

УДК 539.3
MSC2020 74A50

© К. А. Чехонин¹

Микромеханическая модель высокоэнергетического материала при отверждении

При отверждении эластомерных композитов неизбежно возникают остаточные напряжения, которые играют важную роль в формировании их конечных свойств. В настоящей работе для лучшего понимания влияния макромасштабных факторов таких как распределение температуры, степени отверждения и механических деформаций на эволюцию напряжений и микроструктуру композита. На микро-уровне используется модифицированная физически обоснованная модель Арруды – Бойс и представительный объем рассматриваемого композита.

Ключевые слова: *Эластомерный композит, технологические напряжения, конечно-элементный анализ, микромеханическая модель Арруды – Бойс, многомасштабное моделирование.*

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202212>

Введение

Высокоэнергетический материал представляет собой композит из эластомерной матрицы наполненной до 90% от общего объема полидисперсным упругим наполнителем (окислитель, алюминий и т.д.) [1]. В начальный момент времени смесь эластомера и наполнителя представляет высоковязкую среду способную к структурированию наполнителя в матрице (тиксотропные свойства). В процессе отверждения (переход из жидкого состояния в твердое) рассматриваемой среды неизбежно возникают технологические напряжения, которые играют важную роль на окончательные свойства композита. Механизм возникновения технологических напряжений, микротрещин и отслоений наполнителя от матрицы и их эволюцию в процессе отверждения сложно понять без рассмотрения микроструктуры композита с выделением среднестатистического представительного объема. Рассматриваемая задача является многомасштабной, нелинейной с сингулярностью решения и неизвестными границами и требует больших вычислительных ресурсов.

¹Вычислительный центр ДВО РАН Хабаровского ФИЦ, 680063, г. Хабаровск, ул. Ким-Ю-Чена, 65. Электронная почта: lex7861@rambler.ru

1. Определяющие соотношения

Обзор математических моделей используемых для описания деформационных свойств при отверждении эластомеров и композитов на их основе приведен в работе [2–4], где получены и определяющие соотношения отверждаемого эластомера в связанной постановке, геометрической и физической нелинейности рассматриваемых задач. Ключевым внутренним параметром описания деформационных свойств является степень полимеризации (отверждения, вулканизации).

Альтернативой построения определяющих уравнений является использование моделей основанных на микроструктурном представлении механических свойств формируемой сетки отверждаемого эластомера. Рассматриваемый подход позволяет на основе эволюции строения сетки получать физически обоснованные модели сложных деформационных свойств эластомеров при их фазовом переходе. Использование модели Арруды – Бойс [3] приводит к гибриднему потенциалу, предложенному в работе [4], следующего вида

$$\begin{aligned} \rho_0 \varphi = & \sum_{i=1}^8 \mu N \omega_i \left[\gamma_i \lambda_i^r + \ln \frac{\gamma_i}{\text{sh } \gamma_i} \right] + C_0 \left(T_{ind} \log \left(\frac{T}{T_{ind}} \right) \frac{(1-\alpha)^{n+1}}{n+1} - T_0 \log \left(\frac{T_0}{T_{ind}} \right) \right) + \\ & + C_1 \left(T - T_0 - T \log \left(\frac{T}{T_0} \right) \right) - C_2 \frac{(T - T_0)^2}{2T_0}, \\ \rho_0 \beta = & \rho (J_m - 1) + \frac{p^2 J_T J_\alpha}{2K_v}, \end{aligned}$$

где $N = N(\alpha)$ – количество сегментов Куна в полимерной цепи, $\lambda_i^r = \sqrt{N^{-1} C : [\mathbf{t}_i \otimes \mathbf{t}_i]}$ – суммарный вклад в относительную кратность деформации в функции от направления деформации полимерной цепи, μ, K_v – сдвиговой и объемный модули, \mathbf{t}_i – вектор направления деформации (цепи), $\lambda_i = \sqrt{N} \lambda_i^r$ – кратность деформации, ω_i – весовой фактор и обратная функция Ланжевена с аппроксимацией Паде

$$\gamma_i : = \mathcal{L}^{-1}(\lambda_i^r) \approx \lambda_i^r \left[3 - (\lambda_i^r)^2 \right] \left[1 - (\lambda_i^r)^2 \right]^{-1}.$$

Релаксационную (вязкую) часть потенциала свободной энергии для i -ой полимерной цепи можно представить в виде

$$(\Psi_{neq})_i = \frac{\mu_v}{2} [\ln \lambda_i - \varepsilon_i]^2,$$

При протекании реакции отверждения полимерная цепь эластомера растет. Текущее количество сегментов Куна в полимерной цепи можно определить исходя из уравнения сохранения массы $N(\alpha) = \frac{\mu_0 N_0}{\mu(\alpha)}$, где N_0 – начальное количество сегментов в цепи мономера. Эволюцию степени отверждения в расчетной области определяем из уравнения [4]

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\varkappa}{J} \exp \left(- E_a / (RT) \right) \left\langle C_0 T_{ind} \log \left(\frac{T}{T_{ind}} \right) (1 - \alpha)^n + \gamma_\alpha \frac{\partial \rho}{\partial \alpha} J_\alpha^{-1} p \right\rangle$$

а температуру из уравнения энергии

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla_i \lambda \nabla_i T + Q_v.$$

2. Результаты расчетов

Подробная постановка краевой задачи отверждения осесимметричных крупногабаритных изделий с использованием высокоэнергетических материалов и матрицы из эластомера приведена в недавних работах [1, 2, 4, 5] с разработанным численным алгоритмом ее решения на основе метода конечных элементов и собственной реализацией программного кода. Размеры расчетной области, граничные условия, значения теплофизических и кинетических параметров берем из доступной работы [1]. Последовательность численного моделирования следующая: в начале производим расчет эволюционного процесса отверждения и охлаждения изделия с осевой симметрией (рис. 1) с использованием определяющих уравнений полученных в работе [4]. Получаем распределение температуры, степени отверждения, напряжений и деформаций по области во времени. Выделяем зоны с концентрацией опасных растягивающих напряжений приводящих к возможному образованию дефектов с вычислением уровня повреждаемости по расчетной области по алгоритму приведенному в работе [2]. В дальнейшем в выделенной зоне (для мезо-размерного масштаба это узел конечно-элементной сетки) расчетной области формируем базу начальных и изменяющихся по времени данных о степени отверждения, температуры и компонентов тензора деформаций, которые являются начальными и граничными условиями при рассмотрении эволюции напряженно-деформированного состояния в представительном объеме отверждаемого композита.

На рис. 2 изображен представительный объем композита размером $L=0,08$ мм с построенной адаптированной конечно-элементной сеткой (шаг $h=L/40$). Его размер получен путем варьирования исходя из условий сходимости осредненных по объему конечного элемента напряжений. На границе между наполнителем и отверждаемой

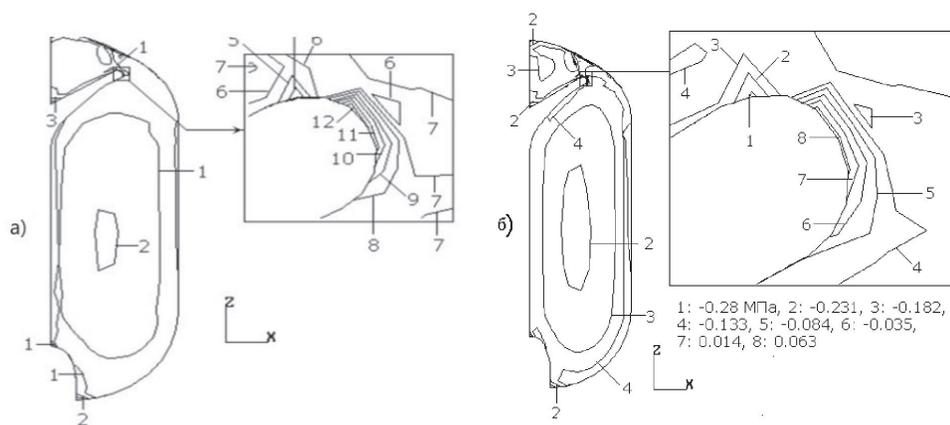


Рис. 1. а) Изолинии поврежденности композита с шагом 0.01 с максимальной поврежденностью среды $d=0.15$; б) изолинии радиальных напряжений в момент гелирования матрицы композита ($t=20$ час)

средой устанавливаем условия адгезии, с известным изменением предельных напряжений отслоения и относительного перемещения контактируемых поверхностей [2]. После отслоения наполнителя от матрица на свободных границах устанавливаем граничные условия Синьорини с трением [1]. Кинетику накопления повреждений в матрице производим с использованием экспоненциальной модели и нелокальной градиентной модели эффективных деформаций, учитывающих исторический их максимум [2]. На рис. 1 приведены изолинии повреждаемости композита и радиальный напряжений в момент гелеобразования композита в пресс-форме. Из результатов расчета следует, что максимальные растягивающие напряжения возникают в вершине зонтичной области изделия, что приводит и к концентрации уровня поврежденности, которая достигает фактически условий возникновения микротрещин, отслоений и развития магистральных трещин.

На рис. 3 приведена эволюция микроструктуры в отверждаемом композите в различные моменты времени. В момент гелеобразования материала матрицы происходит резкий рост его химической усадки, что в условиях нулевой адгезии приводит к отслоению матрицы от наполнителя (рис. 3 а) или, с учетом начальной прочности по максимальным напряжениям 800 Па на рис. 3 б). На стадии охлаждения композита рис. 3 г), д) в нем начинают развиваться микротрещины вплоть до образования магистральной.

Заключение

Предложена микромеханическая физически-мотивированная модель отверждения высокоэнергетического композита с матрицей из эластомера. Проведено термодинамическое ее согласование с получением определяющих соотношений. Путем

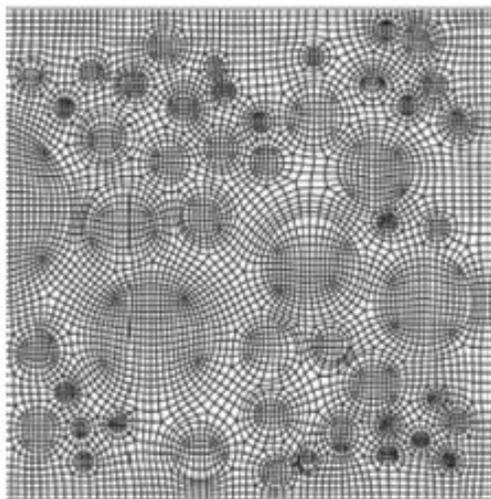


Рис. 2. Конечно-элементная сетка для представительного объема

вычислительного эксперимента показано влияние условий отверждения на эволюцию микроструктуры композита. При проведении исследований были использованы ресурсы “Центр для обработки и хранения научных данных Дальневосточного отделения РАН” в рамках проекта Министерства науки и Высшего образования РФ проект № 075-15-2021-663.

Список литературы

- [1] К. А. Чехонин, “Основы теории отверждения твердых ракетных топлив”, *Вестник ИТПС*, **12**:1 (2016), 131–145.
- [2] К. А. Chekhonin, V. D. Vlasenko, “The Role of Curing Stresses in Subsequent Response and Damage of High Energetic materials”, *Journal of Physics: Conference Series. The conference on High Energy Processes in Condensed Matter (HEPCM)-2021*, 2021, 55–63.
- [3] E. M. Arruda, M. C. Boyce, “A 3-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **41** (1993), 389–412.
- [4] К. А. Чехонин, “Термодинамически согласованная связанная модель отверждения эластомеров при больших деформациях”, *Дальневосточный математический журнал*, **22**:1 (2022), 107–118.
- [5] К. А. Chekhonin, V. D. Vlasenko, “Numerical Modelling of Compression Cure High-Filled Polymer Material”, *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, **14**:6 (2021), 805–814.

Поступила в редакцию
27 мая 2022 г.

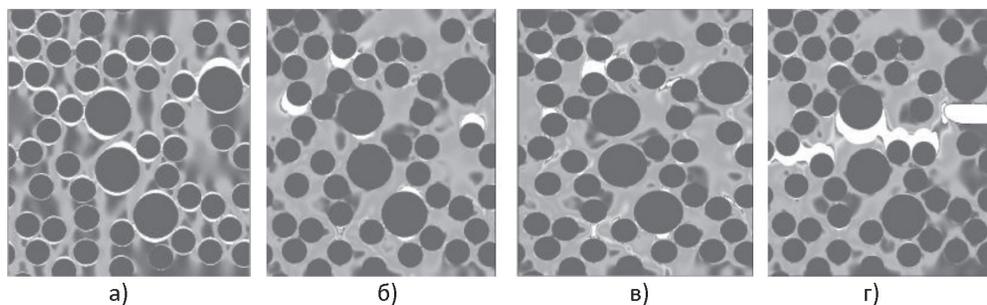


Рис. 3. Эволюция микроструктуры в отверждаемом композите в момент гелеобразования: а) с нулевым значением начальных предельных напряжений адгезии; б) начальная прочность адгезии по напряжениям 800 Па; в) микроструктура в конце термостатирования; г) при охлаждении изделия от температуры формования $T=80$ градусов до комнатной температуры

*Chekhonin K. A.*¹ Micromechanical model of high-energy materials to the curing. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2022. V. 22. No 1. P. 119–124.

¹ Computer Centre of Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

ABSTRACT

During curing process of elastomeric composites residual stresses inevitably develop and play an important role in the final mechanical properties of composites. This work aims at a better understanding the effects of macro-level factors, including temperature, degree of cure variation and mechanical strains on micro-scale stresses with modification the Model Arruda-Boyce, and a Representative Volume Element to predict technology stresses in matrix.

Key words: *elastomeric composites, technology stresses, Finite element analysis, Arruda-Boyce micromechanical model, Multi-scale modeling.*

References

- [1] K. A. Chekhonin, “Osnovy teorii otverzhdeniia tverdykh raketnykh topliv”, *Vestnik ITPS*, **12**:1 (2016), 131–145.
- [2] K. A. Chekhonin, V. D. Vlasenko, “The Role of Curing Stresses in Subsequent Response and Damage of High Energetic materials”, *Journal of Physics: Conference Series. The conference on High Energy Processes in Condensed Matter (HEPCM)-2021*, 2021, 55–63.
- [3] E. M. Arruda, M. C. Boyce, “A 3-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **41** (1993), 389–412.
- [4] K. A. Chekhonin, “Termodinamicheski soglasovannaia sviazannaia model’ otverzhdeniia elastomerov pri bol’shikh deformatsiakh”, *Dal’nevostochnyi matematicheskii zhurnal*, **22**:1 (2022), 107–118.
- [5] K. A. Chekhonin, V. D. Vlasenko, “Numerical Modelling of Compression Cure High-Filled Polymer Material”, *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, **14**:6 (2021), 805–814.