

УДК 541.64:539(2+3)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛИМЕРА НА ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА<sup>1</sup>

© 2003 г. В. Г. Ошмян, С. А. Тиман, М. Ю. Шамаев

*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук  
119991 Москва, ул. Косыгина, 4*

Поступила в редакцию 15.10.2002 г.

Принята в печать 26.05.2003 г.

Частично кристаллический полимер представляется двухфазной средой, состоящей из кристаллической и аморфной компонент. Рассматривается модель, описывающая влияние геометрии взаимного расположения компонент на свойства материала: модуль упругости, предел текучести, интенсивность деформационного размягчения и упрочнения, способность к восстановлению деформаций, характер и степень изменения деформационных диаграмм повторной вытяжки, обусловленных предварительным нагружением. Деформирование каждой из компонент описывается предложенными ранее авторами структурно чувствительными определяющими соотношениями. В проводимых компьютерных экспериментах кристаллическая фаза считается значительно более жесткой и способной к пластическому течению. Варьирование взаимного расположения фаз осуществляется в пределах повторяющейся ячейки в рамках предположения о периодичности структуры. Показано, что деформационные характеристики частично кристаллического полимера существенным образом определяются геометрией взаимного расположения кристаллической и аморфной компонент.

### ВВЕДЕНИЕ

Проблеме моделирования больших деформаций полимерных материалов уделяется большое внимание [1–11]. В работах [1–4] предложены соответствующие определяющие соотношения для стеклообразных полимеров. Дислокационные механизмы пластического течения полимерных кристаллов проанализированы в работах [5–8]. На их основе выведены уравнения, связывающие скорости пластических деформаций с касательными напряжениями в плоскостях, содержащих направление ориентации макромолекул. Предложенные уравнения использованы [5] для описания больших вязкопластических деформаций полимерных поликристаллов.

В зависимости от условий деформирования (прежде всего от температуры) аморфная компонента частично кристаллического полимера на-

ходится в высокоэластическом или стеклообразном состоянии. Дислокационный механизм течения кристаллической компоненты [5–8] и допущение о высокоэластическом состоянии аморфной фазы использованы в работах [9–11] для формулировки соотношений, определяющих деформирование частично кристаллического полимера в приближении самосогласования.

Тем не менее, степень и характер влияния надмолекулярной структуры аморфно-кристаллического полимера на его деформационные свойства остается неизученной. Строение частично кристаллического полимера характеризуется многообразием кристаллических форм и аморфного состояния, формированием образований следующего масштабного уровня типа сферолитов. В результате деформирования текстура полимера подвергается существенным изменениям. В частности, одноосная вытяжка приводит к разрушению сферолитов и формированию кристаллов с вытянутыми цепями. Многофакторность проблемы вызывает необходимость ее расчленения на более простые. Важным представляется анализ влияния качества “перемешивания” (взаимопро-

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 00-03-33169 и 01-03-32043, 01-03-32237).

E-mail: oshmyan@center.chph.ras.ru (Ошмян Виктор Григорьевич).

никновения) кристаллической и аморфной компонент, связность той или иной фазы, геометрия их взаимного расположения. Цель настоящей работы – проведение соответствующего анализа путем решения модельных задач механики неоднородной сплошной среды с использованием простейших структурных предположений.

В целях экономии вычислительных ресурсов используется двумерная постановка задачи. Материал представляется смесью двух (кристаллической и аморфной) компонент, несмотря на многообразие форм каждой из них. Деформирование обеих компонент описывается структурно чувствительными определяющими соотношениями, точная формулировка которых содержится в публикациях [12–14]. Кристаллическая фаза предполагается существенно более жесткой по сравнению с аморфной и способной к пластическому течению. Таким образом, как и в работах [9–11], последующее моделирование ограничивается высокоэластическим состоянием аморфной компоненты. Взаимное расположение областей аморфной и кристаллической текстуры варьируется в пределах повторяющейся ячейки таким образом, чтобы принятые допущения отражали уровень смещения компонент, задавали либо прогнозировали связность фаз.

В работе анализируется влияние структуры частично кристаллического полимера на следующие механические характеристики.

Диаграммы первичной и вторичной (после разгрузки и восстановления деформаций) одноосной вытяжки. Обсуждается изменение их характера, значения модулей Юнга, напряжений и деформаций течения.

Диаграммы разгрузки с той же по абсолютной величине скоростью сжатия.

Особенности процесса восстановления деформаций.

#### ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ БОЛЬШИХ ВЯЗКОУПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ ОДНОФАЗНОГО ПОЛИМЕРА

Детальное описание и обсуждение модели больших деформаций однофазного полимера содержится в работах [12, 13]. Для удобства чтения

статьи ее основные особенности изложены в настоящем разделе.

1. Главное отличие от других моделей (в частности, от приведенных в работах [5–11]) состоит в статистическом описании текстуры, задаваемой не фиксированной ориентацией  $\mathbf{p}(X)$  структурного элемента (полимерного фрагмента) в рассматриваемой точке  $X$  тела, а их распределением  $f(\mathbf{p}, X)$ .

2. Кинематика деформирования основана на мультипликативном представлении градиента деформаций:  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_p$ ,  $\mathbf{F} = \partial x / \partial X$ ,  $\mathbf{F}_e = \partial X / \partial X_p$ ,  $\mathbf{F}_p = \partial X_p / \partial X$ . Через  $x = x(t)$ ,  $X = x(0)$  и  $X_p(t)$  обозначены текущие, исходные и “пластические” (соответствующие свободной от напряжений конфигурации) координаты точек тела. Матрицы  $\mathbf{F}_e$  и  $\mathbf{F}_p$  определяют упругие и пластические деформации. В частности, как это принято в теории больших деформаций, тензор упругих деформаций  $\epsilon$  задан логарифмированием произведения градиента упругих деформаций  $\mathbf{F}_e$  на сопряженную ему матрицу

$$\epsilon = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{F}_e \mathbf{F}_e^*).$$

3. Тензор напряжений  $\sigma$  определяется в текущей системе координат плотностью упругой энергии  $U_e$ . Указанная плотность (по аналогии со случаем малых упругих деформаций) задается двукратной сверткой тензора упругих модулей  $C_{ijkl}^{(f)}$  материала данной текстуры  $f(\mathbf{p})$  с тензором упругих деформаций  $\epsilon$ :

$$U_e = \frac{1}{2} C_{ijkl}^{(f)} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}$$

Принятое допущение о совместности (равенстве) деформаций различным образом ориентированных полимерных фрагментов обуславливает аддитивный вклад в каждой ориентации  $\mathbf{p}$  в соответствии с ее весом  $f(\mathbf{p})$  в значения модулей  $C_{ijkl}^{(f)}$ . В частности, ориентированный полимер характеризуется сильной анизотропией упругих свойств. Соответствующий тензор упругости  $C_{ijkl}^{(0)}$  определяется значениями модулей Юнга вдоль  $E_{\parallel}^{(0)}$  и перпендикулярно  $E_{\perp}^{(0)}$  направлению ориентации (причем  $E_{\parallel}^{(0)} \gg E_{\perp}^{(0)}$ ), коэффициента Пуассона поперечного сжатия, вызываемого одноосным про-

дольным растяжением  $v_{\perp\parallel}^{(0)}$ , и продольного модуля сдвига  $G_{\parallel}^{(0)}$ . В случае равномерного ориентационного распределения  $f(\mathbf{p}) = \text{const}$  материал является изотропным.

4. В соответствии с мультипликативным разложением градиента деформаций кинетика пластического течения задается мультипликативным законом накопления градиента пластических деформаций за малый промежуток времени

$$\mathbf{F}_p(t + \Delta t) = \mathbf{F}_p^a(\Delta t)\mathbf{F}_p(t)$$

В качестве механизма течения принято взаимное смещение полимерных фрагментов в направлении их ориентации, пропорциональное соответствующей сдвиговой компоненте тензора упругих деформаций и временному промежутку  $\Delta t$ . Коэффициент пропорциональности  $k_p$  характеризует интенсивность течения и является параметром модели.

5. Скорость изменения распределения по ориентациям  $f(\mathbf{p})$  определяется упругим преобразованием  $\mathbf{F}_e \mathbf{p}$  ориентации  $\mathbf{p}$  каждого полимерного фрагмента. Детальные формулировки приведены в публикациях [12–14]. Отметим лишь, что абсолютное значение скорости задается коэффициентом пропорциональности  $k_o$ , являющимся вторым кинетическим параметром модели.

## СТРУКТУРНЫЕ МОДЕЛИ

Варьирование взаимного расположения кристаллической и аморфной компонент проводится в рамках допущения о периодичности структурной организации полимера (рис. 1). Макроскопический размер образца предполагается существенно большим характерного масштаба структуры (размера ячейки периодичности):  $L \gg 2l$ .

Каждая из анализируемых структурных моделей характеризуется квадратной ячейкой периодичности и зеркальными симметриями относительно вертикальных и горизонтальных прямых, проходящих через центры ячеек. На рис. 2 приведены схемы расположения аморфной и кристаллической компонент в пределах четверти ячейки, соответствующие принятым допущениям.

Предположение об идеальном перемешивании фаз (рис. 2а) определяет первую структурную мо-

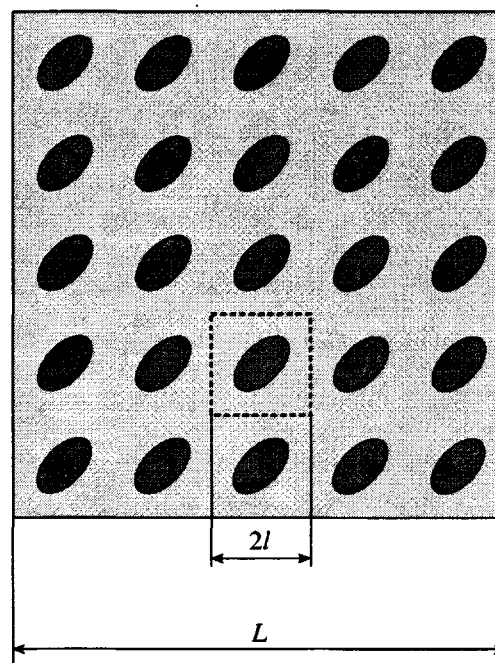
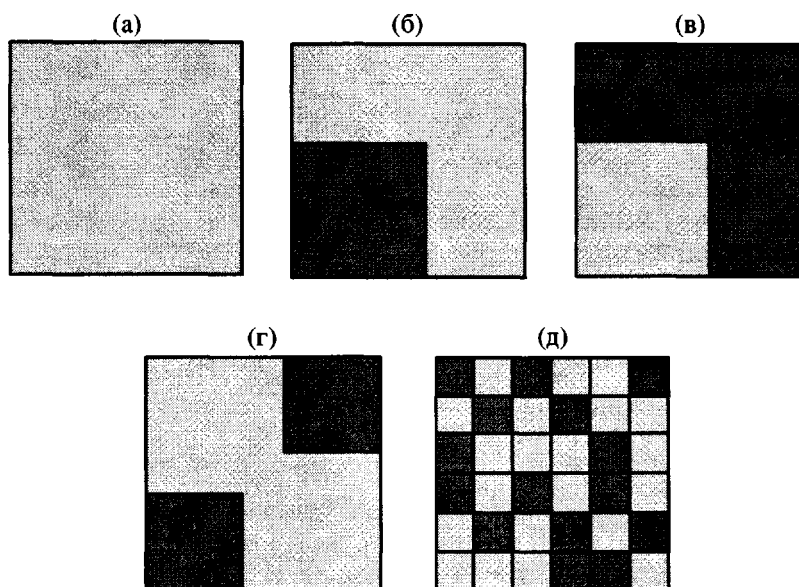


Рис. 1. Схема двухфазной модели периодического расположения аморфной и кристаллической компонент в частично кристаллическом полимере и обозначения характерных размеров.

дель, обсуждавшуюся ранее [13]. Для ее обозначения выбран промежуточный тон окрашивания ячейки. Допущение об идеальности перемешивания означает, во-первых, сосуществование компонент в пропорции, определяемой степенью кристалличности в каждой точке тела, и, во-вторых, совпадение текущих координат  $x(t, X)$  в любой момент времени. Очевидно, совпадение координат гарантирует равенство полных градиентов деформаций  $\mathbf{F}$ . При этом их упругие  $\mathbf{F}_e$  и пластические  $\mathbf{F}_p$  составляющие могут быть различными.

Во второй структурной модели (рис. 2б) центры кристаллических включений квадратной формы составляют квадратную решетку, а их ребра параллельны осям этой решетки. Отметим, что текстуры как аморфной, так и кристаллической фаз в исходном недеформированном состоянии описываются равномерными ориентационными распределениями, что обеспечивает их изотропию. Отличительная особенность второй структурной модели состоит в том, что ее допущения гарантируют связность аморфной и несвязность кристаллической компонент при произвольном значении степени кристалличности  $\alpha$ .



**Рис. 2.** Схемы взаимного расположения кристаллической (темные области) и аморфной (светлые) компонент внутри четверти ячейки периодичности. Пояснения в тексте.

Третья модель расположения аморфной и кристаллической компонент (рис. 2в) строится путем инверсии фаз второй модели. Тем самым, независимо от значения  $\alpha$ , кристаллическая компонента занимает связную, а аморфная – несвязную области.

Связность либо несвязность кристаллической и аморфной компонент определяется в четвертой модели степенью кристалличности. Отмеченное свойство обеспечивается “шахматным” расположением центров симметрии каждой из фаз (рис. 2г). При  $\alpha < 50\%$  кристаллическая компонента расположена в виде не связанных включений в аморфной матрице. При  $\alpha > 50\%$  связность изменяется на противоположную.

Зависящая от  $\alpha$  связность фаз характерна и для структурной модели, схематически изображенной на рис. 2д. Она подразумевает случайное заполнение квадратных ячеек материалами кристаллической либо аморфной фаз с вероятностями  $\alpha$  и  $1 - \alpha$  соответственно. В рамках данной модели связность той или иной компоненты определяется тем, достаточна ли ее концентрация для формирования непрерывного кластера. Значение порога для рассматриваемой системы близко к 40%, если считать связанными ячейки, имеющие общую сторону либо вершину. Тем самым, в интервале  $40\% < \alpha < 60\%$  связными оказываются одновременно аморфная и кристаллическая фазы.

Существование такого интервала составляет качественное отличие случайной структурной модели от “шахматной”.

#### УСЛОВИЯ НАГРУЖЕНИЯ И ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ СООТНОШЕНИЙ

Моделирование влияния структурной организации аморфно-кристаллического полимера на его деформационное поведение проводили в условиях макроскопически однородного растяжения–сжатия и восстановления деформаций в направлении одной из осей (вертикальной или горизонтальной, рис. 2) симметрии структуры. Математическая теория осреднения уравнений в периодических средах [15, 16] позволяет ограничиться рассмотрением периодических полей градиентов деформаций, напряжений и других механических характеристик при сохранении периодичности текстуры – распределения полимерных фрагментов по ориентациям  $f(\mathbf{p})$  в процессе деформирования. Указанное ограничение допускает постановку краевых задач на ячейке периодичности.

Согласованность направления деформирования с направлением осей зеркальной симметрии структуры позволяет, во-первых, сузить полные ячейки периодичности до их четвертей, изображенных на рис. 2а, во-вторых, значительно упро-

ставить постановку краевых условий и алгоритма решения соответствующих краевых задач. Точные формулировки краевых задач и алгоритмы их решения детально описаны в работах [13, 14, 17].

Скорость макроскопического растяжения (сжатия)  $\dot{\epsilon}$  принималась равной  $\pm 0.1$ . Значения продольного (в направлении ориентации)  $E_{\parallel}$ , поперечного (в трансверсальном направлении)  $E_{\perp}$  модулей Юнга, коэффициента Пуассона поперечного сжатия, обусловленного продольным растяжением  $\nu_{\perp\parallel}$ , и модуля сдвига  $G$ , определяющие компоненты анизотропного тензора упругих модулей ориентированных полимерных фрагментов кристаллической фазы  $C_{ijkl}^{(c)}$ , приняты равными 2.5, 0.025, 0.3, и 0.02 отн. ед. соответственно. Обозначение размерности “отн. ед.” означает, что здесь и далее напряжения и модули упругости приведены к величине, составляющей 0.4 аксиального модуля Юнга кристаллической фазы. Выбор такой нормировки приводит к близкому к единице значению модуля растяжения изотропной (равномерно ориентированной) кристаллической компоненты. Аморфная компонента предполагается изотропной и в 10 раз более мягкой, чем изотропная (верхний индекс (*iso*)) кристаллическая:  $C_{ijkl}^{(a)} = 0.1 C_{ijkl}^{(iso)}$ . Параметры  $k_p$  и  $k_o$ , определяющие скорости пластического течения и эволюции текстуры для кристаллической фазы, составляли 2.0 и 0.5 соответственно. Значения кинетических параметров приведены в безразмерных единицах, которые соответствуют условным единицам времени, использованным при моделировании. Как отмечалось выше, остаточные деформации и структурные перестройки аморфной компоненты не учитывались в рамках проведенного моделирования, т.е. значения кинетических параметров аморфной фазы приняты равными нулю.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Модель идеального смешения аморфной и кристаллической компонент (рис. 2а) и ее следствия изложены и обсуждены в работе [13]. В настоящем разделе будет проведен сравнительный анализ деформационного поведения частично кристаллического полимера, предсказываемого каждой из пяти рассматриваемых структурных моделей рис. 2. Особое внимание будет уделено

анализу значений упругих модулей, напряжений и деформаций текучести и эффективности восстановления деформаций. В рамках принятой модели восстановление деформаций обусловлено идеальным межфазным взаимодействием кристаллической и аморфной компонент и высокоэластическим состоянием аморфной составляющей.

Сравнительный анализ проводится на основе результатов моделирования деформирования в такой последовательности макроскопических условий нагружения: первичная вытяжка с фиксированной скоростью деформирования; разгрузка полимера до нулевого макроскопического напряжения с той же по абсолютной величине скоростью; восстановление деформаций при нулевом значении макроскопического напряжения на протяжении фиксированного (40 временных единиц) временного интервала; вторичное нагружение.

Рассчитанные инженерные деформационные диаграммы аморфно-кристаллических полимеров высокой степени кристалличности  $\alpha = 75\%$  (зависимости растягивающего усилия, нормированного на единичное сечение в недеформированном состоянии, от степени вытяжки) приведены на рис. 3А.

Видно, что независимо от используемой структурной модели наблюдается ряд общих закономерностей. В частности, повторное нагружение характеризуется меньшим значением предела текучести и тенденцией к исчезновению пика текучести. Основной причиной отмеченных изменений является, с нашей точки зрения, неполное восстановление деформаций и соответственно неполное восстановление измененной текстуры. Как следует из результатов моделирования деформирования однофазного полимера [12], структурные изменения морфологии, определяющие формирование пика текучести при первом нагружении, уже произошли, и при повторном нагружении текстура полимера оказывается (по крайней мере частично) в “послепиковом” состоянии.

Количественные характеристики сложных диаграмм рис. 3А приведены в табл. 1. Видно, что модули первичного нагружения сильно зависят от структуры. Изменение модулей после вторичного нагружения существенно более слабое. Отмеченное различие дает основания для гипотезы,

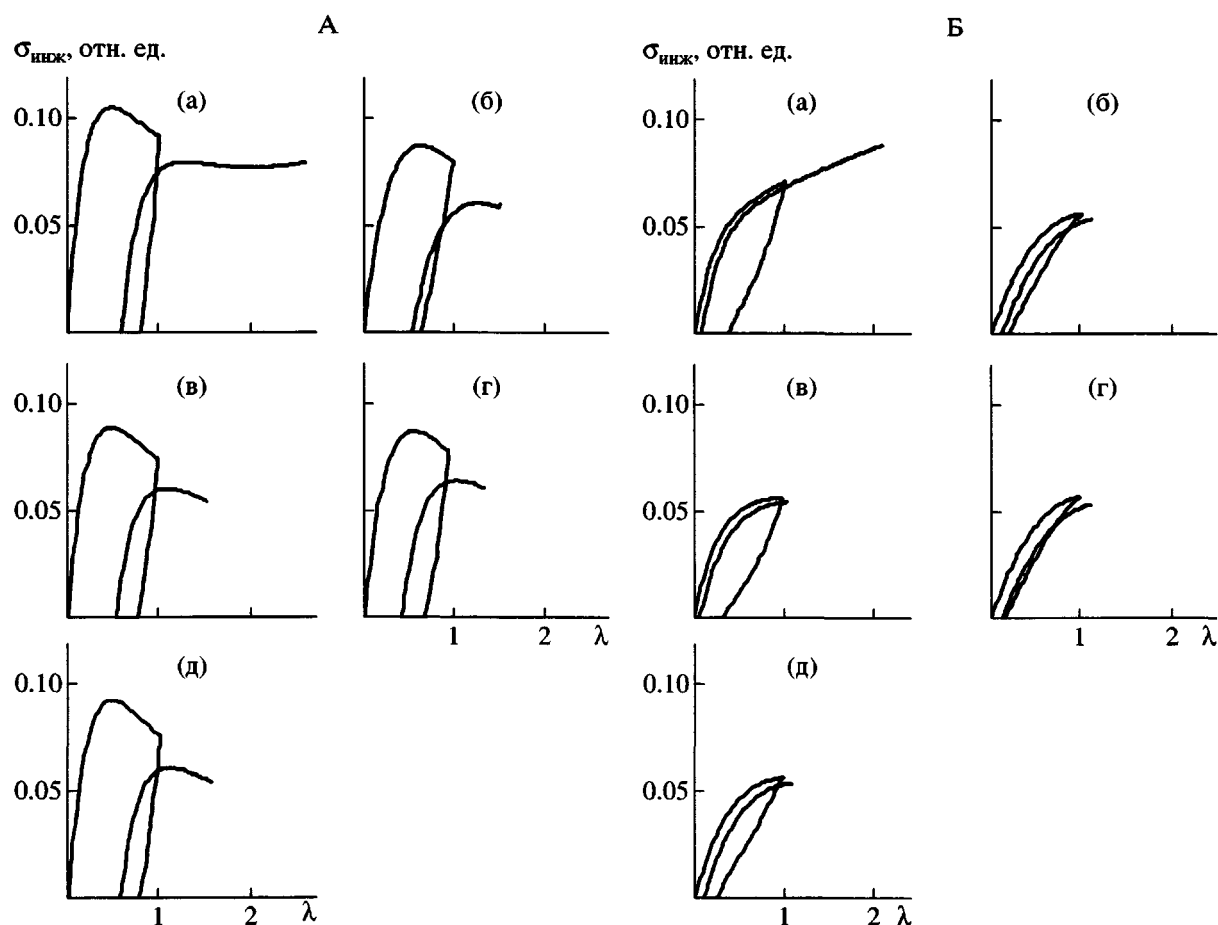


Рис. 3. Инженерные диаграммы одноосной вытяжки, сменяющейся разгрузкой при  $\lambda \approx 1$ , восстановлением деформаций и повторным нагружением, рассчитанные для пяти структурных моделей аморфно-кристаллического полимера (рис. 2а–2д) высокой  $\alpha = 75\%$  (А) и низкой степени кристалличности  $\alpha = 25\%$  (Б).

состоящей в том, что в результате сложного процесса нагружения происходит формирование текстуры, определяемой этим процессом, в результате которого “выравнивается” исходная морфология. Влияние структуры на значение предела

текучности аналогично влиянию на модуль, хотя количественно оказывается более слабым. Еще менее значимо различие значений деформации после разгрузки  $\epsilon_p$  и восстановленной деформации  $\epsilon_v$ . Деформации текучести  $\epsilon_t$  не слишком чув-

Таблица 1. Параметры деформационных диаграмм вытяжки аморфно-кристаллического полимера высокой степени кристалличности  $\alpha = 75\%$  (рис. 3А) в зависимости от выбранной структурной модели (рис. 2)

Модель	$E_1$ , отн. ед.	$E_2$ , отн. ед.	$E_2/E_1$	$\sigma_t$ , отн. ед.	$\epsilon_t$	$\epsilon_p$	$\epsilon_v$
а	0.8	0.689	0.861	0.105	0.5	0.776	0.592
б	0.373	0.355	0.952	0.0855	0.64	0.64	0.538
в	0.558	0.590	1.06	0.0904	0.49	0.76	0.54
г	0.471	0.492	1.04	0.0870	0.54	0.66	0.408
д	0.558	0.625	1.12	0.0919	0.49	0.78	0.575

Примечание.  $E_1, E_2$  – модули Юнга первичного и вторичного нагружения,  $\sigma_t$  – напряжение текучести,  $\epsilon_t$  – деформация текучести,  $\epsilon_p$  – деформация после участка разгрузки,  $\epsilon_v$  – деформация после участка восстановления.

ствительны к особенностям структуры материала. Некоторое исключение составляет случай связности аморфной фазы при несвязности кристаллической компоненты (структура б).

Аналогичный анализ представлен на рис. 3Б и в табл. 2 для полимера невысокой ( $\alpha = 25\%$ ) степени кристалличности. Моделирование предсказывает ряд существенных отличий от диаграмм, рассчитанных для высокой степени кристалличности (рис. 3А, табл. 1). Первое состоит в исчезновении пика текучести. Это отличие обусловлено тем, что за формирование пика текучести, как и за пластическое течение вообще, ответственной является кристаллическая компонента, в то время как аморфная находится в высокоэластическом состоянии. Указанная тенденция ярко проявляется в предположениях об идеальном смешении (а), о сохранении связности аморфной и несвязности кристаллической компонент (б) и менее при использовании других структурных моделей. Отметим, что следствие исчезновения пика текучести – изменение механизма одноосного деформирования с неоднородного (сопровождающегося формированием и развитием шейки) на однородный.

Вторым важным следствием снижения степени кристалличности является увеличение способности полимера к восстановлению деформаций. Это изменение деформационных свойств, безусловно, связано с механизмом восстановления, состоящим в соответствующей способности высокоэластической аморфной фазы. Из последней строки табл. 2 видно, что отношение остаточных деформаций до и после участка восстановления очень чувствительно к морфологии аморфно-кристаллического полимера при невысоких степенях кристалличности.

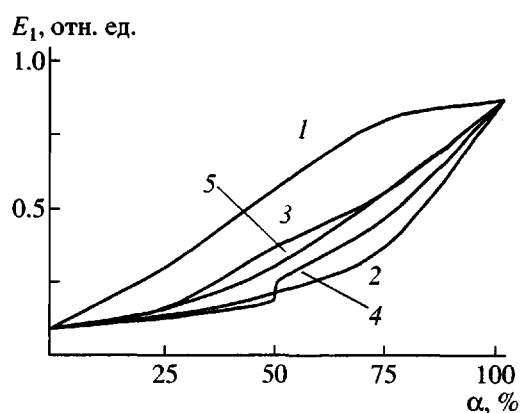
На рис. 4 представлены зависимости значений модуля Юнга первичного нагружения от степени кристалличности, рассчитанные для рассматриваемых пяти структурных моделей. Приведенные зависимости демонстрируют сильное влияние структуры аморфно-кристаллического полимера на его механические свойства: значения модуля упругости могут быть изменены в несколько раз в результате изменения взаимного расположения аморфной и кристаллической компонент. Модель идеального смешения (рис. 2а) предсказывает наибольшие значения, а модель, предполагаю-

**Таблица 2.** Параметры деформационных диаграмм вытяжки аморфно-кристаллического полимера низкой степени кристалличности,  $\alpha = 25\%$ , (рис. 3Б) в зависимости от выбранной структурной модели (рис. 2)

Модель	$E_1$ , отн.ед.	$E_2$ , отн.ед.	$E_2/E_1$	$\epsilon_p$	$\epsilon_b$	$\epsilon_p/\epsilon_b$
а	0.293	0.298	1.02	0.37	0.073	5.06
б	0.130	0.132	1.02	0.2	0.106	1.88
в	0.156	0.206	1.321	0.32	0.06	5.33
г	0.124	0.125	1.04	0.16	0.112	1.42
д	0.155	0.160	1.03	0.26	0.096	2.71

щая связность аморфной и несвязность кристаллической компонент, – наименьшие.

Значения, описывающие кривые 2 и 3, близки к известным оценкам Хашина–Штрикмана [18], ограничивающих значения модулей композитов изотропной структуры. Кривая 4 отражает влияние инверсии фаз на упругие свойства материала. Как отмечалось выше, она реализуется при  $\alpha = 50\%$ . Случайная структурная модель (кривая 5) также предсказывает переход, соответствующий инверсии фаз, однако он оказывается существенно более плавным. Причиной отсутствия резкого перехода заключается, по всей видимости, в существовании интервала степеней кристалличности,  $40\% < \alpha < 60\%$ , в котором сохраняется связность обеих компонент.



**Рис. 4.** Зависимости модуля первичного растяжения от степени кристалличности, рассчитанные с использованием пяти структурных моделей: 1 – идеальное смешение, рис. 2а; 2 – квадратная решетка кристаллических включений, рис. 2б; 3 – квадратная решетка аморфных включений, рис. 2в; 4 – шахматное расположение центров симметрий фаз, рис. 2г; 5 – случайное расположение компонент, рис. 2д.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Boyce M.C., Parks D.M., Argon A.S. // *Mechanics of Materials*. 1988. V. 7. № 1. P. 15.
2. Arruda E.M., Boyce M.C. // *Int. J. Plasticity*. 1993. V. 9. № 6. P. 697.
3. Hasan O.A., Boyce M.C. // *Polym. Eng Sci.* 1995. V. 35. № 4. P. 331.
4. Bergstrom J.S., Boyce M.C. // *J. Mech. Phys. Solids*. 1998. V. 46. № 5. P. 931.
5. Parks D.M., Ahzi S. // *J. Mech. Phys. Solids*. 1990. V. 38. № 5. P. 701.
6. Bartczak Z., Argon A.S., Cohen R.E. // *Macromolecules*. 1992. V. 25. № 19. P. 5036.
7. Lin L., Argon A.S. // *Macromolecules*. 1994. V. 27. № 23. P. 6903.
8. Lin L., Argon, A.S. // *J. Mater. Sci.* 1994. V. 29. № 2. P. 294.
9. Parks D.M., Ahzi S. // *Proc. of International Union of Theoretical and Applied Mechanics. IUTAM Symposium / Ed. by Dvorak G.J. New York; Berlin; Hiedelberg: Springer-Verlag, 1991. P. 325.*
10. Lee B.J., Argon A.S., Parks D.M., Ahzi S., Bartczak Z. // *Polymer*. 1993. V. 34. № 18. P. 3555.
11. Lee B.J., Parks D.M., Ahzi S. // *J. Mech. Phys. Solids*. 1993. V. 41. № 10. P. 1651.
12. Ошмян В.Г. // *Высокомолек. соед. Б.* 1995. Т. 37. № 1. С. 154.
13. Нертманн К.Р., Ошмян В.Г., Тиман С.А., Шамаев М.Ю. // *Высокомолек. соед. С.* 2002. Т. 44. № 9. С. 1677.
14. Ошмян В.Г., Тиман С.А., Шамаев М.Ю. // *Высокомолек. соед. А.* 2003. Т. 45. № 10. С. 1689.
15. Bensoussan A., Lions J.-L., Papanicolaou G. *Asymptotic Methods in Periodic Structures*. Amsterdam: North-Holland, 1978.
16. Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. *Averaging Processes in Periodic Media. Mathematical Problems in Mechanics of Composite Materials*. Dordrecht: Kluwer Academic, 1989.
17. Muravin D.K., Oshmyan V.G. // *J. Macromol. Sci., Phys.* 1999. V. 38. № 5–6. P. 749.
18. Hashin Z., Shtrikman S. // *J. Mech. Phys. Solids*. 1963. V. 11. № 1. P. 127.

## Modeling the Effect of the Structure of a Semicrystalline Polymer on Its Deformation Properties

V. G. Oshmyan, S. A. Timan, and M. Yu. Shamaev

*Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,  
ul. Kosygina 4, Moscow, 119991 Russia*

**Abstract**—A semicrystalline polymer was treated as a two-phase medium composed of crystalline and amorphous components. A model describing the influence of the geometry of mutual arrangement of the components on the properties of the material: elastic modulus, yield stress, strain softening and hardening intensity, recovery, and character and degree of change due to loading history in the stress–strain diagrams upon repeated extension, was considered. The deformation of each component was described in terms of the structure-sensitive constitutive equations proposed earlier. In computer simulations, the crystalline phase was assumed to be considerably more rigid and capable of plastic flow. The mutual arrangement of the phases was varied within the repeating cell in terms of the assumption of the structure periodicity. It was shown that the strain characteristics of the semicrystalline polymer are determined to a great extent by the geometry of mutual arrangement of the crystalline and amorphous components.