار مکانیکی آن انجام شد [۶].

به طور کلی مدلهایی که برای بیان مکانیزم‌های تغییر شکل در پلیمرهای نیمه بلوری بر حسب ریزساختار بیان شده‌اند، در دو دسته کلی قرار می‌گیرند:

- مدلهایی بر پایه پدیده شناسی: بعضی از پژوهشگران به ارائه مدلهایی صرفاً از دیدگاه پدیده شناسی پرداخته‌اند [۵ و ۷-۱۰]. این پژوهشگران رفتار غیرخطی پلیمرهای نیمه بلوری را با استفاده از توابع ریاضی به درستی پیش بینی کرده‌اند که این توابع شامل ضرایبی برای نرخ کرنش و دما می‌باشد.
- مدلهایی بر پایه فیزیک مسأله: در این مدل سازی‌ها، پلیمر نیمه بلوری را به صورت مجموعه‌ای از توده‌ها، مرکب از دو لایه بی شکل و بلوری با جهت گیری تصادفی در نظر می‌گیرند. این مدلها توانایی شبیه سازی رفتار ماده را از دیدگاه ماکروسکوپی دارند [۱۶-۱۱].

هدف پژوهش حاضر این است که با تکیه بر فیزیک مسأله، پلیمر نیمه بلوری را به صورت مجموعی از توده‌ها (مرکب از دو فاز بی شکل و بلوری) در نظر گرفته و مدلی ساختاری بر اساس مدل لی و همکاران [۱۷ و ۱۸] ارائه دهد. با توجه به این که متغیر آسیب در معادلات حاکم، نه تنها برای فاز بلوری، بلکه برای فاز بی شکل کوپل شده است، سخت شوندگی هم برای فاز بلوری نیز در نظر گرفته شده است. سپس، برای حل معادلات، الگوریتمی عددی ارائه شده است.

۲-۲ معادلات اساسی

برای ارائه معادلات حاکم با فرض ایده آل، پلیمر نیمه بلوری به صورت مجموعه‌ای از توده‌ها (شامل دو فاز بلوری و بی شکل) مانند شکل ۱ در نظر گرفته شده است. رفتار کلی توده بر اساس کسر حجمی هر کدام از این دو فاز مشخص می‌گردد. صفحه مرزی، صفحه‌ای است که دو فاز بلوری و بی شکل را به هم متصل نموده و بارهای وارده را منتقل می‌نماید. هر توده توسط بردار نرمال صفحه‌ی مرزی، n ، مؤلفه‌های جهت گیری شبکه بلوری، a, b, c و کسر حجمی فاز بلوری و بی شکل، به ترتیب یعنی χ^a و χ^c مشخص می‌شود. پس از مشخص شدن معادلات هر فاز، با اعمال شرایط تعادل روی صفحه مرزی، رفتار کلی توده مشخص می‌گردد. معادلات کوپل شده با آسیب، از معادلات به دست آمده در مرجع [۱۹] و استفاده از مفهوم تنش معادل مرجع [۲۰] حاصل شده‌اند. در مدل ارائه شده، آسیب فاز بلوری به صورت جدایش صفحات کریستالوگرافیک و همچنین آسیب فاز بی شکل به صورت پیدایش حفره‌ها تعریف شده که سطح موثر تحمل تنش را کاهش می‌دهند. در ادامه، معادلات حاکم بر فاز بلوری مورد بررسی قرار گرفته، مدلی برای رشد آسیب در آن ارائه و معادلات حاکم بر فاز بی شکل و مدل رشد آسیب در این فاز مرور شده است. سپس با استفاده از قاعده میانگین گیری حجمی معادله کلی حاکم بر توده به دست آمده است.

۲-۲- مدل سازی فاز بی شکل

بر اساس مدل های پیشین [۱۷] مدلی جدید بر اساس مکانیک آسیب محیط پیوسته نگاشته شد [۱۹] که زوال خواص مکانیکی پلیمر را نیز لحاظ می نمود. در این مدل، تنش اعمالی به صورت اختلاف بین تنش انحرافی کوشی S_{ij}^a و پیش تنش H_{ij}^a تعریف می شود. همچنین در این مدل فرض می شود که آسیب، مولکول های اتصال دهنده را که نیرو را منتقل می کنند، از بین می برد. برای مشخص نمودن این زوال، متغیر اسکالر آسیب به صورت زیر تعریف می شود:

$$\Omega = \frac{\text{چگالی تعداد مولکول های اتصال دهنده غیرفعال}}{\text{چگالی تعداد مولکول های اتصال دهنده اولیه}} \quad (10)$$

با استفاده از قانون توانی، معادله رفتار کلی ماده در فاز بی شکل به صورت زیر نوشته می شود [۱۹]:

$$D_{ij} = \frac{3}{2} \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^{n_a-1} \frac{S_{ij} - H_{ij}}{\sigma_0} \quad (11)$$

که $\dot{\epsilon}_0$ نرخ کرنش مرجع، σ_0 مقاومت فاز بی شکل و n_a نمای نرخ است. همچنین σ_{eq} تنش معادل است که در مرجع [۲۸] تعریف شده است.

سخت شونده گی فاز بی شکل نیز به صورت تانسور پیش تنش و بر اساس تغییرات آنتروپی شکل مولکول ها، با استفاده از مدل آماری غیر گاوسی و مدل هشت زنجیره، به صورت تابع زیر تعریف می گردد [۲۹]:

$$H_{ij}^a = \frac{C_R}{3} \sqrt{\frac{3N}{I_1}} \ell^{-1} \left(\sqrt{\frac{I_1}{3N}} \right) \left(B_{ij} - \frac{1}{3} I_1 I_{ij} \right) \quad (12)$$

که در آن C_R مدول برشی لاستیکی، N میانگین تعداد پیوندهای صلب، B_{ij} تانسور کوشی-گرین چپ و $\ell(x) = \cosh(x) - 1/x$ تابع لنگوین است که می توان معکوس آن را به صورت $\ell^{-1}(y) \approx \frac{y(3-y^2)}{1-y^2}$ تقریب زد [۳۰]. همچنین $I_1 = B_{ii}$ نامتغیر اول تانسور کوشی-گرین چپ و I_{ij} تانسور همانی مرتبه دوم است. همچنین قانون رشد آسیب را بر پایه ترمودینامیک به صورت زیر می توان معرفی نمود [۳۱]:

$$\Omega = \Omega_\infty \left[1 - \exp(-\alpha W^2) \right] \quad (13)$$

که Ω_∞ و α پارامترهای ماده هستند که به ترتیب آسیب اشباع و نرخ آسیب فاز بی شکل نامیده می شوند. همچنین W تابع انرژی است که با توجه به ارتباط ترمودینامیکی بین انرژی کرنشی و نیروهای درونی [۱۹] و استفاده از مدل هشت زنجیره آردا و بویس [۲۹] به صورت زیر تعریف می شود:

$$W = C_R N \left[\beta \sqrt{\frac{I_1}{3N}} + \ln \frac{\beta}{\sinh \beta} \right] \quad (14)$$

غیر قابل کشش است و S_{ij}^∞ سهمی در تغییر شکل های سازگار با قيود ندارد [۱۹]. بنابراین برای هر بلور، معادله (۱) به صورت زیر باز نویسی می شود:

$$D_{ij}^c = M_{ijkl} S_{lk}^* \quad (5)$$

همان گونه که گفته شد، متغیر آسیب در فاز بلوری به صورت جدایش صفحات گریستالوگرافیک تعریف می گردد. بنابراین با توجه به میانگین تعداد پیوندهای واندروالسی از بین رفته، متغیر اسکالر آسیب برای هر کدام از سیستم های لغزشی بلور، می تواند به صورت زیر تعریف شود:

$$\Omega^\alpha \equiv \frac{\text{تعداد پیوندهای اتمی حاضر}}{\text{تعداد پیوندهای اتمی اولیه}} \quad (6)$$

که $\alpha = \{1, 2, \dots, 8\}$ نمایه سیستم لغزشی است. با فرض این که تعداد پیوندهای اتمی با مساحت مربوط به اتم ها روی همان صفحه، متناسب باشد، می توان نوشت:

$$\Omega^\alpha \equiv \frac{\text{مساحت کل نقص ها}}{\text{مساحت اولیه}} \quad (7)$$

با توجه به معادله (۷) واضح است که متغیر آسیب مقدار تئوری $1 \leq \Omega^\alpha \leq 1$ را می پذیرد. مقدار صفر برای حالت آسیب ندیده و مقدار ۱ برای حالت کاملاً آسیب دیده.

برای ارتباط دادن نرخ کرنش و تنش برشی روی سیستم های لغزشی مختلف، با استفاده از قانون نورتون ۱، تانسور نرمی به شکل زیر نوشته می شود [۲۷]:

$$M_{ijkl} = \dot{\gamma}_0 \sum_\alpha \frac{1}{(1-\Omega^\alpha) g^\alpha} \left| \frac{S_{mn}^* R_{nm}^\alpha}{(1-\Omega^\alpha) g^\alpha} \right|^{n_c-1} R_{ij}^\alpha R_{kl}^\alpha \quad (8)$$

که $\dot{\gamma}_0$ ، g^α و n_c ثابت های ماده هستند که به ترتیب بیان گر نرخ کرنش مرجع، مقاومت بحرانی در مقابل برش و معکوس حساسیت به نرخ می باشند. همچنین $R_{ij}^\alpha = \text{sym}(S_{ij}^\alpha n_j^\alpha)$ بخش متقارن تانسور اشمید است که n_j^α و S_{ij}^α بردارهای یکه عمود برهم هستند که به ترتیب بردار نرمال صفحه لغزش و بردار راستای لغزش می باشند [۲۲]. فرض می شود آسیب وقتی رخ دهد که تنش برشی روی یک سیستم لغزشی بر نیروهای بین مولکولی غلبه کند. با فرض اینکه رشد آسیب در هر کدام از سیستم های لغزشی متفاوت باشد، قانون رشد آسیب را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\dot{\Omega}^\alpha = \dot{\Omega}_0 \left| \frac{S_{ij}^* R_{ij}^\alpha}{(1-\Omega^\alpha) g^\alpha} \right|^m \quad (9)$$

که $\dot{\Omega}_0$ نرخ آسیب مرجع و m میزان حساسیت نرخ آسیب هستند.

طبق قسمت (b) شکل ۲ برای مشخص کردن موقعیت فضایی یک توده، از دو دستگاه مختصات X_1^i, X_2^i, X_3^i و X_1^c, X_2^c, X_3^c به ترتیب برای جهت‌گیری توده (صفحه‌ی مرزی) و جهت‌گیری فاز بلوری استفاده می‌شود. ارتباط بین مختصات کلی و مختصات توده با استفاده

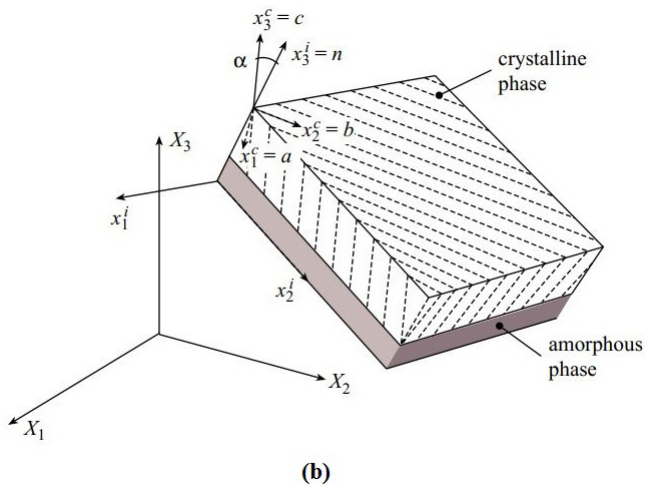
$$\text{از ماتریس انتقال مرتبه دوم } [Q]^i = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{pmatrix}^i \text{ تعریف}$$

می‌شود. با توجه به اینکه سه محور مختصات توده دوبه‌دو بر هم عمودند، بنابراین فقط سه مؤلفه از نه مؤلفه‌ی ماتریس $[Q]^i$ مستقل هستند، لذا برای تعریف این ماتریس به سه پارامتر نیاز است. برای بیان مؤلفه‌های این ماتریس می‌توان از روش زوایای اولر ۱ استفاده کرد [۳۴]. در این روش، همان‌طور که در شکل ۲ قسمت (a) دیده می‌شود، فضای اولری توسط سه زاویه‌ی چرخش $E = \{\varphi, \theta, \psi\}$ تنیده می‌شود. دوران حول محور X_3 ، θ دوران حول محور دوران یافته X_2 و ψ دوران حول محور دوران یافته X_3 است و می‌توان جهت‌گیری صفحه مرزی توده را بر اساس این سه زاویه، به صورت معادله (۲۳) مشخص کرد [۳۴]:

$$[Q]^i = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \cos \theta \sin \psi & \sin \theta \sin \psi \\ -\cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \cos \theta \cos \psi & \sin \theta \cos \psi \\ \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \end{pmatrix}^i \quad (23)$$

که محدوده تغییرات این سه زاویه‌ی دوران به صورت معادله (۲۴) است [۳۵]:

$$0 \leq \psi \leq 2\pi \quad \text{و} \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, 0 \leq \theta \leq \pi \quad (24)$$



1 Euler Angles

که $\beta = \ell^{-1}(r/Nl)$ معکوس تابع لنگوین و r/Nl کسر کشیدگی [۳۲] است و r و l به ترتیب میانگین آماری فاصله دو انتهای یک زنجیره مولکولی و طول یک مونومر هستند.

۳- الگوریتم حل

این بخش به روند حل عددی معادلات ارائه شده به صورت مرحله به مرحله اختصاص دارد. ابتدا روند حل معادلات هر کدام از فازهای بلوری و بی‌شکل بیان می‌شود و سپس با استفاده از قاعده میانگین‌گیری حجمی، رفتار کلی ماده بر حسب ریزساختار هر کدام از فازها مشخص می‌گردد. روند حل معادلات به صورت تکرار دوگانه است، بدین صورت که ابتدا با روند حل تکراری، معادلات را در هر کدام از فازها (مختصات محلی) حل کرده و سپس با روند تکراری دیگر، رفتار کلی ماده به دست می‌آید. پس از همگرایی حل کلی در زمان t_n ، به سراغ حل مسأله در پله‌ی زمانی بعدی یعنی t_{n+1} می‌رویم که بازه زمانی $\Delta t \equiv t_{n+1} - t_n$ مقداری ثابت دارد.

برای مسأله محلی، معادلات زیر باید حل شوند:

$$S_{ij}^a = S_{ij}^a(\bar{S}_{ij}) \quad (15)$$

$$S_{ij}^c = S_{ij}^c(\bar{S}_{ij}) \quad (16)$$

$$D_{ij}^a = \frac{3}{2} \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^{n_a-1} \frac{S_{ij} - H'_{ij}}{1 - \Omega} \quad (17)$$

$$D_{ij}^c = M_{ijkl} S_{lk}^c \quad (18)$$

که در این روابط \bar{S}_{ij} حالت تنش کلی، S_{ij}^a و S_{ij}^c تنش محلی به ترتیب برای فاز بی‌شکل و بلوری و همچنین D_{ij}^c و D_{ij}^a نرخ تغییرشکل برای این دو فاز می‌باشد. بعد از مشخص شدن تنش‌ها و نرخ تغییرشکل‌ها در مختصات محلی، معادلات زیر برای حل مسأله در مختصات کلی باید استفاده گردد:

$$\bar{S}_{ij} = \bar{S}_{ij}(S_{ij}^a, S_{ij}^c) \quad (19)$$

$$\bar{D}_{ij} = \bar{D}_{ij}(D_{ij}^a, D_{ij}^c) \quad (20)$$

ذکر این نکته ضروری است که در این بخش برای کاهش حجم محاسبات عددی، با توجه به روند ذکرشده منبع شماره [۳۳] ماتریس‌های متقارن مرتبه ۲ به صورت بردار 5×1 و ماتریس‌های پادمقارن به صورت بردار 3×1 نوشته می‌شوند؛ به عنوان مثال:

$$\{D\} = \{D_1, D_2, D_3, D_4, D_5\}^T = \begin{matrix} 11 & 22 \end{matrix} \quad (21)$$

$$\left\{ \sqrt{\frac{1}{2}}(D_{11} - D_{22}), \sqrt{\frac{3}{2}}D_{33}, \sqrt{2}D_{32}, \sqrt{2}D_{31}, \sqrt{2}D_{21} \right\}^T$$

$$\{W\} = \{W_1, W_2, W_3\}^T = \{-W_{23}, -W_{13}, -W_{12}\}^T \quad (22)$$

$$\{S^a\} = \left\{ \frac{1}{1-\chi^c} (\bar{S}_1^i - \chi^c S_1^g), \right. \quad (27)$$

$$\left. \frac{1}{1-\chi^c} (\bar{S}_2^i - \chi^c S_2^g), \bar{S}_3^i, \bar{S}_4^i, \frac{1}{1-\chi^c} (\bar{S}_5^i - \chi^c S_3^g) \right\}$$

$$\{S^c\}^i = \{S_1^g, S_2^g, \bar{S}_3^i, \bar{S}_4^i, S_3^g\}^T \quad (28)$$

۴. محاسبه نرخ تغییر شکل در فازهای بی شکل، $\{D^a\}$ و بلوری $\{D^c\}$ (طبق آنچه در بخش‌های بعدی آمده است).

۵. به دست آوردن دستگاه معادلات برای باقیمانده‌ها:

$$\begin{cases} H_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} (D_1^c - D_1^a) - \frac{\sqrt{6}}{6} (D_2^c - D_2^a) \\ H_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} (D_1^c - D_1^a) + \frac{\sqrt{6}}{6} (D_2^c - D_2^a) \\ H_3 = D_5^c - D_5^a \end{cases} \quad (29)$$

۶. محاسبه ماتریس ژاکوبین:

$$[J]_k = \frac{\partial \{H\}_k}{\partial \{S^g\}_k} \quad (30)$$

۷. حل دستگاه معادلات:

$$[J]_k \{\Delta S^g\} = -\{H\}_k \quad (31)$$

که $\{\Delta S^g\}$ مقدار نمو تنش بین دو تکرار k و $k+1$ است.

۸. محاسبه باقیمانده جدید:

$$\{H\}_{k+1} = \{H\}_k + [J]_k \{\Delta S^g\} \quad (32)$$

$$\{S^g\}_{k+1} = \{S^g\}_k + \{\Delta S^g\} \quad (33)$$

۱۰. تکرار مراحل ۳ تا ۹ تا زمانی که بزرگی باقیمانده، $\|\{H\}_{k+1}\|$

کمتر از حد مجاز مد نظر شود.

۱۱. محاسبه وضعیت تنش و نرخ تغییر شکل توده:

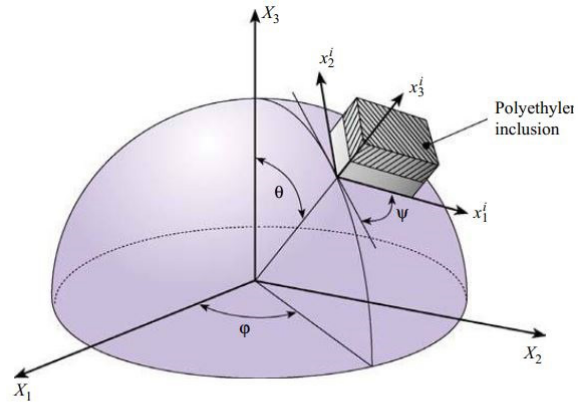
$$\{D\}^i = (1-\chi^c) \{D^a\} + \chi^c \{D^c\} \quad (34)$$

$$\{S\}^i = (1-\chi^c) \{S^a\} + \chi^c \{S^c\} \quad (35)$$

۱۲. تکرار مراحل بالا برای سایر توده‌ها

۳-۲- مدل سازی فاز بی شکل

در این بخش به صورت مرحله به مرحله فرایند محاسبه نرخ تغییر شکل برای فاز بی شکل بحث و نحوه به دست آوردن تانسور پیش تنش و رشد آسیب تشریح می‌شود. ذکر این نکته ضروری است که معادلات اساسی برای فاز بی شکل، در مختصات توده،



(a)

شکل ۲: ارتباط بین مختصات کلی و توده (a) و ارتباط بین مختصات کلی،

مختصات توده و مختصات بلور (b)

Fig2: Relation between general and inclusion coordinate systems (a), and relation between global, inclusion and crystal coordinate system

برای مشخص نمودن جهت گیری شبکه‌ی بلوری در فضا نیز از ماتریس انتقال $[Q]^c$ استفاده می‌شود. روند تولید اعداد تصادفی و سپس تشکیل ماتریس‌های انتقال تمامی توده‌ها و شبکه‌های بلوری آن‌ها در مرجع شماره [۳۶] تشریح شده است. پس از تشکیل ماتریس‌های $[Q]^c$ و $[Q]^i$ می‌توان به سراغ روند حل محلی رفت.

۳-۱- روند حل در مختصات محلی

برای حل مسأله در مختصات محلی، هدف پیدا کردن تنش در هر کدام از فازهای بلوری و بی شکل توده‌هاست. برای این کار از روند حل تکراری نیوتن-رافسون استفاده می‌شود. بعد از اعمال شرایط تعادل برای صفحه مرزی فاز بلور و بی شکل، سه مجهول اصلی در مختصات محلی $S_{11}^c, S_{22}^c, S_{12}^c$ هستند [۳۶]. در هر تکرار، متغیرهای داخلی مسأله ثابت فرض شده و مقادیر مربوط به پله زمانی قبل را اتخاذ می‌کنند. تنها تنش‌های محلی طبق مراحل زیر به روز می‌شوند:

۱. انتقال بردار تنش کلی از مختصات کلی به مختصات محلی

توده:

$$\{\bar{S}\}^i = [\tilde{Q}]^i \{\bar{S}\} \quad (25)$$

که در آن $[\tilde{Q}]^i$ ماتریس انتقالی 5×5 از مختصات ثابت به مختصات صفحه میانی توده است، که مؤلفه‌های آن برحسب مؤلفه‌های ماتریس $[Q]^i$ طبق روند ذکر شده در منبع شماره [۳۶] حاصل می‌شوند. برای انتقال بین مختصات بلور و مختصات ثابت نیز همین روند به صورت مشابه انجام می‌شود.

۲. حدس اولیه برای تنش‌های مجهول:

$$\{S^g\} = \{S_1^g, S_2^g, S_3^g\}^T \quad (26)$$

۳. محاسبه تنش برای فازهای بلوری و بی شکل:

x_1^i, x_2^i, x_3^i نوشته می‌شوند.

۳-۳- مدل‌سازی فاز بلوری

نرخ تغییرشکل و رشد آسیب برای فاز بلوری، با استفاده از معادلات ساختاری این فاز، به صورت مرحله به مرحله به دست می‌آید. معادلات این بخش، در مختصات فاز بلوری یعنی x_1^c, x_2^c, x_3^c نوشته می‌شوند.

۳-۳-۱- محاسبه نرخ تغییرشکل

طبق مراحل آمده در ذیل، برای مدل‌سازی فاز بلوری، ابتدا نرخ تغییرشکل محاسبه می‌گردد:

۱. انتقال بردار تنش از مختصات صفحه میانی توده به مختصات بلور:

$$\{S^c\} = [\tilde{Q}^c][\tilde{Q}^i]^T \{S^c\}^i \quad (46)$$

۲. محاسبه بردار تنش کاهش یافته‌ی بلور [۳۶]:

$$\{S^{c*}\} = \{S_{1i}^c, 0, S_{3i}^c, S_{4i}^c, S_{5i}^c\}^T \quad (47)$$

۳. محاسبه ماتریس نرمی بلور:

$$[M_c]_k = \dot{\gamma}_0 \sum_{\alpha} \frac{\left\{ \{S^{c*}\}_k \{R^{\alpha}\} \right\}^{n_c-1}}{\left((1-\Omega^{\alpha}) g^{\alpha} \right)^{n_c}} \{R^{\alpha}\} \{R^{\alpha}\}^T \quad (48)$$

۴. محاسبه نرخ تغییرشکل در مختصات بلور:

$$\{D^c\} = [M_c] \{S^{c*}\} \quad (49)$$

۵. انتقال بردار نرخ تغییرشکل به مختصات توده:

$$\{D^c\}^i = [\tilde{Q}^i][\tilde{Q}^c]^T \{D^c\} \quad (50)$$

۳-۳-۲- به‌روزرسانی آسیب

برای محاسبات در پله‌های زمانی بعدی، لازم است متغیر آسیب فاز بلوری طبق روند زیر به‌روز رسانی گردد.

۱. محاسبه نرخ آسیب برای هرکدام از سیستم‌های لغزشی، طبق قانون رشد بر اساس معادله (۵۱):

$$\dot{\Omega}_{n+1}^{\alpha} = \dot{\Omega}_0 \left| \frac{\{S^{c*}\} \{R^{\alpha}\}}{(1-\Omega_n^{\alpha}) g^{\alpha}} \right|^m \quad (51)$$

۲. محاسبه آسیب در پله‌ی زمانی:

$$\Omega_{n+1}^{\alpha} = \Omega_n^{\alpha} + \dot{\Omega}_{n+1}^{\alpha} \Delta t \quad (52)$$

۳-۳-۴- روند تکرار برای مسأله در مختصات کلی

بعد از حل وضعیت تنش- کرنش برای تک‌تک توده‌ها، می‌توان حالت کلی تنش $\{\bar{S}\}$ و نرخ تغییرشکل کلی $\{\bar{D}\}$ را بر اساس میانگین حجمی هرکدام از توده‌ها یعنی $v^i = V^i / V$ محاسبه نمود که V^i حجم توده و V حجم مجموع است. روند زیر شامل مراحل اصلی برای حل مسأله در مختصات کلی است:

۳-۲-۱- به‌روز رسانی تانسور پیش‌تنش و آسیب

تانسور پیش‌تنش و تانسور آسیب، با انجام مراحل زیر به‌روز می‌شوند:

۱. انتقال تانسور گرادیان تغییرشکل از مختصات کلی به مختصات توده:

$$[F^a] = [Q^i][F^a][Q^i]^T \quad (36)$$

۲. محاسبه تانسور کوشی-گرین چپ:

$$[B^a] = [F^a][F^a]^T \quad (37)$$

۳. نوشتن تانسور کوشی-گرین چپ به صورت برداری [۳۷]:

$$[B^a] \rightarrow \{B^a\}_6 \quad (38)$$

۴. محاسبه نامتغیر اول تانسور کوشی-گرین چپ:

$$I_1 = B_1^a + B_2^a + B_3^a \quad (39)$$

۵. محاسبه معکوس تابع لنگوین:

$$\beta = \ell^{-1} \left(\sqrt{\frac{I_1}{3N}} \right) \quad (40)$$

۶. محاسبه بردار پیش‌تنش انحرافی:

$$\{H'\} = \frac{C_R}{3} \sqrt{\frac{3N}{I_1}} \ell^{-1} \left(\sqrt{\frac{I_1}{3N}} \right) \left(\{B^a\} - \frac{1}{3} I_1 \{I\} \right) \quad (41)$$

۷. محاسبه انرژی کرنشی:

$$W = C_R N \left[\beta \sqrt{\frac{I_1}{3N}} + \ln \frac{\beta}{\sinh \beta} \right] \quad (42)$$

۸. محاسبه پارامتر آسیب:

$$\Omega = \Omega_{\infty} \left[1 - \exp(-\alpha W^2) \right] \quad (43)$$

۳-۲-۲- محاسبه نرخ تغییرشکل بر حسب تنش

همچنین با محاسبات زیر، نرخ تغییرشکل بر حسب تنش به دست می‌آید:

۱. محاسبه تنش معادل:

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{\{S^a\}}{1-\Omega} - \{H'\} \right)^T \cdot \left(\frac{\{S^a\}}{1-\Omega} - \{H'\} \right)} \quad (44)$$

۲. محاسبه نرخ تغییرشکل فاز بی‌شکل:

$$D_{ij}^a = \frac{3}{2} \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^{n_a-1} \frac{\left\{ \frac{\{S^a\}}{1-\Omega} - \{H'\} \right\}}{\sigma_0} \quad (45)$$

۲. محاسبه تانسور چرخش در پله‌ی زمانی t_{n+1} :

$$\{W^*\}_{n+1} = \{W\} - \mathbb{R}\{W^p\} \quad (63)$$

$$\{A^\alpha\} = \{-A_{23}, A_{13}, -A_{12}\}^T \quad \text{و} \quad \{W^p\} = \sum_\alpha \dot{\gamma}^\alpha \{A^\alpha\}$$

طبق مرجع شماره‌ی [۳۷] برداری شده است.

۳. محاسبه تانسور چرخش در پله‌ی زمانی $t_{n+\omega}$:

$$\{W^*\}_{n+\omega} = \omega \{W^*\}_n + (1-\omega) \{W^*\}_{n+1} \quad (64)$$

۴. محاسبه تانسور چرخش پله‌ای:

$$\{\Upsilon\} = \Delta t \{W^*\}_{n+\omega} \quad (65)$$

۵. محاسبه مقدار تقریبی تابع نمایی [۳۸]:

$$\exp[\Upsilon] = [I] + \frac{2}{1 + |\{\tilde{\omega}\}|^2} \left([\tilde{W}] + [\tilde{W}]^2 \right) \quad (66)$$

که در آن $\{\tilde{\omega}\}$ بردار یکه دوران است که به صورت رابطه‌ی (۶۶)

$$\{\tilde{\omega}\} = \frac{\{\Upsilon\}}{|\{\Upsilon\}|} \tan\left(\frac{1}{2}|\{\Upsilon\}|\right) \quad (67)$$

و $[\tilde{W}]$ ماتریس پادمتقارن متناظر با $\{\tilde{\omega}\}$ است که از رابطه‌ی

(۶۸) بدست می‌آید:

$$[\tilde{W}] = \begin{bmatrix} 0 & -\tilde{\omega}_3 & \tilde{\omega}_2 \\ \tilde{\omega}_3 & 0 & -\tilde{\omega}_1 \\ -\tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_1 & 0 \end{bmatrix} \quad (68)$$

۶. به‌روزرسانی تانسور جهت‌گیری بلور:

$$[Q]_{n+1} = [Q]_n \cdot \exp^T[\Upsilon] \quad (69)$$

۷. تکرار مراحل ۱ تا ۶ برای سایر بلورها:

۴- نتایج و بحث

در این بخش با استفاده از مدل و الگوریتم ارائه‌شده در بخش قبل، رفتار مکانیکی پلی‌اتیلن به عنوان یک پلیمر نیمه‌بلوری، تحت بارگذاری کشش تک‌محوره به‌دست آمده و با نتایج حاصل از آزمایشات مرجع [۳۹] و مدل‌های قبلی [۱۵، ۱۸ و ۳۶] مقایسه می‌شود. همچنین تأثیر پارامترهای فیزیکی این ماده بر رفتار مکانیکی آن، با استفاده از مدل ارائه شده بررسی می‌گردد.

در این تحلیل، مجموعه ۱۰۰ توده از پلی‌اتیلن با کسر حجمی یکسان در نظر گرفته شده است. مقادیر مقاومت برشی سیستم‌های لغزشی با توجه به مرجع [۱۷] در جدول ۱ آمده است. جهت‌گیری هر توده توسط زوایای اولر که در بخش قبل توضیح داده شد، به صورت تصادفی مشخص شده است. فرض شده است که تمام توده‌ها دارای خواص فیزیکی یکسانی باشند که در جدول ۲ آمده‌اند.

۱. محاسبه نرخ تغییرشکل کلی:

$$\{\bar{D}\} = \sum_i v^i [\tilde{Q}^i]^T \{D\}^i \quad (53)$$

۲. محاسبه تنش کلی:

$$\{\bar{S}\} = \sum_i v^i [\tilde{Q}^i]^T \{S\}^i \quad (54)$$

۳. محاسبه نرخ تغییرشکل کلی و نرخ تغییرشکل متوسط معادل:

$$\hat{D} = \sqrt{\frac{2}{3} \{\bar{D}\}^T \cdot \{\bar{D}\}} \quad (55)$$

$$\hat{D} = \sqrt{\frac{2}{3} \{D\}^T \cdot \{D\}} \quad (56)$$

۴. تصحیح مؤلفه‌های مجهول تنش:

$$\bar{S}_u|_{k+1} = \omega \bar{S} + (1-\omega) \bar{S}_u|_k \quad (57)$$

که $\omega \in [0, 1]$ مشخص‌کننده روش ضمنی یا صریح است. به ازای

$\omega = 0$ روش صریح و به ازای $0 < \omega \leq 1$ روش ضمنی می‌باشد.

۵. تکرار روند‌های محلی و کلی تا زمانی که $\|\hat{D} - \hat{D}\|$ از حدمجاز مورد نظر کمتر شود.

۳-۵ به‌روزرسانی یافت

طی فرایندهای تکرار، پس از رسیدن به جواب کلی مناسب، بافت کریستالوگرافیک در پله‌ی زمانی t_{n+1} بر اساس مقادیر متناظر در پله زمانی t_n ، به‌روزرسانی می‌شود. در این بخش مراحل به‌دست‌آوردن جهت‌گیری جدید صفحه میانی توده و شبکه بلوری در پله زمانی t_{n+1} بیان می‌شود.

۳-۵-۱ به‌روزرسانی جهت‌گیری صفحه‌ی میانی

۱. به‌روزرسانی تانسور گرادیان تغییرشکل:

$$[F^a]_{n+1} = [1 - \omega L^a \Delta t]^{-1} [I + (1-\omega)L^a \Delta t] [F^a]_n \quad (58)$$

۲. به‌روزرسانی بردار عمودی صفحه میانی:

$$\{n\}_{n+1} = [F^a]^{-T} \{n\}_n \quad (59)$$

۳. به‌روزرسانی بردارهای درون صفحه میانی:

$$\{v\}_{n+1} = [F^a] \{v\}_n \quad (60)$$

$$\{w\}_{n+1} = \{n\} \times \{v\}_{n+1} \quad (61)$$

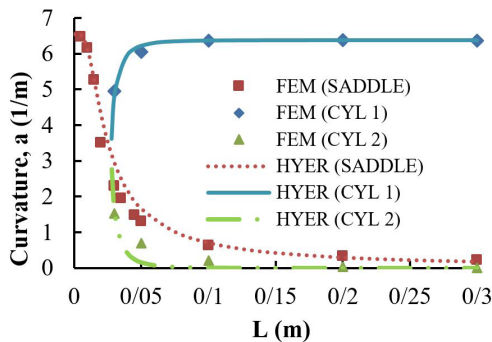
۴. تکرار مراحل ۱ تا ۳ برای بقیه توده‌ها

۳-۵-۲ به‌روزرسانی جهت‌گیری فاز بلوری

۱. محاسبه مقدار تابع رهایی بلور:

$$\mathbb{R} = \tanh(\zeta \hat{\Omega}) \quad (62)$$

معادل در شکل ۳ آمده است. همان طور که این نمودار دیده می شود این مدل نه تنها مطابقت خوبی با نتایج پیشین دارد، بلکه مانند مدل آلوارادو نسبت به سایر آن ها توانایی پیش بینی تنش، تا کرنش های بزرگتری را نیز دارد.



شکل ۳: نمودار تنش-کرنش پلی اتیلن برای کشش تک محوره

Fig3: Stress – strain diagram of polyethylene for uniaxial tension

با توجه به شکل ۳ دیده می شود که ابتدا با اعمال تنش های به نسبت کم، ماده تغییر شکل زیادی از خود نشان می دهد؛ زیرا در حالت اولیه، جهت گیری توده ها به صورت تصادفی است و می توان ماده را به صورت همسان گرد در نظر گرفت. با اعمال اولین تغییر شکل ها، مولکول ها خود را با راستای بارگذاری منطبق کرده و بنابراین برای تغییر شکل های بعدی، نیاز به تنش های بیشتری است.

۴-۲- تأثیر پارامترهای فیزیکی مدل بر رفتار مکانیکی ماده

در این بخش از پژوهش، تأثیر برخی از پارامترهای مدل بر روی رفتار کلی پلی اتیلن بررسی می شود. در بخش اول به بررسی تأثیر نرخ آسیب فاز بلوری و بی شکل پرداخته می شود. بخش های بعد به بررسی تأثیر آسیب اشباع، مقاومت فاز بی شکل و مدول برشی لاستیکی اختصاص دارد. یک مجموع شامل ۱۰۰ توده با جهت گیری تصادفی و تحت کشش تک محوره، برای این بررسی ها در نظر گرفته شده است. ذکر این نکته ضروری است که با تعریف تنش انحرافی و نرخ تغییر شکل کلی به صورت برداری، مطابق روند ذکر شده در مرجع [۳۷]، کشش در جهت محور γ در نظر گرفته می شود. همچنین برای ساده سازی مسائل، فرض می شود مؤلفه های برشی تنش انحرافی قابل چشم پوشی بوده و مؤلفه های تنش عمودی در راستای عرضی، نصف قرینه مقدار متناظر در راستای کشش اعمال شده باشد؛ به زبان ساده تر:

$$\{\bar{D}\} = \left\{ -\frac{1}{2}\bar{D}_2, \bar{D}_2, -\frac{1}{2}\bar{D}_2, ?, ?, ? \right\}^T \quad (71)$$

$$\{\bar{S}\} = \{?, ?, ?, 0, 0, 0\}^T \quad (72)$$

که مؤلفه های مشخص شده با علامت سؤال، مجهول می باشند.

جدول ۱: مقاومت برشی سیستم های لغزشی پلی اتیلن [۱۷]

Table1: Shear strength of Polyethylene slip systems

سیستم لغزشی	مقاومت برشی (g ^a [MPa])	سیستم لغزشی	مقاومت برشی (g ^a [MPa])
(۰۰۱)[۰۰۱]	۸	(۱۰۰)[۰۱۰]	۱۳/۳
(۰۱۰)[۰۰۱]	۲۰	(۰۱۰)[۱۰۰]	۲۰
{۱۱۰}<۰۰۱>	۲۰	{۱۱۰}<۱۱۰>	۱۹/۵

مدل سازی عددی کشش تک محوره با دادن گرادیان سرعت ثابت

زیر به عنوان ورودی، انجام شده است:

$$\bar{L}_{ij} = \dot{\gamma} \begin{bmatrix} -0.5 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & -0.5 \end{bmatrix} \quad (70)$$

که $\dot{\gamma}$ نرخ کرنش ماکروسکوپی و برابر با 0.001 s^{-1} است. در

ادامه به تحلیل تست کشش تک محوره پرداخته می شود.

جدول ۲: پارامترهای مادی پلی اتیلن برای تست کشش تک محوره [۳۶]

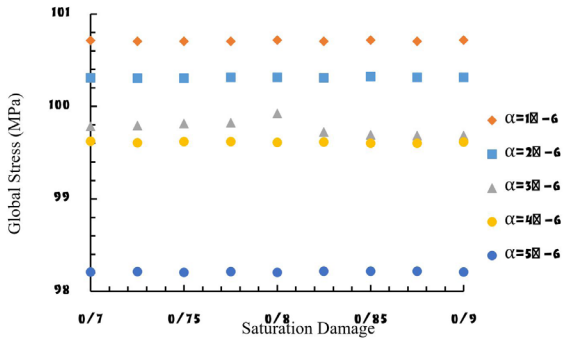
Table2: Polyethylene material parameters for uniaxial tension test

مقدار	پارامتر	واحد
۵	حساسیت نرخ کرنش (n^c)	
۰/۰۰۱	نرخ کرنش مرجع ($\dot{\gamma}_0 [s^{-1}]$)	
۲	حساسیت نرخ آسیب (m)	
۰/۰۰۰۲۵	نرخ آسیب مرجع ($\dot{\Omega}_0 [MPa^{-1}]$)	
۸	پارامترهایی چرخش (ζ)	
۰/۷	بلورینگی (χ^c)	
۵	حساسیت نرخ کرنش (n^a)	
۰/۰۰۱	نرخ کرنش مرجع ($\dot{\gamma}_0 (\dot{\epsilon}_0) [s^{-1}]$)	
۶/۴	مقاومت (σ_0)	
۵۰	تعداد لینک های صلب (N)	
۴	مدول برشی لاستیکی (C_R)	
۰/۸	آسیب اشباع (Ω_∞)	
۰/۰۰۰۰۵	نرخ آسیب (α)	

۴-۱- رفتار تنش-کرنش

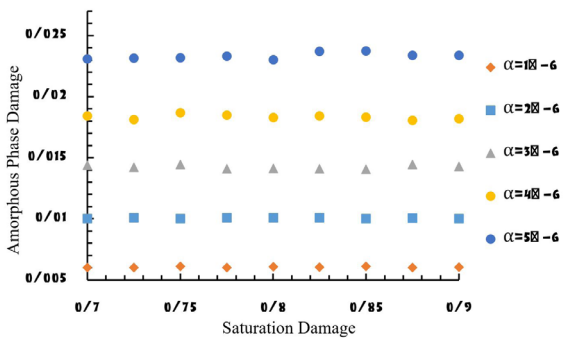
نتایج مدل سازی حاصل از مدل حاضر و همچنین مدل های لی و همکاران [۱۷]، نیکولوف و همکاران [۱۵]، آلوارادو و همکاران [۳۶] و نتایج آزمایشات جی سل [۳۹]، برای تنش معادل بر حسب کرنش

تنش کلی و آسیب فاز بی‌شکل، در شکل‌های ۶ و ۷ بررسی شده است. برای نرخ آسیب‌های 1×10^{-6} ، 2×10^{-6} الی 5×10^{-6} و مقدار آسیب اشباع بین ۷٪ تا ۹٪، مقدار تنش کلی و آسیب فاز بی‌شکل گزارش شده است. همان‌گونه که از این شکل‌ها مشخص است، با افزایش نرخ آسیب فاز بلوری، ماده بیشتر آسیب دیده و مقدار تنش کمتری را تحمل می‌نماید. تأثیر پارامتر آسیب اشباع نیز تقریباً قابل چشم‌پوشی است.



شکل ۶: تأثیر نرخ آسیب و آسیب اشباع بر تنش کلی

Fig6: effect of damage rate and saturation damage on the stress state

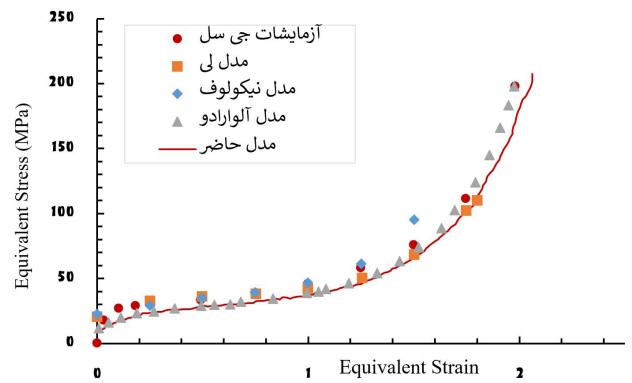


شکل ۷: تأثیر نرخ آسیب و آسیب اشباع بر آسیب فاز بی‌شکل

Fig7: effect of damage rate and saturation damage on the amorphous phase damage

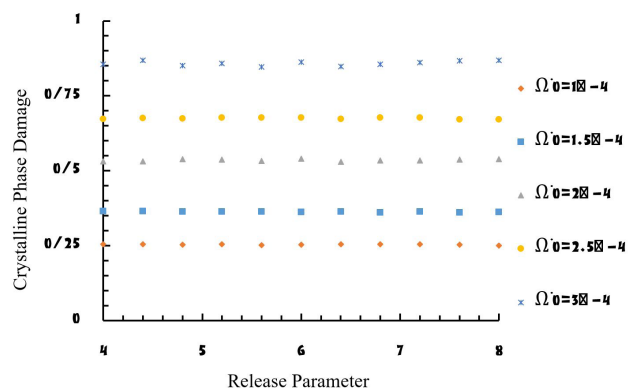
۴-۲-۳- تأثیر مدول برشی لاستیکی و مقاومت فاز بی‌شکل تأثیر دو پارامتر مدول برشی لاستیکی، C_R و مقاومت فاز بی‌شکل، σ_0 بر روی تنش کلی و آسیب فازهای بی‌شکل و بلوری، در شکل‌های ۸ تا ۱۰ قابل مشاهده است. به ازای مدول برشی الاستیک ۲ الی ۶ مگاپاسکال و مقاومت فاز بی‌شکل متغیر بین ۱۰ تا ۲۰ مگاپاسکال، مقدار تنش کلی، آسیب فاز بی‌شکل و آسیب فاز بلوری رسم شده است. با توجه به شکل ۸ با افزایش مدول برشی الاستیک و یا کاهش مقاومت فاز بی‌شکل، مقدار تنش کلی افزایش می‌یابد. همچنین مطابق شکل‌های ۹ و ۱۰ تغییرات آسیب هر دوفاز در مقابل تغییر این دو پارامتر تقریباً مشابه و بدین صورت است که با افزایش مقاومت فاز بی‌شکل و یا کاهش مدول برشی الاستیک، میزان آسیب در این دو بخش افزایش می‌یابد.

۴-۲-۱- تأثیر نرخ آسیب فاز بلوری و پارامتر رهایی در شکل‌های ۴ و ۵ تأثیر پارامترهای رهایی Ω و نرخ آسیب فاز بلوری، $\dot{\Omega}_0$ بر روی تنش کلی مشاهده می‌شود. به ازای نرخ آسیب‌های 1×10^{-4} ، $1/5 \times 10^{-4}$ ، 2×10^{-4} ، $2/5 \times 10^{-4}$ و 3×10^{-4} پارامتر رهایی، متغیر از ۴ تا ۸، مقدار تنش در شکل ۴ و مقدار آسیب فاز بلوری در شکل ۵، به ازای کرنش معادل ۱/۸ به دست آمده است. همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، تنش با افزایش هر کدام از پارامترهای ذکر شده، روند افزایشی خود را تا نرخ آسیب $2/5 \times 10^{-4}$ حفظ می‌کند و پس از آن تقریباً ثابت می‌ماند. همچنین از شکل ۵ قابل استناد است که پارامتر رهایی، تأثیر چندانی بر روی رشد آسیب فاز بلوری ندارد و با افزایش پارامتر رهایی، تغییرات محسوسی در مقدار آسیب این فاز رخ نمی‌دهد. از سوی دیگر همان‌گونه که انتظار می‌رود، با افزایش نرخ آسیب، میزان آسیب فاز بلوری افزایش می‌یابد.



شکل ۴: تأثیر پارامتر رهایی و نرخ آسیب بر وضعیت کلی تنش

Fig4: effect of release parameter and damage rate on stress state



شکل ۵: تأثیر پارامتر رهایی و نرخ آسیب بر آسیب فاز بلوری

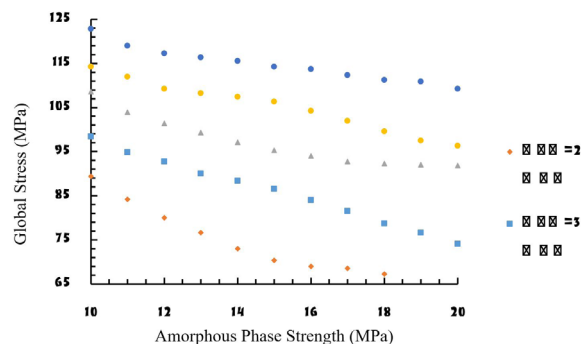
Fig5: effect of release parameter and damage rate on damage of the crystalline phase

۴-۲-۲- تأثیر نرخ آسیب فاز بی‌شکل و آسیب اشباع پارامترهای مادی مربوط به آسیب فاز بی‌شکل شامل نرخ آسیب فاز بی‌شکل، α و آسیب اشباع، Ω_∞ می‌باشند. تأثیر این دو پارامتر بر روی

تئوری لغزش نوشته شده و با فرض جدایش پیوندهای بین مولکولی در سیستم‌های لغزشی، آسیب در فاز بلوری مشخص و تعریف گردید. همچنین برای فاز بی‌شکل نیز معادلات اساسی با پایه‌ای ترمودینامیکی و بر اساس مدل هشت‌زنجیره‌ی آرودا و بویس نوشته شد. آسیب فاز بی‌شکل نیز بر اساس ایجاد حفره‌ها و ناپیوستگی‌های درون ماده که سطح موثر تحمل تنش را کاهش می‌دهند، مشخص و بر اساس چگالی تعداد مولکول‌های اتصال‌دهنده فعال و غیرفعال، تعریف گردید. برای اعمال تأثیر پارامتر آسیب در معادلات اساسی، از مفهوم تنش مؤثر در مکانیک آسیب محیط پیوسته استفاده شد.

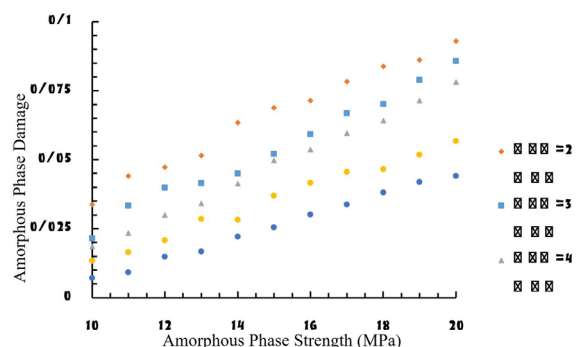
نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی برای تست کشش تک‌محوره گزارش شد. این نتایج مطابقت قابل قبولی با نتایج آزمایشات و مدل‌های ذکر شده در منابع از خود نشان داد. همچنین برای تعیین تأثیر مهم‌ترین پارامترهای مادی بر روی رفتار مکانیکی پلی‌اتیلن، چند مورد مدل‌سازی انجام شد. مشاهده شد که استفاده از دیدگاه مکانیک آسیب محیط پیوسته در معادلات اساسی رفتار پلیمرهای نیمه بلوری، مدل ارائه شده را نسبت به مدل‌های پیشین منعطف‌تر ساخته و امکان بررسی تأثیر پارامترهای فیزیکی مختلف بر رفتار ماده را فراهم می‌سازد. در این مدل، با ارتباط دادن ویژگی‌های ریزساختاری به رفتار کلی ماده، توانایی تحلیل و پیش‌بینی رفتار پلی‌اتیلن به دست آمد. همچنین مشاهده شد که تغییرات مربوط به ریخت شناسی در ساختار ماده، چگونه منجر به رفتاری متفاوت در ابعاد بزرگ می‌گردد. پژوهش ارائه شده را از نظر موفقیت در پیش‌بینی رفتار پلیمرهای نیمه‌بلوری و مطابقت قابل قبول نتایج آن در مورد پلی‌اتیلن در مقایسه با نتایج آزمایشات و مدل‌های قبلی، می‌توان به عنوان گامی رو به جلو برای مدل‌سازی‌های عددی برای این دسته از مواد دانست. در عین حال، این مدل نیازمند اصلاحات و پیشنهادهای است. برای پژوهش‌های آینده پیشنهاد می‌شود که موارد ذکر شده در زیر مد نظر قرار گرفته و اعمال شود:

- مدل ارائه شده فقط برای بارگذاری کشش تک‌محوره و برش ساده استفاده گردید؛ لذا برای پژوهش‌های بعدی پیشنهاد می‌شود با تکمیل این مدل، بارگذاری‌های مرکب و چرخه‌ای نیز مدل‌سازی شوند.
- با توجه به موجود بودن ضرایب و پارامترهای مادی برای پلی‌اتیلن، از این مدل تنها برای پیش‌بینی رفتار این ماده استفاده شد. در آینده می‌توان با استفاده از این مدل و مقایسه با نتایج آزمایشگاهی، پارامترهای مادی و ضرایب را برای سایر پلیمرهای نیمه‌بلوری نیز به دست آورد.
- الگوریتم عددی معرفی شده تنها برای نوشتن کد (در نرم‌افزار متلب) مورد استفاده قرار گرفت. استفاده از این کد نوشته شده برای نوشتن سابروتین وی.یو.مت^۱ و استفاده از آن در تحلیل‌های اجزاء محدود نرم‌افزار آباکوس می‌تواند مفید و حائز اهمیت باشد.



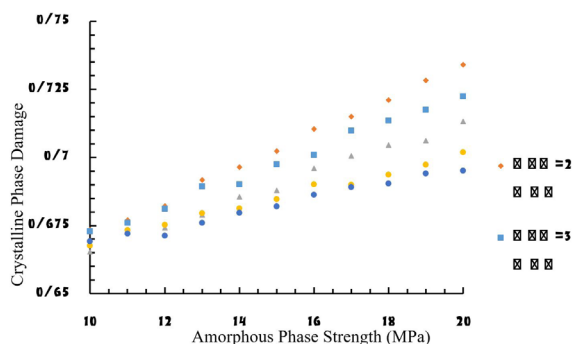
شکل ۸: تأثیر مقاومت فاز بی‌شکل و مدول برشی لاستیکی بر وضعیت تنش کلی

Fig8: Effect of amorphous phase strength and rubber shear modulus on the stress state



شکل ۹: تأثیر مقاومت فاز بی‌شکل و مدول برشی لاستیکی بر آسیب فاز بی‌شکل

Fig9: Effect of amorphous phase strength and rubber shear modulus on the amorphous phase damage



شکل ۱۰: تأثیر مقاومت فاز بی‌شکل و مدول برشی لاستیکی بر آسیب فاز بلوری

Fig 10: Effect of amorphous phase strength and rubber shear modulus on the crystalline phase damage

۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش با در نظر گرفتن پلیمرهای نیمه بلوری به صورت مجموعی از توده‌ها شامل دو فاز بلوری و بی‌شکل، امکان پیش‌بینی رفتار مکانیکی این دسته از پلیمرها با مرتبط ساختن ویژگی‌های مکانیکی ماده و ریزساختار ماده، فراهم شد. برای بخش بلوری، معادلات اساسی از دیدگاه مکانیک آسیب محیط پیوسته و بر اساس

tensile deformation accompanied by neck propagation, *International Journal of Plasticity*, 27(12) (2011) 2085-2102.

[10] F. Zaïri, M. Naït-Abdelaziz, K. Woznica, J.-M. Gloaguen, Elasto-viscoplastic constitutive equations for the description of glassy polymers behavior at constant strain rate, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 129(1) (2007) 29-35.

[11] S. Ahzi, A. Makradi, R. Gregory, D. Edie, Modeling of deformation behavior and strain-induced crystallization in poly (ethylene terephthalate) above the glass transition temperature, *Mechanics of materials*, 35(12) (2003) 1139-1148.

[12] G. Ayoub, F. Zaïri, C. Fréderix, J.-M. Gloaguen, M. Naït-Abdelaziz, R. Seguela, J.-M. Lefebvre, Effects of crystal content on the mechanical behaviour of polyethylene under finite strains: experiments and constitutive modelling, *International Journal of Plasticity*, 27(4) (2011) 492-511.

[13] G. Ayoub, F. Zaïri, M. Naït-Abdelaziz, J. Gloaguen, Modelling large deformation behaviour under loading–unloading of semicrystalline polymers: application to a high density polyethylene, *International Journal of Plasticity*, 26(3) (2010) 329-347.

[14] J. Richeton, S. Ahzi, K. Vecchio, F. Jiang, A. Makradi, Modeling and validation of the large deformation inelastic response of amorphous polymers over a wide range of temperatures and strain rates, *International journal of solids and structures*, 44(24) (2007) 7938-7954.

[15] S. Nikolov, R. Lebensohn, D. Raabe, Self-consistent modeling of large plastic deformation, texture and morphology evolution in semi-crystalline polymers, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(7) (2006) 1350-1375.

[16] M. Boyce, S. Socrate, P. Llana, Constitutive model for the finite deformation stress–strain behavior of poly (ethylene terephthalate) above the glass transition, *Polymer*, 41(6) (2000) 2183-2201.

[17] B. Lee, A. Argon, D. Parks, S. Ahzi, Z. Bartczak, Simulation of large strain plastic deformation and texture evolution in high density polyethylene, *Polymer*, 34(17) (1993) 3555-3575.

• در مدل ارائه شده وابستگی به نرخ کرنش و به طور کلی زمان، لحاظ نشده و برای نرخ کرنش‌های ثابت مدل‌سازی‌ها صورت گرفت. با در نظر گرفتن وابستگی زمانی و نوشتن معادلات ویسکوالاستیک، می‌توان رفتار ویسکوالاستیک پلیمرهای نیمه‌بلوری و پدیده خزش را در این مواد بررسی نمود.

مراجع

[1] Ö.F. Erkendirici, Investigation of the quasi static penetration resistance behavior of carbon fiber reinforced laminate HDPE composites, *Composites Part B: Engineering*, 93 (2016) 344-351.

[2] W.W. Müller, F. Saathoff, Geosynthetics in geoenvironmental engineering, *Science and technology of advanced materials*, 16(3) (2015) 034605.

[3] J. He, J. Liu, J. Li, Y. Lai, X. Wu, Enhanced ionic conductivity and electrochemical capacity of lithium ion battery based on PVDF-HFP/HDPE membrane, *Materials Letters*, 170 (2016) 126-129.

[4] M. Boyce, E. Arruda, An experimental and analytical investigation of the large strain compressive and tensile response of glassy polymers, *Polymer Engineering & Science*, 30(20) (1990) 1288-1298.

[5] C. G'sell, V. Favier, J. Hiver, A. Dahoun, M. Philippe, G. Canova, Microstructure transformation and stress-strain behavior of isotactic polypropylene under large plastic deformation, *Polymer Engineering & Science*, 37(10) (1997) 1702-1711.

[6] T. Amornsakchai, R. Olley, D. Bassett, M. Al-Hussein, A. Unwin, I. Ward, On the influence of initial morphology on the internal structure of highly drawn polyethylene, *Polymer*, 41(23) (2000) 8291-8298.

[7] C. G'sell, J. Jonas, Determination of the plastic behaviour of solid polymers at constant true strain rate, *Journal of materials science*, 14(3) (1979) 583-591.

[8] C. G'sell, A. Dahoun, Evolution of microstructure in semi-crystalline polymers under large plastic deformation, *Materials Science and Engineering: A*, 175(1-2) (1994) 183-199.

[9] M. Uchida, N. Tada, Sequential evaluation of continuous deformation field of semi-crystalline polymers during

- [28] J. Lemaitre, A course on damage mechanics, Springer Science & Business Media, 2012.
- [29] M.C. Boyce, E.M. Arruda, Constitutive models of rubber elasticity: a review, *Rubber chemistry and technology*, 73(3) (2000) 504-523.
- [30] A. Cohen, A Padé approximant to the inverse Langevin function, *Rheologica acta*, 30(3) (1991) 270-273.
- [31] P. Fotiu, H. Irschik, F. Ziegler, Dynamic plasticity: structural drift and modal projections, *Nonlinear dynamics in engineering systems* (Schiehlen, W., ed.), (1990) 75-82.
- [32] L.R.G. Treloar, *The physics of rubber elasticity*, Oxford University Press, USA, 1975.
- [33] P. Lequeu, P. Gilormini, F. Montheillet, B. Bacroix, J. Jonas, Yield surfaces for textured polycrystals—I. Crystallographic approach, *Acta Metallurgica*, 35(2) (1987) 439-451.
- [34] J.J. Craig, *Introduction to robotics: mechanics and control*, Pearson Prentice Hall Upper Saddle River, 2005.
- [35] A. MORAWIEC, Orientations and Rotations. Computations in Crystallographic Textures. x+ 200 pp, in, Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag. Price Euros, 2004.
- [36] J. Alvarado-Contreras, M. Polak, A. Penlidis, Numerical implementation of a damage-coupled material law for semicrystalline polyethylene, *Engineering Computations*, 29(3) (2012) 295-320.
- [37] J. Simo, T.J. Hughes, *Computational inelasticity*, volume 7 of interdisciplinary applied mathematics, in, Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [38] J. Angeles, *Rational kinematics*, Springer Science & Business Media, 2013.
- [39] C. G'sell, J. Jonas, Yield and transient effects during the plastic deformation of solid polymers, *Journal of Materials Science*, 16(7) (1981) 1956-1974.
- [18] B. Lee, D. Parks, S. Ahzi, Micromechanical modeling of large plastic deformation and texture evolution in semi-crystalline polymers, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(10) (1993) 1651-1687.
- [19] J.A. Alvarado-Contreras, M.A. Polak, A. Penlidis, Constitutive modeling of damage evolution in semicrystalline polyethylene, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 132(4) (2010) 041009.
- [20] J. Lemaitre, How to use damage mechanics, *Nuclear engineering and design*, 80(2) (1984) 233-245.
- [21] C. Bunn, Molecular Structure and the Crystallinity of Long-Chain Polymers, *Journal of Applied Physics*, 25(7) (1954) 820-825.
- [22] P. Bowden, R. Young, Deformation mechanisms in crystalline polymers, *Journal of Materials Science*, 9(12) (1974) 2034-2051.
- [23] R. Seguela, Dislocation approach to the plastic deformation of semicrystalline polymers: kinetic aspects for polyethylene and polypropylene, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 40(6) (2002) 593-601.
- [24] J. Hutchinson, Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials, in: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, 1976, pp. 101-127.
- [25] S. Schoenfeld, S. Ahzi, R. Asaro, Elastic-plastic crystal mechanics for low symmetry crystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(3) (1995) 415-446.
- [26] D.M. Parks, S. Ahzi, Polycrystalline plastic deformation and texture evolution for crystals lacking five independent slip systems, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(5) (1990) 701-724.
- [27] J. Alvarado-Contreras, M.A. Polak, A. Penlidis, Micromechanical approach to modeling damage in crystalline polyethylene, *Polymer Engineering & Science*, 47(4) (2007) 410-420.