

结晶型高分子材料的平面取向演化 与塑性响应

陈明祥 杨 卫 郑泉水

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘要 建立了描述结晶型高分子材料的平面取向演化及其塑性响应的解析框架. 文中针对材料中分子链不可伸长的特点, 修正了 Taylor 假定, 引入连续的取向分布函数, 并将它展开成不可约的张量形式表示, 通过建立并求解展开系数的演化方程, 最终获得问题的解. 文中模拟了单轴拉伸和简单剪切时链轴朝拉伸方向偏转的过程, 描述了应力的上扬硬化现象.

关键词 聚合物, 织构演化, 细观本构关系

引 言

许多高分子材料能够承受很大的塑性变形, 同时由于高分子链的取向演化, 诱导出高度的各向异性. 半晶型高分子材料尤为如此, 这类材料结晶相的主要塑性变形机制非常类似于晶体材料, 但也有自身的特点: 沿着高分子链轴方向, 材料纤维是不可伸长的, 在变形过程中, 链轴不断向材料的最大拉伸方向发生取向, 导致宏观应力出现上扬硬化. 为了弄清半晶型高分子材料的力学性能, 深入探讨材料内部链轴的取向演化及其对塑性响应的影响是十分重要的.

由于半晶型高分子材料内部存在着沿链轴方向不可伸长的约束, 材料构元中的每一个局部不可能相容于一个任意给定的变形率. 因此, 在研究过程中不能直接采用 Taylor 假定, 否则将导致过高甚至无界的宏观应力. 针对这个问题, Parks 和 Ahzi^[1] 建议了一种修正的 Taylor 模型, 但其中引入了一个“中间”无迹的变形率. 本文则直接对局部变形作出适当的假定, 并通过严格的张量表示定理, 根据约束条件和整体相容条件导出局部变形率的表达式.

另一方面, 本文引进一个连续的取向分布函数, 使用其加权平均代替体积平均, 继而将取向分布函数展开成不可约的张量形式表示. 通过建立其展开系数的张量方程, 求解并最终获得取向的演化规律和塑性响应.

为了获得简单闭式解, 本文作如下假设: ①忽略材料中的无定形相的作用; ②链轴之间滑移是唯一的塑性变形机制; ③仅讨论平面应变问题, 故可认为材料内部只有一个沿链轴方向的滑移系, 保持体积不发生改变和链轴方向不发生伸长; ④略

1994-09-05 收到第一稿, 1995-05-26 收到修改稿.

去弹性变形, 假定材料是刚塑性的. 经过上述简化假设后, 问题归结为求解具有单滑移系的平面多晶体的取向演化过程以及由此产生的塑性响应.

本文采用常规的张量标注法. 张量均由黑体字母表示, $\otimes$ 代表张量积, 上标“T”和“-1”分别代表转置和求逆, “ $\bullet$ ”代表物质时间导数. 下面的符号运算分别表示: $\mathbf{u} \bullet \mathbf{v} = u_i v_i$, $(\mathbf{A}\mathbf{u})_i = A_{ij}u_j$, $(\mathbf{A}\mathbf{B})_{ij} = A_{ik}B_{kj}$, $\mathbf{A}:\mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$, $(\mathbf{P}:\mathbf{A})_{ij} = P_{ijkl}A_{kl}$, $(\mathbf{P}\mathbf{E})_{ijkl} = P_{ijmn}E_{mnkl}$.

1 平面高分子单晶体

1.1 平面高分子单晶运动学

采用变形梯度的乘法分解: $\mathbf{F} = \mathbf{R}^* \mathbf{F}^P$, 这里 $\mathbf{F}^P$ 是链轴之间滑移所引起的塑性变形梯度, $\mathbf{R}^*$ 代表链轴的刚体旋转. 速度梯度按加法分解为^[2]

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{F}}^P \mathbf{F}^{P-1} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{W}^1 + \mathbf{L}^P \quad (1)$$

这里 $\mathbf{W}^1$ 是链轴旋率, $\mathbf{L}^P$ 是塑性速度梯度.

对于平面高分子单晶而言, 只有一个沿链轴方向的滑移系. 若滑移方向的单位矢量为 $\mathbf{c}$, 滑移面法线的单位矢量为 $\mathbf{c}_\perp$, 滑移系上的剪切率为 $\dot{\gamma}$, 则塑性速度梯度 $\mathbf{L}^P = \dot{\gamma} \mathbf{c} \otimes \mathbf{c}_\perp$, 其对称部分为塑性变形率

$$\mathbf{D}^P = \frac{1}{2} \dot{\gamma} (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}_\perp + \mathbf{c}_\perp \otimes \mathbf{c}) = \dot{\gamma} \mathbf{R} \quad (2)$$

式(2)中 $\mathbf{R}$ 又称 Schmid 因子. $\mathbf{L}^P$ 的反对称部分为塑性旋率, 可借助式(2)简化为

$$\mathbf{W}^P = (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}) \mathbf{D}^P - \mathbf{D}^P (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}) \quad (3)$$

利用式(1)的第三式, 可得 $\mathbf{L}$ 的反对称和正对称部分, 即物质旋率和变形率分别为

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^1 + \mathbf{W}^P, \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}^P \quad (4)$$

链轴单位矢量 $\mathbf{c}$ 的旋转速率为 $\dot{\mathbf{c}} = \mathbf{W}^1 \mathbf{c}$, 结合式(3)和式(4), 有

$$\dot{\mathbf{c}} = \mathbf{W} \mathbf{c} - [(\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}) \mathbf{D} - \mathbf{D} (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c})] \mathbf{c} \quad (5)$$

1.2 约束条件及单晶本构方程

与链轴 $\mathbf{c}$ 方向的材料纤维不可伸长假设相对应的约束条件为

$$\mathbf{c} \bullet \mathbf{D} \mathbf{c} = 0 \quad (6)$$

在平面状态下, 引进 $(\mathbf{c} \otimes \mathbf{c})$ 的偏量 $\mathbf{C}' = \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} - \frac{1}{2} \mathbf{l}$, 这里 $\mathbf{l}$ 为平面二阶单位张量, 由于 $\mathbf{D}$ 是无迹数的 (见式(2)和式(4), 对应体积不变假设), 可把式(6)等价地写为

$$\mathbf{D}:\mathbf{C}' = 0 \quad \text{即} \quad \mathbf{R}:\mathbf{C}' = 0 \quad (7)$$

采用下面形式的粘塑性本构方程^[3]

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau}{g_h} \right|^{n-1} \quad (8)$$

这里 $\dot{\gamma}_0$ 是参考剪切率, g_h 是滑移系的硬化参数, n 是硬化指数, τ 是分解剪应力, 若使用 S 表示 Cauchy 应力偏量, 则 $\tau = S:R$.

应力偏量 S 可以唯一地分解为^[1]

$$S = S^* + S_d C' = S^* + 2(S:C')C' \quad (9)$$

式中 $S^*:C' = 0$, 即在二阶偏张量空间中 S^* 与 C' 垂直, 于是分解剪应力为

$$\tau = S^*:R + 2(S:C')C':R = S^*:R \quad (10)$$

将上式代回式 (8), 再将式 (8) 代入式 (2) 和式 (3), 所得单晶本构方程显然只与 S^* 有关, 而与 S 在二阶偏张量空间中平行于 C' 的分量 $S_d = 2(S:C')$ 无关. S_d 代表链轴上的约束反力, 类似于不可压缩材料中的静水应力. 它不是通过本构方程, 而是必须由平衡条件来确定.

2 平面高分子多晶集合体

从折叠链状高分子单晶推求多晶集合体的力学性质时, 由于局部变形率必须满足约束条件式 (7), 显然不能直接假定局部变形率与宏观变形率相等, 即不能直接采用 Taylor 假定. 针对这个问题, 本文作如下假定:

(1) 局部变形率 D 为 C' 的函数, 线性依赖于宏观变形率 $\bar{D}$ (即整体与局部转换率是无关的), 且受描述取向分布的取向矩 $a, b, \dots$ 等 (取向矩的定义见后面式 (26)) 的影响, 即

$$D = X(C', a, b, \dots): \bar{D} \quad (11)$$

式中 X 是四阶张量, 满足对称性 $X_{ijkl} = X_{jikl} = X_{ijlk}$.

(2) 所分析单晶的具体取向与整体取向分布对 D 的影响是各自独立的, 即 X 可表示为仅与 C' 有关的四阶张量 P 和仅与取向矩有关的四阶张量 P_0 相乘

$$X = P(C')P_0(a, b, \dots) \quad (12)$$

其中 P 和 P_0 具有与 X 相同的对称性.

(3) 经过取向分布张量 P_0 投影的全场转换变形率 $\tilde{D} = P_0:\bar{D}$ 是无迹数 (对应体积守恒) 的, 即

$$\text{tr}(\tilde{D}) = \text{tr}(P_0:\bar{D}) = 0 \quad (13)$$

由张量表示定理^[4,5], 具有上述假定对称性的 P 可表示为下面最一般的形式

$$P = \xi_1 I + \xi_2 l \otimes l + \xi_3 l \otimes C' + \xi_4 C' \otimes l + \xi_5 C' \otimes C' \quad (14)$$

这里 I 代表作为二阶对称张量空间单位变换的张量.

结合式 (11), (12) 和 (14), 得 D 的表达式, 由假定 (3), 式 (14) 中的第二项和第四项在其中不起作用, 故可取 $\xi_2 = \xi_4 = 0$; 又因 D 是无迹数的, 则 $\xi_3 = 0$; 将 D 的表达式代入约束条件式 (7), 可得 $\xi_1 = -\frac{1}{2}\xi_5$. 于是

$$P = \xi_1(I - 2C' \otimes C') \quad (15)$$

D 应满足整体相容条件^[6]: 即 D 的体积平均应等于宏观变形率 $\bar{D}$

$$\langle D \rangle = \bar{D} \quad (16)$$

这里 $\langle \rangle$ 代表体积平均.

将式 (11), 式 (12) 代入式 (16), 得

$$P_0 = \langle P \rangle^{-1} = \frac{1}{\xi_1} \langle I - 2C' \otimes C' \rangle^{-1} \quad (17)$$

从后面的式 (27) 可知, $\langle P \rangle$ 仅与 a, b 取向矩有关, 故 P_0 也只与 a, b 有关, 同假定 (2) 中关于 P_0 的部分符合, 将式 (17) 代入式 (12), 再代入式 (11), 得

$$D = (P \langle P \rangle^{-1}) : \bar{D} \quad (18)$$

上式明显表明, ξ_1 在 D 的表达式 (18) 中消失, 因此可认为式 (15) 中的 $\xi_1 = 1$.

本文导出的结果 (式 (18) 以及式 (15)) 与 Parks 和 Ahzi^[1] 相同, 但这里并没有使用他们文中所引入的“中间”无迹变形率. 另一方面, 修改前面的假定 (1)–(3), 能使我们考虑更一般的情况.

关于旋率, 采用多数文献中^[1,2,7] 的局部旋率 W 与宏观旋率 $\bar{W}$ 相等的假定

$$W = \bar{W} \quad (19)$$

这时局部旋率的体积平均 $\langle W \rangle = \bar{W}$ ^[6]

除需要满足变形方面的条件外, 还应满足整体平衡条件, 即局部应力偏量的体平均必须等于宏观应力偏量 $\bar{S}$

$$\langle S \rangle = \bar{S} \quad (20)$$

将 S 的分解式 (9) 代入式 (20), 并采用 Parks 和 Ahzi^[1] 的假定: $S_d = 2(S:C') \approx 2(\bar{S}:C')$, 即认为约束反力等于宏观偏应力 $\bar{S}$ 在 C' 上的投影, 则有

$$\langle S^* \rangle = \langle P \rangle : \bar{S} \quad (21)$$

从式 (18) 和式 (21) 中可以看出 P 和 $\langle P \rangle$ 在联系局部量与宏观量之间起着十分重要的作用, 且 $\langle P \rangle$ 仅与材料链轴 c 的取向分布密切相关. 因此, 在建立材料的细观本构模型之前, 弄清链轴的取向演化是十分重要的.

3 取向分布函数及其张量表示

为获得恰当的解析结果, 我们引进一个连续的取向分布函数 (Orientation Distri-

bution Function, 简记为 ODF), 并用 ODF 上的加权平均代替前面的体积平均.

这样定义取向分布函数, $V(\theta)$, 使得 $V(\theta)d\theta$ 表示晶粒的链轴矢量 c 落在张角为 $d\theta$ 的微小扇形区域内的概率, 这里 θ 为单位圆周内 c 矢量的取向角. 在变形过程中, 链轴不断地转动, 即 θ 不断变化, ODF 也随之演化. 取向角 θ 与其初值 θ_0 的关系 $\theta = \theta(\theta_0, t)$ 可通过求解方程 (5) 获得, ODF 的演化必须满足 ODF 守恒方程^[8], Prantil^[2] 等表明, 在平面情况下该守恒方程可表示为

$$\dot{V}(c) + V(c)\text{div}(\dot{c}) = 0 \quad (22)$$

此外, ODF 还应满足条件: (a) $V(c) = V(-c)$, 即链轴取向为 c 和取向为 $-c$ 所代表的是同一晶粒; (b) $\oint V(c)d\theta = 1$, 即正则化要求.

下文中将 ODF 展开成不可约的张量形式表示, 通过求解系数张量来获得问题的解.

Onat 和 Leckie^[9] 表明: 在平面情况下满足上述条件 (a) 和 (b) 的 ODF 可表示为不可约张量形式

$$V(c) = \frac{1}{2\pi} + \frac{2}{\pi}a'_{ij}f_{ij}(c) + \frac{8}{\pi}b'_{ijkl}f_{ijkl}(c) + \dots \quad (23)$$

这里 f_{ij} , f_{ijkl} , $\dots$ 是完全对称无迹的即所谓不可约的张量基函数

$$\begin{aligned} f_{ij} &= c_i c_j - \frac{1}{2}\delta_{ij} \\ f_{ijkl} &= c_i c_j c_k c_l - \delta_{(ij} c_k c_{l)} + \frac{1}{8}\delta_{(ij}\delta_{kl)} \\ &\dots \end{aligned} \quad (24)$$

其中指标上的括号 () 是对称化记号, δ_{ij} 是 Kronecker 符号. 若依照 Advani 和 Tucker^[10], 定义取向矩为

$$a_{ij} = \oint c_i c_j V(c)d\theta \quad b_{ijkl} = \oint c_i c_j c_k c_l V(c)d\theta \quad (25)$$

$\dots$

则式 (23) 中 a' , b' , $\dots$ 的表达式为

$$\begin{aligned} a'_{ij} &= a_{ij} - \frac{1}{2}\delta_{ij} \\ b'_{ijkl} &= b_{ijkl} - \delta_{(ij} a_{kl)} + \frac{1}{8}\delta_{(ij}\delta_{kl)} \\ &\dots \end{aligned} \quad (26)$$

它们是取向矩 a , b , $\dots$ 无迹化后所得的偏张量. 由定义可知, 任意阶取向矩都是完全对称的, 且只有两个独立分量.

由式 (15) 和式 (25), 并将体积平均用 ODF 加权平均代替, 很容易导出

$$\langle P \rangle = I - \frac{1}{2} l \otimes l + l \otimes a + a \otimes l - 2b \quad (27)$$

$\langle P \rangle$ 仅与二阶和四阶取向矩有关. 因此, 通过求解取向矩 a, b 就能获得问题的有效解.

4 取向矩演化方程与求解方法

对取向矩的定义式 (25) 两边求物质时间导数, 利用 ODF 的守恒方程式 (22) 和链轴的旋转速率方程式 (5) 以及局部量与宏观量的关系式 (18) 与 (19), 便可导出二阶取向矩的演化方程为

$$\dot{a} = \bar{W}a - a\bar{W} + \bar{D} \quad (28)$$

利用同样的方法, 可得四阶取向矩的演化方程为

$$\dot{b}_{ijkl} = 2\bar{W}_{im}b_{mjkl} - 2b_{ijkm}\bar{W}_{ml} + 2(\bar{D}_{im}b_{mjkl} + b_{ijkm}\bar{D}_{ml})_s - 4g_{ijklmn}\bar{D}_{mn} \quad (29)$$

这里下标 s 代表对称部分, 且

$$\bar{D} = P_0 : \bar{D} = \langle P \rangle^{-1} : \bar{D} \quad (30)$$

$$g_{ijklmn} = \langle c_i c_j c_k c_l c_m c_n \rangle \quad (31)$$

后者是六阶取向矩.

从导出的取向矩演化方程式 (28) 和 (29) 中可以看出, 二阶方程是封闭的, 但四阶方程是不封闭的, 它与六阶取向矩有关. 二阶方程 (28) 所代表的一类张量方程的通解已由 Goddard 和 Müller^[11] 给出. 但为了获得 b 的解, 需要采用适当的闭合近似技术, 即要对六阶取向矩 g 作出某种近似假定. Advani 和 Tucker^[10] 在研究粘性流中纤维取向时对各种形式的闭合近似进行了详细的讨论, 本文采用他们提出的混合闭合近似技术, 但对其中涉及到的二次闭合近似进行了适当的修正.

文 [10] 所作的混合闭合近似是由线性闭合近似 $\hat{g}$ 和二次闭合近似 $\tilde{g}$, 线性插值得, 具体表达为

$$\bar{g}_{ijklmn} = (1 - f)\hat{g}_{ijklmn} + f\tilde{g}_{ijklmn} \quad (32)$$

这里插值权函数 f 以及 $\hat{g}$ 分别为

$$f = 2a_{ij}a_{ij} - 1 \quad (33)$$

$$\hat{g}_{ijklmn} = \frac{3}{2}\delta_{(ij}b_{klmn)} - \frac{9}{16}\delta_{(ij}\delta_{kl}a_{mn)} + \frac{1}{32}\delta_{(ij}\delta_{kl}\delta_{mn)} \quad (34)$$

其中 $0 \leq f \leq 1$. $f = 0$ 和 $f = 1$ 分别对应取向均匀分布和取向完全一致的情况. 对于 $\hat{g}$, Advani 和 Tucker^[10] 直接假设为 b 和 a 并乘所得的六阶张量, 即 $\hat{g} = b \otimes a$, 这显然不能满足取向矩应完全对称的要求, 本文使之对称化, 修正为

$$\tilde{g}_{ijklmn} = b_{(ijkl}a_{mn)} \quad (35)$$

Advani 和 Tucker^[8] 表明: 线性闭合近似和二次闭合近似分别适用于取向分布较均匀 (f 值较小) 和取向分布较集中 (f 值较大) 的情况. 而混合闭合近似在取向分布的整个范围内 ($0 \leq f \leq 1$) 都能给出良好的近似结果.

由于任意阶的取向矩只有两个独立分量, 在将二阶取向矩 $\mathbf{a}$ 的解和式 (30), (32) 及其相关的式 (27), (33)—(35) 代入式 (29) 后, 方程 (29) 最后简化为两个一阶线性微分方程.

5 应 用

5.1 单轴拉伸

假定拉伸是沿 X_2 轴方向 (如图 1(a) 所示), 变形条件是

$$\bar{D}_{22} = -\bar{D}_{11} = \dot{\varepsilon}(\text{常数}) > 0 \quad \bar{D}_{12} = \bar{D}_{21} = \bar{W}_{12} = \bar{W}_{21} = 0 \quad (36)$$

并假定初始时链轴均匀分布: $a'_{ij} = b'_{ijkl} = 0$, 且 $\dot{\varepsilon}/\dot{\gamma}_0 = 1$.

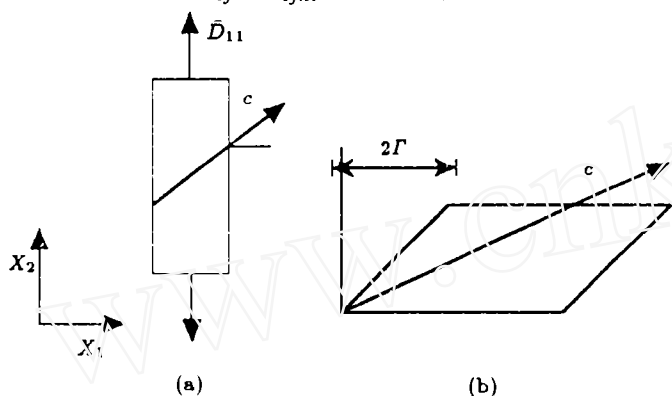


图 1 单轴拉伸 (a) 及简单剪切 (b) 示意图

Fig.1 Schematic illustration of uniaxial tension (a) and simple shear (b)

利用 Goddard 和 Miller^[11] 的通解, 二阶取向矩方程 (28) 的解为

$$a_{11} = -\varepsilon + \frac{1}{2} \quad a_{22} = \varepsilon + \frac{1}{2} \quad a_{12} = a_{21} = 0 \quad (37)$$

其中 $\varepsilon = \int_0^t \dot{\varepsilon} dt = \dot{\varepsilon} t$ 代表拉伸方向的对数应变. 对四阶取向矩方程 (29) 可进行数值求解.

将取向矩 $\mathbf{a}$ 的精确解式 (37) 和 $\mathbf{b}$ 的数值解代入式 (23), 可求得 $\varepsilon = 0, 10\%, 20\%, 30\%$ 时 ODF 在四阶近似下的图线, 如图 2 所示, ODF 的最大值都发生在 $\theta = \frac{\pi}{2}$ 处, 即最大拉伸方向, 且随 ε 不断增加, 这说明链轴在变形过程中不断地朝最大拉伸方向取向, 使得该方向上的链轴集中程度越来越高.

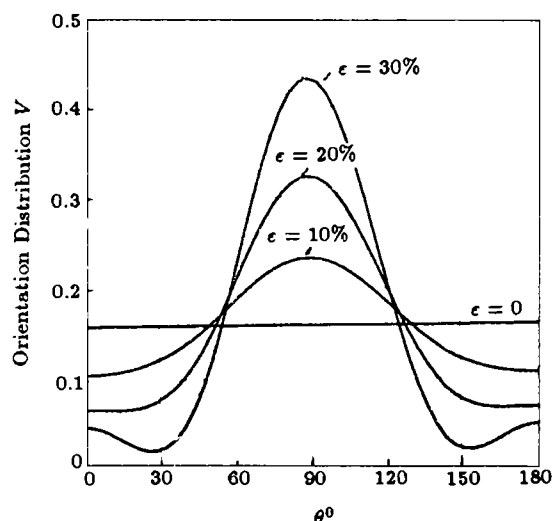


图 2 $\epsilon = 0, 10\%, 20\%, 30\%$ 的取向分布函数曲线图
Fig.2 The orientation distribution for $\epsilon = 0, 10\%, 20\%, 30\%$

值得注意的是, 由取向矩定义式 (25) 可知 $|a_{ij}| \leq 1, \forall i, j = 1, 2$. 又 a_{22} 是 $\mathbf{a}$ 的最大特征值, 因此应有 $a_{22} = \epsilon + \frac{1}{2} \leq 1$. 特别地, 当 $\epsilon \rightarrow \frac{1}{2}$, $a_{22} \rightarrow 1$ 说明 ODF 已趋向于脉冲函数, 即所有的链轴与 X_2 轴 (最大拉伸方向) 一致, 材料被拉成单晶状, 变形不再能继续增加.

将式 (19) 和式 (18) 以及相关的式 (15), (27) 和 (37) 代入式 (5), 并考虑到式 (36), 可得链轴的旋转角速度为

$$\dot{\theta} = \frac{\dot{\epsilon}}{1 - 8b'_{1111}} \sin 2\theta \quad (38)$$

求解上式得链轴的当前取向为

$$\tan \theta = \exp \left(2 \int_0^\epsilon \frac{d\epsilon}{1 - 8b'_{1111}} \right) \tan \theta_0 \quad (39)$$

当 $\epsilon \rightarrow \frac{1}{2}$ 时, 数值解显示积分 $\int_0^\epsilon \frac{d\epsilon}{\alpha(\epsilon)}$ 是无界的 (因 $\epsilon \rightarrow \frac{1}{2}$, $b'_{1111} \rightarrow \frac{1}{2}$), 因此 $\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}$, 这说明在极端的情况下无论链轴的初始位置 θ_0 (除 $\theta_0 = 0$ 外) 取何值, 在 $\epsilon \rightarrow \frac{1}{2}$ 时, 它们都将旋转到 X_2 轴方向即最大拉伸方向, 与前面的分析相一致的.

使用单晶本构方程式 (8), 并结合式 (18), 式 (10), 式 (2) 以及式 (27) 和式 (21), 可得宏观本构方程. 选取材料常数: $n = 9^{[12]}$; 不考虑单晶硬化, 即取 $g_h \equiv \tau_0$, τ_0 是单晶初始屈服强度. 定义宏观等效应力 $\bar{\sigma}_e = \left(\frac{3}{2} \bar{\mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}} \right)^{1/2}$ 以及宏观等效应变 $\bar{\epsilon}_e = \int_0^t \left(\frac{2}{3} \bar{\mathbf{D}} : \bar{\mathbf{D}} \right)^{1/2} dt$, 它们的关系曲线如图 3 所示. 从图 3 可以看出, 当 $\bar{\epsilon}_e < 0.4$ 时, $\bar{\sigma}_e$ 变化缓慢, 当 $\bar{\epsilon}_e$ 超过 0.4 之后, $\bar{\sigma}_e$ 急剧变化, 最后趋于无穷. 因为材料最终被拉成一个链轴沿 X_2 轴方向的单晶.

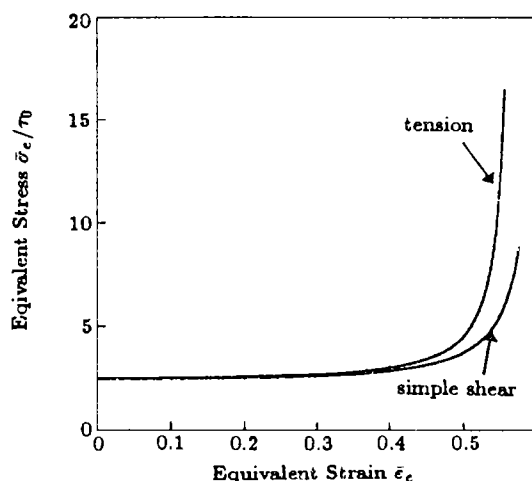


图 3 单轴拉伸及简单剪切情况下的宏观等效应力 - 应变关系图

Fig.3 Macroscopic equivalent stress-strain curves under uniaxial tension and simple shear

5.2 简单剪切

假定简单剪切沿 X_1 轴方向 (见图 1(b)), 变形条件就是

$$\bar{D}_{11} = \bar{D}_{22} = 0 \quad \bar{D}_{12} = \bar{D}_{21} = \bar{W}_{12} = -\bar{W}_{21} = \dot{\Gamma}(\text{常数}) \quad (40)$$

并假定初始时链轴均匀分布: $a'_{ij} = b'_{ijkl} = 0$, 且 $\dot{\Gamma}/\gamma_0 = 1$. 利用与单轴拉伸分析相同的步骤和方法可得下列结果:

(1) 由偏量表示的二阶取向矩的解为

$$a'_{11} = -a'_{22} = \sin \Gamma \quad a'_{21} = a'_{12} = \sin \Gamma \cos \Gamma \quad (41)$$

其中 $\Gamma = \int_0^t \dot{\Gamma} dt = \dot{\Gamma} t$.

(2) 四阶取向矩的两个独立分量的数值解.

(3) $\Gamma = 0, 10\%, 20\%, 30\%$ 的 ODF 曲线如图 4.

利用式 (41) 求得 α 的最大特征值为 $\lambda = \sin \Gamma + \frac{1}{2}$, 由于前面的道理, $\lambda \leq 1$, 故 $\Gamma \leq \frac{\pi}{6}$, 当 $\Gamma \rightarrow \frac{\pi}{6}$ 时, 材料被剪切成为单晶状. 从 ODF 的二阶近似还可以导出, ODF 的最大值发生在 $\theta_m = \frac{\pi}{4} - \frac{\Gamma}{2}$ 的方向 (即 α 对应于 λ 的特征方向), 而最大拉伸变形的方向为 $\theta'_m = \frac{1}{2} \arctg(1/\Gamma)$, 两者不完全一致. 当 Γ 从 0 增加到 $\frac{\pi}{6}$ 时, θ_m, θ'_m 均从 $\frac{\pi}{4}$ 开始减少, 但 θ_m 减少的速度比 θ'_m 稍慢, 即 $\theta_m > \theta'_m$, Γ 较小时, θ_m 与 θ'_m 的值十分接近, Γ 较大时, θ_m 与 θ'_m 相差稍大, 最大相对误差为 4%, 这说明链轴基本上朝最大拉伸方向取向. 且随着变形的增加, 取向集中的程度越来越高, 因为随 Γ 增加, ODF 的最大值不断地增加 (如图 4).

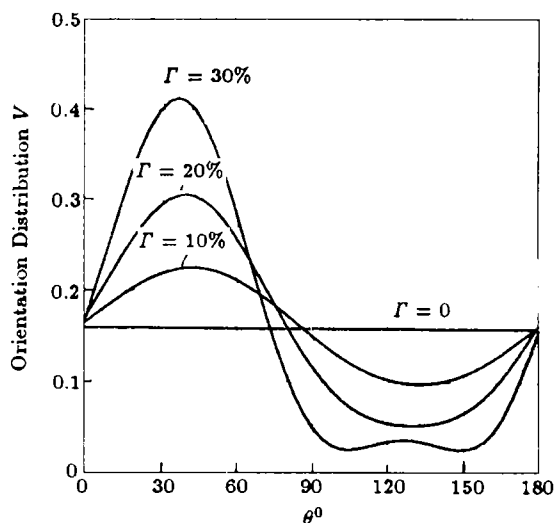


图 4 $\Gamma = 0, 10\%, 20\%, 30\%$ 的取向分布函数曲线图
Fig.4 The orientation distribution for $\Gamma = 0, 10\%, 20\%, 30\%$

利用与单轴拉伸分析相同的材料参数和分析方法, 可得宏观等效应力 $\bar{\sigma}_e$ 与宏观等效应变 $\bar{\varepsilon}_e$ 的关系曲线如图 3 所示. 可以看出, 在变形后期, 与单拉相比较材料硬化较弱, 这是与实验现象相符合的^[13].

6 结 论

本文提出了描述结晶型平面高分子材料取向演化及其塑性响应的宏细观方法. 应用于单轴拉伸和简单剪切问题, 模拟了链轴向最大拉伸方向不断偏转的过程, 描述了应力随变形的上扬硬化现象. 这些结果与半晶型高分子材料的取向演化及应力响应特征, 在定性意义上是符合的. 同时我们也注意到: 1) 本文给出的取向演化比实际情况要快, 致使变形后期应力增加急剧. 2) 剪切情况下, ODF 最大值发生的方向与最大拉伸方向不能完全重合. 估计其中的主要原因是本文在 ODF 表达式中截断到四阶项, 且忽略了材料中无定形相的作用, 也没考虑材料的球晶结构^[14]. 这些问题将在我们今后的工作中逐步考虑.

参 考 文 献

- 1 Park DM, Ahzi S. *J Mech Phys Solids*, 1990, 38: 701
- 2 Prantil VC, Jenkins JT, Dawson P. *J Mech Phys Solids*, 1993, 41: 1357
- 3 Hutchinson JW. *Proc R Soc(Lond)*. 1976, A 348: 247
- 4 Zheng QS. *Appl Mech Rev*, 1994, 47: 545-587
- 5 Kunin IA. *Int J Engng Sci*, 1981, 19: 1551
- 6 Hill R. *Proc R Soc(Lond)*. 1972, A 326: 131
- 7 Rashid MM. *J Mech Phys Solids*, 1992, 40: 1009
- 8 Clement A, Coulomb P. *Proc Fifth Int Conf Textures of Materials*. Berlin: Springer. 1978, 1: 329
- 9 Onat ET, Leckie FA. *J Appl Mech*, 1988, 55: 1
- 10 Advani SG, Tucker GI. *J Rheol*, 1990, 34: 367
- 11 Goddard JD, Miller C. *Rheol Acta*, 1966, 5: 227

12 Bartzak Z, Argon AS, Cohen RE. *Macromolecules*, 1992, 25: 5036

13 G'Sell C, Boni S, Shrivastava S. *Mater Sci*, 1983, 18: 903

14 Lee BJ, Parks DM, Ahzi S. *J Mech Phys Solids*, 1993, 41: 1651

PLANAR TEXTURE EVOLUTION AND PLASTIC RESPONSE IN CRYSTALLINE POLYMERS

Chen Mingxiang Yang Wei Zheng Quanshui

(*Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract Proposes an analytical method for describing planar texture evolution and plastic responses in idealized crystalline polymers. The Taylor model is modified to take into account the inextensibility of regularly folded molecular chains. We introduce a continuous orientation distribution function and represent it in the form of irreducible tensors. The evolution equations for the tensor coefficients are derived and solved to obtain the evolving texture and the macroscopic responses of the material. The present model enables us to simulate the process that chain axes rotate toward the direction of maximum stretch and texturing hardening, in both uniaxial extension and simple shear.

Key words polymer, texture evolution, micromechanics modelling