

Т.В. Анисимова,
Э.М. Карташов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛОВОГО РАЗРУШЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ МОНОВОЛОКОН

УДК 539.3

Исследование процессов теплового разрушения материалов, вызванных взаимодействием интенсивных тепловых потоков с твердыми телами, составляет содержание проблемы термической прочности, актуальность которой возросла особенно в последние десятилетия в связи с созданием мощных излучателей энергии и их использованием в технологических операциях. Новые технологические приемы в различных отраслях промышленности основаны на интенсивном нагреве материалов плазменными потоками, лазерными или электронными лучами.

Накоплено огромное количество публикаций, описывающих эти процессы в ядерной энергетике, в авиа- и ракетостроении и космической технике, в турбиностроении и эксплуатации турбинных установок и т.д. Интенсивное развитие указанных областей, а также микроэлектроники, электротехники потребовало создания конструкционных, в частности полимерных материалов, отличающихся термостойкостью и термопрочностью. Вопросы терморазрушения материалов стали выходить на первые позиции в связи с практическими запросами современной техники.

Многие аспекты этой проблемы подробно разработаны теоретически и экспериментально. Вместе с тем вопросы термокинетики процесса разрушения полимерных волокон при чисто тепловом нагружении остались одной из наименее разработанных областей в теории теплового разрушения. Построение такой обобщенной теории базируется на объединении трех самостоятельных подходов: механического, структурно-кинетического и термодинамического.

Данная работа посвящена построению указанной теории для полимерных волокон.

Регистрация субмикроскопических трещин в реальных полимерных волокнах позволила установить их дискообразную форму, расположение внутри объема образца перпендикулярно оси нагружения и весьма малые размеры микротрещин

($90-3000 \text{ \AA}$) при диаметре образца $2R^*$ в несколько миллиметров [1]. Также была установлена независимость критической длины трещины R_k от поперечного сечения образца. Таким образом, для характеристики трещины имеет место весьма важное соотношение:

$$\lambda \ll R_0 \leq R(t) \leq R_k \ll R^*, \quad 0 \leq t \leq \tau. \quad (1)$$

где R_0 – начальный радиус трещины, $R(t)$ – текущее значение радиуса, τ – время жизни образца, λ – флуктуационное продвижение трещины. Наибольший интерес представляют случаи установившегося теплового состояния $T(x,y,z)$ в твердых телах с трещиной. Экспериментальные данные в [1] показывают, что при установившемся тепловом потоке в теле с трещиной происходит значительное увеличение температурных напряжений, вызванное локальным возрастанием величины температурного градиента в окрестности трещины V_a . Можно полагать, что термоупругие поля расширения (как и их механические аналоги) увеличивают интенсивность напряжений в вершине трещины, заставляя ее расти. Эксперименты подтверждают это предположение [1]. На полимерный образец в виде штабика (конечного сплошного цилиндра) с внутренней дискообразной осесимметричной трещиной воздействовали тепловым потоком вдоль оси симметрии образца ортогонально трещине. По мере нагрева напряженное состояние образца изменялось: увеличивалась концентрация напряжений в вершине трещины, и через некоторое время образец разрушался. Так

как во время опыта механическая нагрузка оставалась неизменной, то фактором, определяющим разрушение, было термоупругое поле. Таким образом, указанные случаи представляют особый интерес для теории теплового разрушения с позиций кинетической, термофлуктуационной концепции [1]: необходимо описать рост трещины разрушения, вычислить соответствующую долговечность τ , а также основные параметры и предельные характеристики процесса теплового разрушения, зависящие от вида тепловой нагрузки, физико-механических и термофизических характеристик материала, его структуры с целью разработки способов управления кинетикой роста трещины.

Непосредственное исследование кинетики процесса разрушения в каждом конкретном случае нагружения полимерного образца (тепловое, механическое, электрическое и др.) производится на основе аналитической формулы скорости роста трещины как функции ее текущего радиуса $R(t)$, поля напряжений σ^* в области дефекта V_a (флуктуационный объем), температуры T_b в окрестности круговой трещины и молекулярных констант, характеризующих структуру полимера, а также элементарный акт разрыва напряженных связей

$$v = v(R; \sigma^*; T_b; V_a; U; \dots), \quad (2)$$

где U – энергия активации процесса разрыва связей на границе трещины. Основная проблема при этом состоит в получении конкретного выражения для указанной формулы (2) с учетом основных физических закономерностей кинетики процесса разрушения, выявленных экспериментально для данного случая, и их влияния на элементарный акт разрушения в объеме V_a . Локальное напряжение в (2) $\sigma^* = \varphi(\sigma, \beta, R, \dots)$ – одна из важнейших характеристик прочности. Величина σ^* зависит от приложенного к образцу (внешнего) напряжения σ , текущего радиуса трещины $R(t)$, геометрии

образца, конфигурации трещины, ее расположения в образце (поверхностная или внутренняя) и коэффициента концентрации напряжения β (смысл этой величины представлен ниже); σ^* рассчитывается методами механики хрупкого разрушения на основе решения краевых задач математической теории трещин [1]. Фактически на основе выражения (2) изучается взаимное влияние макро – и микростадий процесса разрушения, так как с помощью (2) определяются основные параметры и предельные характеристики процесса разрушения, устанавливается связь между молекулярными константами, характеризующими структуру материала, и макроскопическими характеристиками прочности, и, наконец, развивается методика расчета долговечности образца в тех или иных условиях его испытаний. Таким образом, в рамках указанной идеологической схемы объединяются три подхода: структурно-кинетический (термофлуктуационная теория для описания, прежде всего, элементарного акта процесса разрушения, что связано с выводом конкретного выражения (2)), механический (методы механики хрупкого разрушения для описания локального напряжения в вершине трещины в условиях определенного режима нагружения образца), термодинамический (для расчета величины безопасного напряжения).

Долговечность образца $\tau = \tau(\sigma, T)$ (где T – температура испытания, в общем случае отличная от температуры в вершине трещины T_b) складывается из времен процесса разрыва на первой (флуктуационной) стадии $\tau_\phi(\sigma, T)$ при росте трещины со скоростью (2) от начальной длины R_0 до критической R_k и второй (атермической) τ_k с предельной скоростью распространения разрушения в твердом теле $v_k = 0,38\sqrt{E/\rho}$ (формула Робертса-Уэллса), где E -модуль Юнга, ρ - плотность материала:

$$\tau = \tau_\phi + \tau_\kappa = \int_{r_0}^{r_\kappa} \frac{dr}{\nu(r; \sigma^*; T_B, \dots)} + \frac{R^* - r_\kappa}{\nu_\kappa} \quad (3)$$

Основополагающим в развитии данной теории разрушения является расчет величины локального напряжения σ^* .

На основании (1) образец в виде волокна интерпретируется как упругое пространство (x, y, z) с внутренней круговой осесимметричной трещиной $0 \leq r < R$ ($r^2 = x^2 + y^2$) в плоскости $z=0$. Учитывая, что разрушение хрупких полимеров локализовано в малой окрестности трещины (в объеме V_a), для математической теории трещины представляет интерес изучение асимптотического распределения напряжений вблизи круговой трещины в однородном и упругом изотропном континууме.

Пусть $U(r, z)$ и $W(r, z)$ – компоненты вектора перемещения в цилиндрических координатах (r, φ, z) , $T(r, z)$ – температурная функция, удовлетворяющая уравнению Лапласа $\Delta T(r, z) = 0$ вне плоскости $z=0$, содержащей трещину. Задача заключается в нахождении коэффициентов интенсивности напряжений $K^{(M)}$ механической и $K^{(T)}$ тепловой нагрузок в асимптотическом представлении осевого (разрывающего связи) напряжения $\sigma_{zz}(r, 0) = \frac{K(\sigma, R)}{\sqrt{2(r-R)}}$, $r > R$, из основных уравнений термомеханики, записанных в перемещениях:

$$\Delta U - \frac{1}{r^2} U + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial r} - \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \alpha_T \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \Delta W + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial z} - \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \alpha_T \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

где $e(r, z) = \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{U}{r} + \frac{\partial W}{\partial z}$ – объемное расширение

при граничных условиях:

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}(r, z)|_{z=0} &= -\sigma_0(r), \quad 0 \leq r < R, \\ \sigma_{rz}(r, z)|_{z=0} &= 0, \quad r \geq 0, \quad W(r, z)|_{z=0} = 0, \quad r > R, \\ |\sigma_{ij}(r, z), W(r, z), U(r, z), \varepsilon_{ij}(r, z)| &< \infty, \quad r \geq 0, \quad z \geq 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Эта задача подробно рассмотрена авторами в [2]. Метод потенциалов, используемый в [2], приводит к следующим соотношениям:

$$K^{(M)} = \frac{2}{\pi \sqrt{R}} \int_0^R \frac{y \sigma_0(y) dy}{\sqrt{R^2 - y^2}}, \quad K^{(T)} = \frac{1}{\pi \sqrt{R}} \frac{\alpha_T E}{(1-\nu)} \int_0^R \frac{y T_0(y) dy}{\sqrt{R^2 - y^2}}, \quad (6)$$

здесь $T_0(r) = T(r, 0)$ – температура на трещине $0 \leq r < R$, $z=0$, которая либо задается, либо находится из решения соответствующей тепловой задачи.

В случае только механического нагружения при постоянной внешней нагрузке $\sigma_0(r) = \sigma = \text{const}$ и изотермических условиях испытаний $K^{(M)} = \frac{2}{\pi} \sigma \sqrt{R}$.

Тогда искомое локальное напряжение в окрестности круговой микротрещины можно описать выражением $\sigma_{(M)}^* = (\sqrt{2}/\pi) \sigma \sqrt{R/\lambda}$, где λ – флуктуационное продвижение трещины. В окончательной форме получаем:

$$\sigma_{(M)}^* = \sigma \beta(R_0) \sqrt{R/R_0}, \quad (7)$$

где $R = R(t)$ – переменный радиус растущей трещины; R_0 – радиус начальной (исходной в образце) круговой микротрещины; $\beta = \beta(R_0) = 0,5 \sqrt{R_0/\lambda}$ – коэффициент концентрации напряжения для внутренней круговой трещины. Откуда $R_0 = 4\lambda\beta^2$, что

подтверждено экспериментально [1]: при $\lambda = 4 \text{ \AA}$, $\beta \approx (4-9)$, радиус начальной микротрещины $R_0 = (10^{-8} - 10^{-7}) \text{ м}$.

Находим далее локальное напряжение при чисто тепловом нагружении в условиях тепловой задачи, приведенной к действию теплового потока непосредственно на круговую трещину [2]:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad z > 0, \quad r > 0, \quad (8)$$

$$\left. \frac{\partial T(r, z)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{1}{\lambda_T} q_T, \quad 0 \leq r < R; \quad T(r, z)|_{z=0} = 0, \quad r > R; \quad \left. \frac{\partial T(r, z)}{\partial z} \right|_{z=\infty} = 0, \quad r > 0,$$

где λ_T – теплопроводность материала, q_T – величина теплового потока, поступающего в образец через единицу площади за единицу времени.

Используя метод преобразований Ханкеля, получим:

$$T(r, 0) = -(2q_T / \pi \lambda_T) \sqrt{R^2 - y^2}, \quad 0 \leq r < R. \quad (9)$$

$$\sigma_{zz}^{(T)}(r, 0) = A \left[\frac{H(R)}{\sqrt{r^2 - R^2}} - \int_0^R \frac{H'(\eta) d\eta}{\sqrt{r^2 - \eta^2}} \right], \quad (r > R), \quad (10)$$

$$\text{где } H(\eta) = \int_0^\eta \frac{y \sqrt{R^2 - y^2}}{\sqrt{\eta^2 - y^2}} dy; \quad A = \frac{2E\alpha_T q_T}{\pi^2(1-\nu)\lambda_T}.$$

При этом находим $K^{(T)} = (A/2)R^{3/2}$ и вместе с этим искомое локальное напряжение в окрестности круговой трещины при тепловом нагружении образца:

$$\sigma_{(T)}^* = \sigma_T \beta(R_0) (R/R_0)^{3/2}, \quad (11)$$

$$\text{где } \sigma_T = \frac{0,3\alpha_T E R_0}{(1-\nu)\lambda_T} q_T; \quad (12)$$

Полученное соотношение для σ_T представляет собой принципиальный результат для теории теплового разрушения полимерных волокон: σ_T есть механический аналог теплового нагружения и связывает между собой теплофизические, упругие и структурные характеристики полимеров, что позволяет проследить влияние каждого фактора на тепловую реакцию полимерного материала с исходной внутренней дискообразной микротрещиной. В качестве температуры T_v , входящей в (2) и (3), примем среднюю интегральную температуру в кольце $R \leq r < R + \lambda$ при флуктуационном увеличении радиуса круговой трещины на λ . Это дает следующую оценку для величины T_v : $T_v = \frac{2,4\lambda\beta}{\lambda_T} q_T$.

Здесь также, как и в (12) прослеживается связь макро- и микропараметров и их влияние на тепловое состояние полимерного материала в окрестности круговой трещины.

Таким образом, определены все величины, входящие в (2) и (3), что дает возможность описать термокинетику роста круговой трещины в полимерных волокнах и вычислить соответствующую долговечность, как при механическом нагружении, так и в условиях теплового разрушения.

Скорость роста трещины (если пренебречь процессом рекомбинации связей в ее вершине) согласно [1] имеет вид:

$$\nu(R, \sigma_{(T)}^*, T_b) = \lambda \nu_0 \exp\left(-\frac{U - V_a \sigma_{(T)}^*}{kT_b}\right), \quad (13)$$

где все основные величины рассчитаны. Вычисляя интеграл (3), получаем искомое выражение для долговечности $\tau = \tau_{\phi} + \tau_k$ при чисто тепловом нагружении образца с внутренней трещиной в рамках тепловой модели (8):

$$\tau = \frac{2R_0 \exp(-q/k)}{3\lambda \nu_0 \alpha \sigma_T} \exp\left(\frac{U_0 - V_a \beta \sigma_T}{kT_a}\right) + 2,63 R^* \sqrt{\rho/E} (1 - 4\lambda \beta^2 / R^*), \quad (14)$$

где $\alpha = V_a \beta / kT_b$, q – коэффициент температурной зависимости энергии активации.

К этим соотношениям следует добавить ряд важных параметров и предельных характеристик процесса разрушения. При напряжении, соответствующем некоторому значению σ_0 экспериментально наблюдается резкий подъем кривой изотермы долговечности в область сколь угодно больших значений. В кинетической теории [1] эта величина вводится соотношением

$$\sigma_0 = \alpha_{\text{пов}} / (\beta \lambda_m), \quad (15)$$

где $\alpha_{\text{пов}}$ – свободная поверхностная энергия материала (в вакууме), λ_m – предразрывное удлинение связи. Величине (15) придается смысл квазибезопасного напряжения. В [1] показано, что величина σ_0 совпадает с гриффитовым порогом разрушения для дискообразной трещины $\sigma_0 = \sigma_G = \sqrt{\frac{\pi E \alpha_{\text{пов}}}{2R_0(1-\nu^2)}}$ и соответствует нижней границе

линейной зависимости долговечности в координатах $(\lg \tau, \sigma)$.

Критическое напряжение имеет вид:

$$\sigma_k = \frac{U_0 - qT}{V_a \beta} \quad (16)$$

Основным внешним фактором, вызывающим рост трещины со скоростью (13), является тепловая нагрузка мощностью q_T , входящая в состав напряжения (12). Соотношения (15) и (16) (при $T = T_b$) определяют интервал напряжений σ_T от квазибезопасного $\sigma_T^{(0)}$ до критического $\sigma_T^{(к)}$, что позволяет выявить характеристические значения внешнего теплового нагружения от квазибезопасного

$$q_T^{(0)} = \frac{4\lambda_T}{\alpha_T} \sqrt{\frac{1-\nu}{1+\nu} \frac{\alpha_{\text{пов}}}{E}} \cdot R_0^{-3/2} \quad (17)$$

до критического

$$q_T^{(к)} = \frac{7(1-\nu)\lambda_T \sqrt{\lambda}(U_0 - qT_b)}{\alpha_T E V_a} \cdot R_0^{-3/2} \quad (18)$$

на участке линейной зависимости $\lg \tau(q_T, T_b)$.

Таким образом, приведенный интервал внешнего теплового нагружения $(q_T^{(0)}, q_T^{(к)})$ и определяет временную зависимость прочности (14). Для значений $q_T \geq q_T^{(к)}$ ($\sigma_T \geq \sigma_T^{(к)}$) временная зависимость (14) выполняться перестает, трещина растет с максимальной скоростью ν_k . Последнее означает, что зависимость $(\lg \tau, \sigma_T)$ или $(\lg \tau, q_T)$ на этом участке изображается прямой, параллельной оси напряжений σ_T или оси тепловой нагрузки q_T .

На рис.1 приведена кривая долговечности для образца в виде моноволокна из органического стекла, рассчитанная по полученным соотношениям: $\alpha_{\text{пов}} = 39 \cdot 10^{-3}$ Дж/м²; $\alpha_T = 8 \cdot 10^5$ град⁻¹; $\lambda_T = 0,197$ Вт/(м·К); $q_T^{(0)} =$

$= 210$ Вт/мм²; $q_T^{(\kappa)} = 1700$ Вт/мм²; $R_0 = 10^{-7}$ м; $U_0 = 133$ кДж/моль; $\beta = 9$; $q = 8,2$ Дж/(моль·К); $V_a = 1,4 \cdot 10^{-28}$ м³; $R^* = 10^{-3}$ м³; $v_k = 800$ м/с; $E = 3,93 \cdot 10^3$ ГПа; $\rho = 1,2 \cdot 10^3$ кг/м³; $\sigma_0 = 21$ МПа; $\sigma_k = 168$ МПа; $v_0 = 10^{-13}$ с⁻¹; $\lambda = 12 \cdot 10^{-4}$ мкм.

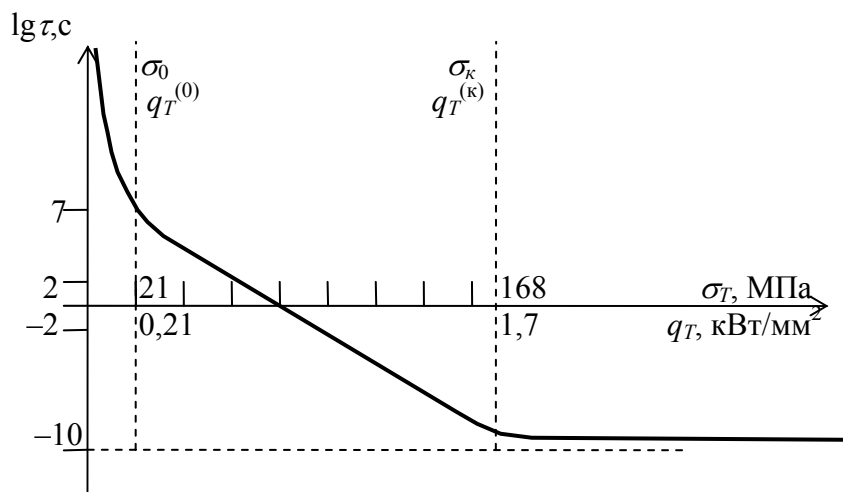


Рис. 1. Временная зависимость прочности ПММА в неоднородном стационарном температурном поле.

Полученная кривая дает наглядное представление о возможности прогнозирования временной зависимости «термической» долговечности образца при его тепловом нагружении в рамках модели (8).

Расчетные соотношения зависимости

(14) содержат комплекс физико-механических, теплофизических, структурных характеристик материала с трещиной, что позволяет оценить влияние каждого из них на термокинетику роста трещины и возможное управление процессом теплового разрушения.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Карташов Э.М., Цой Б., Шевелев В.В. Структурно- статистическая кинетика разрушения полимеров. М.: Химия, 2002, 740с.
2. Карташов Э.М., Анисимова Т. В. //Вестник МИТХТ, 2006, №2. С.85-89.