

УДК 541.64:539.3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ДЕФОРМАЦИИ МИКРОФИБРИЛЛЫ ОРИЕНТИРОВАННОГО ПОЛИМЕРА

Зайцев М. Г., Стремяков С. А., Разумовская И. В.

Предложена кинетическая модель деформации микрофибриллы, в которой учтены процессы деформации и разрушения. В результате численного расчета на ЭВМ получена эволюция функции распределения проходных цепей по длинам в аморфной области, а также зависимость напряжения и числа разрывов цепей от деформации при постоянной скорости деформирования фибриллы.

Ориентационная вытяжка — один из основных способов получения высокопрочных гибкоцепных полимеров [1—4]. Этот процесс сопровождается глубокими изменениями их структуры. На первом этапе вытяжки происходит формирование ориентированной микрофибриллярной структуры [1, 4]. На втором этапе полимер может быть дополнительно растянут в несколько раз за счет взаимного проскальзывания микрофибрилл без заметного изменения основных параметров микрофибриллярной структуры (большого периода и размера кристаллитов). При этом, однако, прочность полимера существенно возрастает [1, 2, 4]. Исследование распределения по длинам проходных цепей в аморфных областях методом ЯМР показывает [5—7], что на втором этапе вытяжки это распределение видоизменяется и сильно сужается. Наряду с этим методами ИК-спектроскопии и ЭПР регистрируется значительное число разрывов полимерных цепей [8, 9]. Конкуренцией этих двух факторов и определяется, по-видимому, упрочнение полимерного материала.

Задача настоящей работы — построение и исследование на ЭВМ кинетической модели деформации микрофибриллы, учитывающей как эволюцию распределение цепей по длинам в аморфных областях, так и разрывы цепей.

Примем, что в процессе деформации микрофибриллярной структуры не происходит рекристаллизации и дополнительного роста кристаллитов. Тогда эволюция распределения по длинам внутрифибриллярных проходных цепей может быть обусловлена перераспределением материала цепей между аморфными прослойками и вытягиванием цепей из кристаллитов. Будем считать, что вытягивание одного звена цепи из кристаллита и разрыв цепи являются термоактивированными актами, среднее время ожидания которых задается формулами вида [10, 11]

$$\tau \sim \exp \left[ \frac{u(x)}{RT} \right], \quad (1)$$

где  $T$  — температура;  $u(x)$  — активационный барьер для вытягивания или разрыва цепи, зависящий от деформации  $x$  напряженного участка цепи  $LL'$  в аморфной области (рис. 1). Под деформацией  $x$  подразумевается упругая деформация полностью распрямленной цепи. Вкладом высокоэластических сил пренебрегаем. В настоящей работе принято (для простоты), что

$$u(x) = u_0^j (1 - x/x_{\max}^j), \quad (2)$$

где  $u_0^j$  — активационный барьер вытягивания или разрыва (2) для н

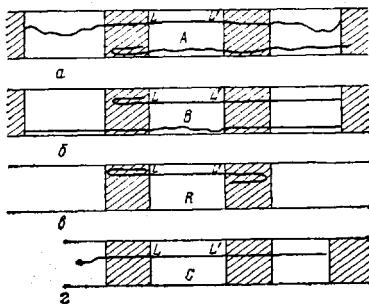


Рис. 1

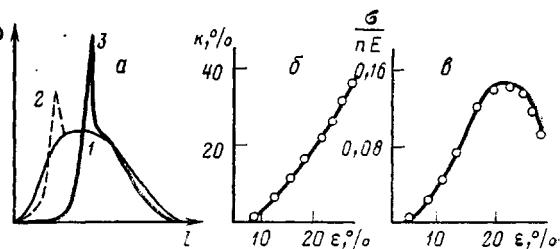


Рис. 2

Рис. 1. Различные варианты связи проходной полимерной цепи с цепями в соседних аморфных прослойках

Рис. 2. Эволюция распределения проходных цепей по длинам (а), доля разорванных цепей (б) и зависимость напряжения от деформации (в) в процессе растяжения микрофибриллы. Скорость деформации  $\dot{\epsilon}=0,5 \text{ см}^{-3}$ ; количество вытянутых до разрыва звеньев для В-цепей  $k=5$ ;  $u_0/RT=60$ ;  $x_{\max}^1=0,1$ ;  $\alpha=1,02$ ; деформация фибриллы  $\epsilon=0$  (1), 6 (2) и 18% (3)

растянутой цепи;  $x_{\max}^j$  — деформация цепи, при которой активационный барьер  $u(x)$  обращается в нуль (смысл индекса  $j$  разъяснен ниже).

Как подробно рассмотрено в работах [12–15], вытягивание звена цепи из кристаллита в аморфную прослойку приводит к образованию в нем одномерной дислокации. При этом возможны два различных случая.

Если цепь проходит через кристаллит и выходит в соседнюю аморфную прослойку, причем там участок цепи ненапряжен (рис. 1, а), дислокация свободно пройдет сквозь кристаллит и выйдет на его противоположную границу. Это приведет к вытягиванию звена ненапряженной цепи в соседней прослойке в кристаллите и, следовательно, к перераспределению полимерного материала между прослойками. При дальнейшем растяжении микрофибриллы этот процесс может повторяться, причем с теми же параметрами активационного барьера  $u_0^1$  и  $x_{\max}^1$  до тех пор, пока участок цепи в соседней прослойке (рис. 1, а) будет ненапряжен.

Если, напротив, участок цепи в соседней прослойке напряжен, или цепь в кристаллите образует складку (рис. 1, б, в), дислокация остановится внутри кристаллита, что затруднит вытягивание цепи в аморфную прослойку при дальнейшем растяжении микрофибриллы. Активационный барьер и максимальная деформация для вытягивания каждого следующего звена в аморфную прослойку в этом случае будет выше предыдущего [15]  $u_0^j > u_0^{j-1}$ ,  $x_{\max}^j > x_{\max}^{j-1}$  ( $j$  — количество звеньев, вытянутых напряженными участками в аморфную прослойку). Принимается, что после того, как вытянутых звеньев станет больше некоторой величины  $k$ , барьер для вытягивания очередного звена становится больше, чем барьер для разрыва цепи  $LL'$ , и цепьрывается. Фактически  $u_0^{k+1}$  и  $x_{\max}^{k+1}$  характеризует активационный барьер для разрыва цепи. В настоящей работе принято (для простоты)

$$u_0^j = \alpha u_0^{j-1}, \quad x_{\max}^j = \alpha x_{\max}^{j-1} \quad (3)$$

( $\alpha$  — параметр расчета). При необходимости в соответствии с экспериментальными и теоретическими данными могут быть приняты любые другие зависимости (2) и (3).

Таким образом, при деформации микрофибриллы «короткие» (т. е. напряженные при данной деформации фибриллы) цепи будут вытягивать звенья из кристаллита и в конце концов разрываться, «длинные» (т. е. ненапряженные при данной деформации фибриллы) цепи — втягиваться в кристаллит, а по исчерпании резерва свободной длины превращаться в короткие и повторять их путь эволюции. При этом характер и скорость изменений, происходящих с данным участком цепи в данной аморфной

области, зависят не только от длины этого участка цепи, но и от состояния продолжений цепи в соседних аморфных областях (рис. 1). Детальное рассмотрение кинетики деформации такой системы при наличии распределения цепей по длинам практически невозможно. Поэтому введено несколько упрощающих предположений.

Во-первых, примем приближение «среднего поля», т. е. будем считать все аморфные прослойки в микрофибрилле одинаковыми на любой стадии деформации. Тогда по изменению состояния данной аморфной прослойки (происходящему в результате вытягиваний, втягиваний звеньев и разрывов цепей) можно судить об изменении состояния соседних прослоек, которые в свою очередь определяют характер дальнейшей эволюции данной аморфной прослойки. В этом приближении запишем замкнутые кинетические уравнения для функции распределения цепей по длинам в одной прослойке.

Во-вторых, разобъем все цепи в данной аморфной прослойке на классы с разными законами эволюции. Цепи, имеющие своими продолжениями в соседних прослойках хотя бы одну длинную (ненапряженную) цепь (рис. 1, а) и потому способные протягивать звенья из соседних аморфных областей через кристаллит, образуют класс *A* с распределением по длинам  $a(l)$ . Их вытягивание приводит к втягиванию длинных цепей в соседних аморфных прослойках внутрь кристаллита. Цепи, соседями которых являются либо короткие (напряженные) цепи, либо складка и короткая цепь (рис. 1, б), образуют класс *B* с распределением по длинам  $b(l)$ .

Распределения  $a(l)$  и  $b(l)$  по-разному эволюционируют с течением времени  $t$ . Однако эти классы цепей не являются замкнутыми. *A*-цепь может превратиться в *B*-цепь, если ее продолжения в соседних прослойках израсходовали резерв свободной длины (вследствие втягивания и при увеличении деформации микрофибриллы в процессе вытяжки).

Такое превращение может произойти как с короткой *A*-цепью, так и с длинной. Скорость перехода *A*-цепей в *B*-класс обозначаем  $\gamma_a$  для коротких цепей и  $\gamma_b$  для длинных. Условия самосогласования модели (рассмотренные ниже) требуют, чтобы они были различны.

Скорость втягивания длинных *A*- и *B*-цепей принимаем не зависящей от их длины и обозначаем через  $\omega$ . Цепи, продолжения которых в соседних прослойках стали свободными концами, в результате разрыва при растяжении фибриллы, выделяются в класс *C* с распределением  $c(l)$ . В отличие от *A*-класса в *C*-класс цепи приходят, но не могут его покинуть. Скорость переходов коротких *A*- и *B*-цепей в *C*-класс  $\omega$  определяется скоростью накопления разрывов цепей и принята не зависящей от их длины.

Будем считать, что свободная длина цепи в недеформированной аморфной прослойке (т. е. проекция контурной длины цепи минус длина прослойки) может быть равна целому числу звеньев  $i$ . Поэтому распределения по длинам дискретны:  $a(l_i, t) = a_i(t)$ ;  $b(l_i, t) = b_i(t)$ ;  $c(l_i, t) = c_i(t)$ .

Обозначим через  $b_{i+j}^j$  — долю цепей, свободная длина которых в нерастянутом состоянии  $i$  (в единицах длины звена  $\Delta s$ ) и которые  $j$ -раз вытягивали звенья из кристаллита. Очевидно, что

$$b_i = \sum_{j=1}^k b_i^j \quad (4)$$

Заметим, наконец, что, если соседями данного участка  $LL'$  цепи с двух сторон являются складки (рис. 1, в), цепь принадлежит особому *R*-классу. Принято, что *R*-цепи вытягиваются так же, как *B*-цепи, однако их распределение  $r(l_i, t)$  эволюционирует совершенно независимо от *A*-, *B*- и *C*-цепей.

Интересующее нас распределение всех проходных цепей по длинам  $\rho(l, t)$  найдем как сумму распределений для различных классов

$$\rho(l, t) = a(l, t) + b(l, t) + c(l, t) + r(l, t) \quad (5)$$

В настоящей работе рассматривается процесс растяжения фибриллы с постоянной скоростью  $\dot{\varepsilon}=\text{const}$ . В начальном недеформированном состоянии  $B$ - и  $C$ -цепей нет. Доля цепей  $R$ -класса определяется количеством складок (или коротких петель). Обозначая через  $d$  отношение плотностей аморфной области и кристаллита ( $d \approx 0,9$ ) и нормируя распределение по длинам при  $t=0$   $\rho(l, 0) = \rho_i(0)$  на единицу, можно записать

$$d = (1 - F) \sum_{i=0}^N \rho_i(0) l_i, \quad (6)$$

где  $N$  — максимальная свободная длина при  $t=0$ ;  $F$  — доля цепей, образующих на границе кристаллита складку (или короткую петлю). Определяя из формулы (6)  $F$ , найдем норму  $R$ - и  $A$ -цепей

$$\sum_{i=0}^N r_i(0) = F^2, \quad \sum_{i=0}^N a_i(0) = 1 - F^2 \quad (7)$$

Начальное распределение проходных цепей по длинам является основным входным параметром модели.

В соответствии с описанной моделью эволюция распределения по длинам коротких и длинных цепей должна описываться различными уравнениями. Деление цепей на «длинные» и «короткие» меняется при изменении деформации микрофибриллы. Пусть при данной деформации цепи, имеющие в нерастянутой фибрилле свободную длину  $m$ , являются граничными: при  $i < m$  цепи напряжены (короткие) при  $i \geq m$  цепи не-напряжены («длинные»).

Тогда для коротких  $A$ -цепей имеем

$$\begin{aligned} \dot{a}_0 &= (-1/\tau_0 - \gamma_k - \omega) a_0 \\ \dot{a}_i &= (-1/\tau_i - \gamma_k - \omega) a_i + 1/\tau_{i-1} a_{i-1} \text{ для } 1 \leq i \leq m-2 \\ \dot{a}_{m-1} &= (-\gamma_k - \omega) a_{m-1} + 1/\tau_{m-2} a_{m-2} \end{aligned} \quad (8)$$

Эволюцию коротких  $B$ -цепей удобно описать с помощью распределения  $b_{i+j}^j$  (формула (4)). При каждом вытягивании звена одна  $B$ -цепь уходит из разряда  $b_{i+j}^j$  и переходит в разряд  $b_{i+j+1}^{j+1}$ . При этом вследствие перехода  $A \rightarrow B$  в разряд  $b_i^0$  непрерывно поступают цепи из разряда  $a_i$  со скоростью  $\gamma_k$ . Тогда имеем для всех  $0 \leq i \leq m-1$

$$\begin{aligned} \dot{b}_i^0 &= (-1/\tau_i^0 - \omega) b_i^0 + \gamma_k a_i \\ \dot{b}_{i+j}^j &= (-1/\tau_{i+j}^j - \omega) b_{i+j}^j + 1/\tau_{i+j-1}^{j-1} b_{i+j-1}^{j-1} \text{ для } 1 \leq j \leq k \\ \dot{b}_{i+k+1}^{k+1} &= 1/\tau_{i+k}^k b_{i+k}^k \end{aligned} \quad (9)$$

( $k$  — количество звеньев, которые  $B$ -цепь может вытянуть до разрыва;  $\sum_{i=0}^m b_{i+k+1}^{k+1}$  — количество разрывов).

Для  $C$ -цепей кинетические уравнения записываются в виде

$$\begin{aligned} \dot{c}_0 &= -1/\tau_0 c_0 + \omega (a_0 + b_0) \\ \dot{c}_i &= -1/\tau_i c_i + 1/\tau_{i-1} c_{i-1} + \omega (b_i + a_i) \text{ для } 1 \leq i \leq m-2 \\ \dot{c}_{m-1} &= 1/\tau_{m-2} c_{m-2} + \omega (a_{m-1} + b_{m-1}) \end{aligned} \quad (10)$$

Все входящие в выражения (8)–(10) времена ожидания  $\tau_i$  и  $\tau_{i+j}^j$  рассчитываются по формуле (1) с учетом соотношений (2) и (3). Индекс  $i$  определяет деформацию цепи  $x(t) = \frac{s(t) - l_i}{l_i}$  ( $s$  — длина проложки; в нерастянутом состоянии она принята за единицу  $s_0=1$ ).

Кинетические уравнения для длинных  $A$ - и  $B$ -цепей имеют следующий вид:

$$\dot{a}_m = -\gamma_d a_m + \kappa a_{m+1} \quad (11)$$

$$\dot{a}_i = -(\gamma_d + \kappa) a_i + \kappa a_{i+1} \text{ для } m < i < N$$

$$\dot{a}_N = -(\gamma_d + \kappa) a_N$$

$$\dot{b}_m = \gamma_d a_m + \kappa b_{m+1}$$

$$\dot{b}_i = \gamma_d a_i - \kappa b_i + \kappa b_{i+1} \text{ для } m < i < N \quad (12)$$

$$\dot{b}_N = \gamma_d a_N - \kappa b_N$$

Чтобы кинетические уравнения (8)–(12) образовали замкнутую систему, необходимо самосогласованно определить величины  $\gamma_k$ ,  $\gamma_d$ ,  $\kappa$  и  $\omega$ .

Прежде всего заметим, что суммарная скорость вытягивания звеньев короткими  $A$ - и  $C$ -цепями должна быть равна суммарной скорости втягивания в кристаллит звеньев – длинных  $A$ - и  $B$ -цепей. Это дает условие для определения  $\kappa$

$$\sum_{i=0}^{m-1} \frac{(a_i + c_i)}{\tau_i} = \kappa \sum_{i=m+1}^N (a_i + b_i) \quad (13)$$

Переход длинных  $A$ - и  $B$ -цепей из разряда  $m+1$  в разряд  $m$  приводит к превращению их продолжений в соседних прослойках из цепей  $A$ -класса в цепи  $B$ -класса. С учетом определения  $A$ - и  $B$ -классов имеем

$$\gamma_d \sum_{i=m}^N a_i = \frac{da_m}{dt} \sum_{i=m}^N a_i / \sum_{i=0}^N a_i \quad (14)$$

$$\gamma_k \sum_{i=0}^{m-1} a_i = \frac{da_m}{dt} \frac{\sum_{i=0}^{m-1} a_i}{\sum_{i=0}^N a_i} + \frac{db_m}{dt} \quad (15)$$

Полные производные по времени входящие в уравнения (14), (15), можно представить в виде

$$\frac{da_m}{dt} = \dot{a}_m + a_m \frac{dm}{dt}$$

$$\frac{db_m}{dt} = \dot{b}_m + b_m \frac{dm}{dt},$$

где  $m = [(1+\varepsilon)s_0]/\Delta s$ ;  $\varepsilon$  – деформация фибриллы. Подставляя эти соотношения в уравнения (14) и (15) и учитывая для  $\dot{a}_m$  и  $\dot{b}_m$  кинетические уравнения (11), (12), получим условия для определения  $\gamma_d$  и  $\gamma_k$

$$\gamma_d = \left( \kappa a_{m+1} - \gamma_d a_m + \frac{s}{\Delta s} \dot{e} a_m \right) / \sum_{i=0}^N a_i \quad (16)$$

$$\gamma_k = \gamma_d + \left( \kappa b_{m+1} + \gamma_d a_m + \frac{s}{\Delta s} \dot{e} b_m \right) / \sum_{i=0}^m a_i \quad (17)$$

Наконец, суммарная скорость перехода  $A$ - и  $B$ -цепей в класс  $C$  определяется скоростью разрыва коротких  $B$ -цепей, умноженной на условную вероятность того, что соседом разрыва окажется именно  $A$ - или

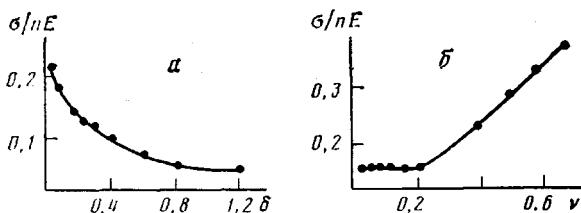


Рис. 3. Зависимость прочности микрофибриллы от вида начального распределения по длинам проходных цепей. *a*:  $\rho(l, 0)$  выбрана в виде функции (19)  $\sigma_m(\delta)$ ,  $\delta$  – среднеквадратичное уклонение длины цепей; *b*:  $\sigma_m(v)$ ,  $v$  – доля полностью распрямленных цепей в начальном распределении по длинам;  $\delta=0,06$ ; численные значения других параметров те же, что указаны в подписи к рис. 2

*B*-цепь (но не *C*-цепь); отсюда имеем условие для определения  $\omega$

$$\omega = \left( \sum_{i=0}^m \frac{db_{i+k+1}^{k+1}}{dt} \right) / \sum_{i=0}^{m-1} (a_i + b_i + c_i) \quad (18)$$

Уравнения (8)–(12) вместе с условиями самосогласования (13), (16)–(18) образуют замкнутую нелинейную систему дифференциальных уравнений, которая решается численно на ЭВМ в режиме  $\dot{\epsilon}=\text{const}$ .

Разумеется написанные кинетические уравнения и условия самосогласования носят упрощенный характер, но они описывают основные черты процесса деформации микрофибриллы: перераспределение полимерного материала между прослойками, наличие несвободного вытягивания цепей из кристаллитов, приводящего к разрывам цепей, и, наконец, взаимосвязь разрывов цепей с деформацией микрофибриллы.

На рис. 2, *a* показан вид распределения проходных цепей по длинам при различных значениях деформации микрофибриллы  $\epsilon$ . Видно, что протягивание звеньев цепей через кристаллит приводит к возникновению на функции распределения  $\rho(l)$  острого пика в области коротких цепей, который с увеличением деформации микрофибриллы перемещается в сторону больших значений длины. Интересно, что при средних деформациях микрофибриллы распределение по длинам оказывается бимодальным, что соответствует экспериментальным данным, полученным методом ЯМР-спектроскопии [7]. Сужение функции  $\rho(l)$  упрочняет микрофибриллу. Однако одновременно с этим после исчерпания возможностей вытягивания из кристаллита *B*-цепей, начинается рост доли разрывов (рис. 2, *b*). Это приводит к возникновению максимума (или длинного плато) на зависимости  $\sigma(\epsilon)$  микрофибриллы (в режиме  $\dot{\epsilon}=\text{const}$ ) (рис. 2, *c*). Величина этого максимума  $\sigma_m$  соответствует прочности микрофибриллы (при заданных  $\dot{\epsilon}$  и начальном распределении по длинам  $\rho(l, 0)$ ), так как при  $\epsilon > \epsilon_m$  фибрилла с одинаковыми аморфными прослойками неустойчива и дальнейшее увеличение деформации приведет к локализации разрушения в одной из них. В рассматриваемой модели разрушение носит вязкий характер: все *A*- и *B*-цепи рано или поздно переходят в *C*-класс, и *C*-цепи вытягивают соседние свободные концы из кристаллитов. Тем не менее, как видно из рис. 2, *b* доля разорванных цепей в предразрывном состоянии весьма велика.

На рис. 3 представлены зависимости прочности микрофибриллы от вида начальной функции распределения цепей по длинам. В соответствии с экспериментальными [7] и теоретическими данными [16] начальная  $\rho(l, 0)$  выбрана в виде

$$\rho(l, 0) = \frac{\lambda^\beta}{\Gamma(\beta)} l^{\beta-1} \exp^{-\lambda l}; \lambda > 0, \beta > 1 \quad (19)$$

Видно, что прочность падает с увеличением разброса по длинам  $\delta$  начального распределения, т. е. разрывы цепей (разупрочняющий фактор) превалируют над упрочнением за счет сужения  $\rho(l, t)$  в процессе

деформации. При достаточно больших начальных разбросах  $\sigma_m(\delta)$  меняется слабо (рис. 3, а).

В ряде экспериментальных работ высказывалось предположение о том, что в ориентированных полимерах в аморфных областях имеется некоторая доля предельно распрямленных цепей. В работе [17] такие цепи обнаружены даже в неориентированных образцах. На рис. 3, б представлен результат расчета прочности микрофибриллы при наличии в аморфных прослойках доли  $v$  таких цепей (остальные цепи считались распределенными по закону (19)).

Увеличение доли полностью распрямленных цепей до 20% приводит к слабому уменьшению прочности, а начиная с  $v=30\%$  к ее заметному возрастанию. При этом в предразрывном состоянии доля разорванных цепей на первом участке, где прочность почти не изменяется, составляет  $\approx 30\%$ , а на втором  $<1\%$ . В первом случае предразрывная деформация составляла 20%, а во втором  $\sim 7\%$ .

Первые результаты, полученные с помощью рассмотренной модели, качественно соответствуют имеющимся экспериментальным данным. Количественное прогнозирование прочности и долговечности микрофибриллы возможно при задании более реалистичных выражений (1)–(3).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Сверхвысокомодульные полимеры. Л., 1983. С. 203.
2. Уорд И. М. // Высокомолек. соед. А. 1979. Т. 21. № 11. С. 2553.
3. Марихин В. А., Мясникова Л. П. Надмолекулярная структура полимеров. Л., 1977. С. 240.
4. Марихин В. А., Мясников Г. Д. // Научные и технологические основы получения высокопрочных и высокомодульных материалов из гибкоцепных полимеров. Л., 1982. С. 140.
5. Жиженков В. В., Егоров Е. А., Марихин В. А., Мясникова Л. П. Механика композит. материалов. 1985. № 2. С. 354.
6. Zhizhenkov V. V., Egorov E. A. // J. Polymer Sci. Polymer Phys. Ed. 1984. V. 1. P. 117.
7. Егоров Е. А., Жиженков В. В., Марихин В. А., Мясникова Л. П., Ганн Л. А., Будтов В. П. // Высокомолек. соед. А. 1985. Т. 27. № 8. С. 1637.
8. Корсуков В. Е., Новик И. И., Пахомов П. М. // Структура и свойства полимерных материалов. Рига, 1979. С. 193.
9. Stoeckel T. M., Blasius J., Crist B. // J. Polymer Sci. 1978. V. 16. № 3. P. 485.
10. Регель В. П., Слуцкер А. И., Томашевский Э. Е. Кинетическая природа прочности твердых тел. М., 1974. С. 560.
11. Кауш Х. Разрушение полимеров. М., 1981. С. 440.
12. Чевычелов А. Д. // Высокомолек. соед. 1966. Т. 8. № 1. С. 49.
13. Кособукин В. А., Чевычелов А. Д. // Механика полимеров. 1973. № 5. С. 771.
14. Kausch H. H., Langbein D. // J. Polymer Sci. 1973. V. 11. P. 1201.
15. Kausch H. H., Becht J. // Deformation and Fracture of High Polymers. № 4. N. Y., 1973. P. 317.
16. Зайцев М. Г. // Высокомолек. соед. А. 1984. Т. 26. № 11. С. 2394.
17. Егоров Е. А., Жиженков В. В., Марихин В. А., Мясникова Л. П., Попов А. // Высокомолек. соед. А. 1983. Т. 25. № 4. С. 693.

Московский педагогический  
институт им. В. И. Ленина

Поступила в редакцию  
26.I.1987

#### COMPUTER SIMULATION OF DEFORMATION OF ORIENTED POLYMER MICROFIBRIL

Zaitsev M. G., Stremyakov S. A., Razumovskaya I. V.

#### Summary

The kinetic model of the microfibril deformation is proposed taking into account the deformation and fracture processes. As a result of numerical computation the evolution of the function of length distribution of communicating chains in amorphous region has been derived as well as the dependence of the stress and chain ruptures number on the strain at the constant rate of fibril deformation.