SZILÁRD MŰANYAG KONTINUUMOK ANYAGEGYENLETE

HORVÁTH Róbert

Debreceni Egyetem Agrártudományi Centrum Műszaki Főiskolai Kar
Környezet- és Vegyészmérnöki Tanszék
4028 Debrecen, Ótemető **u. 2-4.**
horvath@mfk.unideb.hu

KIVONAT

Szilárd polimerek mechanikai viselkedésének matematikai leírásához idealizált reológiai anyagmodelleket használnak fel (ideális rugó, ideális viszkózus elem, stb.), amelyekből tetszőleges kapcsolásokkal állítják elő a legkülönfélébb anyagtulajdonságokat (kúszás, relaxáció, stb.) leíró anyagegyenleteket. A dolgozatban bemutatjuk azt az eljárást, amelynek segítségével az Onsager-féle vezetési törvényből kiindulva az irreverzibilis termodinamika eszközrendszerét felhasználva lehet a legkülönfélébb anyagegyeletet felírni. Az elvet egy ötelemes test anyagegyenletének a levezetésével szemléltetjük. Az eljárás során ugyanakkor a hagyományos szemlélet során mérésekkel meghatározható anyagtulajdonságok (rugalmassági modulusz, kúszási tényező, relaxációs állandó, stb.) termodinamikai értelmezést is nyernek.

Kulcsszavak: műanyagok, anyagegyenlet, reológia, kúszás, relaxáció

1. BEVEZETÉS

A szilárd kontinuumnak tekintett műanyagok anyagegyenletének meghatározása az irreverzibilis termodinamika Onsager törvényeinek a felhasználásával lehetséges.
Onsager első törvényében kimondta, hogy valamely extenzív mennyiség konduktív áramát valamennyi jellemző intenzív mennyiség inhomogenitása befolyásolja [1]:

$$j_i = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} \nabla y_k \quad , \tag{1}$$

ahol ∇ az inhomogenitás operátora, y_k a k-adik intenzív mennyiség, L_{ik} pedig a megfelelő vezetési tényező. Onsager törvénye szerint az L_{ik} vezetési tényező szimmetrikus :

$$L_{ik} = L_{ki} \quad , \tag{2}$$

és minden esetben pozitív definit.
A tapasztalatok szerint a szerkezeti anyagnak tekintett műanyagokban lejátszódó folyamatok mechanikai, termikus, és anyagi kölcsönhatások formájában jelentkeznek. A megfelelő jellemző intenzív mennyiségek rendre a **v** konvektív áramlási sebesség, a T abszolút hőmérséklet és a μ_i a megfelelő anyagi kölcsönhatás kémiai potenciálja.
Így az Onsager-törvények szerint a konduktív impulzus áram, azaz a feszültségtenzor a legáltalánosabb esetben:

$$\underset{=}{F} = \underset{=}{L}\ \mathbf{v} \circ \nabla + \underset{= FT}{L}\ \nabla T + \sum_{i=1}^{n} \underset{= F\mu_i}{L}\ \nabla \boldsymbol{\mu}_i \quad , \tag{3}$$

ahol $\underset{=}{L}$ negyedrendű tenzor , $\underset{= FT}{L}$ és $\underset{= F\mu_i}{L}$ az ún kereszteffektusokat tartalmazó vezetési együtthatók harmadrendű tenzorok.
Ha a termikus és az anyagi kölcsönhatásoktól eltekintünk, azaz:

$$\nabla T = 0 \ ,$$

és

$$\nabla \boldsymbol{\mu}_i = 0 \quad \text{i=1,2,…..,n} \quad , \quad \text{akkor:}$$

$$\underset{=}{F} = \underset{=}{L}\ \mathbf{v} \circ \nabla \ . \tag{4}$$

Az $\underset{=}{L}$ negyedrendű ún. impulzusvezetési tenzor 81 komponense nem független egymástól. A maximálisan független komponensek száma tökéletesen anizotróp esetben 21. Természetesen a vezetési együtthatók nem konstansok, hanem a mechanikai és termodinamikai adatok függvényei.

Asszonyi bebizonyította, hogy a **v** konvektív sebesség helyett az **u** elmozdulást tekinthetjük a mechanikai kölcsönhatás jellemző intenzív mennyiségeként [2], így a szilárd műanyagokra vonatkozó anyagegyenlet:

$$\underset{=}{F} = \underset{=}{L'}\ \mathbf{u} \circ \nabla \ . \tag{5}$$

2. IZOTRÓP KONTINUUMOK ANYAGEGYENLETE

Bár általában a szilárd műanyag általában nem tekinthető izotrópnak, mégis indokoltnak tartjuk ezt az esetet is, mert egyrészt az izotrópia feltételezésével jelentősen leegyszerűsödik az anyagegyenlet, másrészt a műanyagok esetében fontos speciálisan ortotróp anyagok fizikai egyenletének a felírása az izotróp anyagokra vonatkozó eredmények figyelembe vételével egyszerűen elvégezhető.
Mint ismeretes izotróp esetben a független vezetési együtthatók száma 2, és az anyagegyenlet így írható fel:

$$\underset{=}{F} = \boldsymbol{\lambda} \frac{1}{2}[\nabla \circ \mathbf{u} + \mathbf{u} \circ \nabla\ ] + \boldsymbol{\mu} \nabla\ \mathbf{u}\ \underset{=}{I} \ , \tag{6}$$

ahol $\boldsymbol{\lambda}$ és $\boldsymbol{\mu}$ a két független vezetési együttható. Ha bevezetjük a megszokott

$$\underset{=}{D} = \frac{1}{2}\,[\,\nabla \circ \mathbf{u} + \mathbf{u} \circ \nabla\ ]$$

tenzor jelölést, írható:

$$\underline{\underline{F}} = \lambda \underline{\underline{D}} + \mu \nabla \mathbf{u} \underline{\underline{I}}\,, \tag{7}$$

ahol $\underline{\underline{D}}$ természetesen nem a megszokott módon értelmezett deformációs tenzort jelenti, csupán egyszerűsítési jelölések, amelyeket csak infinitezimális érték esetén tekinthetünk a hagyományos szemléletű deformációnak. Természetesen semmi akadálya annak, hogy a deformáció tenzorának nevezzük, és a továbbiakban úgy is tesszük.

Ha a megszokott módon bevezetjük az ún. feszültségi deviátor-tenzort és feszültségi gömb-tenzort, ill. a deformációs deviátor-tenzort és a deformációs gömb-tenzort, akkor a feszültségi és deformációs tenzor:

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{T}} + \underline{\underline{T}}_0\,,$$

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{E}}_0$$

felbontásával az anyagegyenlet így írható fel:

$$\underline{\underline{T}} = \lambda \underline{\underline{E}} \tag{8}$$

és

$$\underline{\underline{T}}_0 = (\lambda + 3\mu)\underline{\underline{E}}_0\;. \tag{9}$$

Ebben az egyenletben szereplő λ és μ vezetési együtthatók skalár függvények, amelyek a mechanikai és termodinamikai adatok függvényei.

3. SZILÁRD MŰANYAGOK ANYAGEGYENLETE

A következőkben az Onsager-féle lineáris elmélet keretén belül maradva bemutatjuk, hogyan juthatunk ezekből az egyenletekből a gyengén térhálós elasztomerek számos tulajdonságát leíró ún. Standard-Solid modellhez, ill. az amorf termoplasztikus polimerek tulajdonságait hordozó ún. Burgers, akár az ún. ötelemes modellhez [3], [4], [5], [6]. Mivel az anyagállandók meghatározása mechanikai anyagvizsgálatokkal lehetséges, a levezetést egytengelyű feszültségállapotra vonatkoztatva írjuk fel. Természetesen a levezetés érvényes az általános esetre is.

A lineáris elméletben a vezetési együtthatókat **„állandóknak tekintjük a lineáris törvényben előforduló fluxusokra és erőkre”** nézve [7], vagyis esetünkben a λ <u>közvetlenül</u> csak a $\dot{\sigma}$, $\dot{\varepsilon}$, $\ddot{\sigma}$, $\ddot{\varepsilon}$,…. , valamint a termodinamikai adatok függvénye, és nem függ a termodinamikai erőt jelentő ε-tól és a fluxust jelentő σ-tól. A kettőnél magasabbrendű deriváltakat figyelmen kívül hagyva egy sorfejtéssel a módosított Burgers modell egyenletét kapjuk, az elsőnél magasabbrendű deriváltak figyelmen kívül hagyásával pedig a Standard-Solid test egyenletét:

$$\sigma = \lambda(\dot{\sigma}, \dot{\varepsilon}, \ddot{\sigma}, \ddot{\varepsilon}, \ldots, T, \ldots)\varepsilon\;. \tag{10}$$

Csak az ún. ötelemes test egyenletének levezetését mutatjuk be, a Standard-Solid test egyenletének levezetését analóg módon lehet elvégezni.
Fejtsük Taylor sorba a fenti egyenletben szereplő λ függvényt az első négy paramétere szerint, feltételezve az izoterm esetet:

$$\lambda = [\lambda]_{0,0,0,0} + [\frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\sigma}}]_{0,0,0,0}\dot{\sigma} + [\frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0}\dot{\varepsilon} + [\frac{\partial \lambda}{\partial \ddot{\sigma}}]_{0,0,0,0}\ddot{\sigma} + [\frac{\partial \lambda}{\partial \ddot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0}\ddot{\varepsilon} \quad . \tag{11}$$

Az eredeti egyenlet szerint a λ a σ-n és az ε-on keresztül függ az idő szerinti deriváltaktól, így az összetett függvényekre vonatkozó deriválási szabály szerint:

$$[\frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\sigma}}]_{0,0,0,0} = [\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\sigma}}]_{0,0,0,0} = \varepsilon^{-1}[\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\sigma}}]_{0,0,0,0} \quad , \tag{12}$$

$$[\frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} = [\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} = \varepsilon^{-1}[\frac{\partial \sigma}{\dot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} \quad , \tag{13}$$

$$[\frac{\partial \lambda}{\partial \ddot{\sigma}}]_{0,0,0,0} = [\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\sigma}}]_{0,0,0,0} = \varepsilon^{-1}[\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\sigma}}]_{0,0,0,0} \quad , \tag{14}$$

$$[\frac{\partial \lambda}{\partial \ddot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} = [\frac{\partial \lambda}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} = \varepsilon^{-1}[\frac{\nabla \sigma}{\partial \ddot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} \quad . \tag{15}$$

Ha ezeket behelyettesítjük az eredeti (10) egyenletbe kapjuk:

$$\sigma = [\lambda]_{0,0,0,0}\varepsilon + [\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\sigma}}]_{0,0,0,0}\dot{\sigma} + [\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0}\dot{\varepsilon} + [\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\sigma}}]_{0,0,0,0}\ddot{\sigma} + [\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0}\ddot{\varepsilon} \quad . \tag{16}$$

Bevezetve a következő jelöléseket:

$$[\lambda]_{0,0,0,0} = E \quad ,$$

$$[\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\sigma}}]_{0,0,0,0} = -\vartheta$$

$$[\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} = \lambda \quad ,$$

$$[\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\sigma}}]_{0,0,0,0} = -\frac{1}{\omega^2} \quad ,$$

$$[\frac{\partial \sigma}{\partial \ddot{\varepsilon}}]_{0,0,0,0} = \Theta \quad ,$$

az ötelemes test egyenletét kapjuk:

$$\sigma = \mathbf{E}\varepsilon + \lambda\dot{\varepsilon} - \vartheta\dot{\sigma} + \Theta\ddot{\varepsilon} - \frac{1}{\omega^2}\ddot{\sigma} \quad , \tag{17}$$

ahol:

E - a Young-féle rugalmassági modulus [Pa] ,

λ - a lineáris viszkozitási, vagy kúszási tényező [Pa s] ,

ϑ - a relaxációs állandó [s] ,

Θ - a fajlagos tehetetlenségi nyomaték [Pa s^2] ,

$\omega = 2\pi\mathbf{f}$ - a körfrekvencia, ill. frekvencia [s^{-1}] .

A jobb oldali első három tag a jól ismert Standard- Soil test anyagegyenlete.
A fenti differenciálegyenlet megoldása a kezdeti feltételek figyelembe vételével szolgáltatja a valós anyag lineárisan viszkoelasztikus tulajdonságainak a közelítését. Mivel az egyszerű húzó igénybevétel mellett fellépő tulajdonságok meghatározására szolgáló mérési eredmények kiértékelése a fenti differenciálegyenlet megoldását igényli a fenti egyenlet átalakításával megkapható explicit integrálegyenlet megoldásával gyorsabban tudunk eredményt elérni.
A kívánt integrálegyenletet legkönnyebben Laplace-transzformáció segítségével tudjuk előállítani:

$$\begin{aligned}\sigma = \Theta\omega^2\varepsilon(t) + \frac{\omega^2(E-\Theta\omega^2)}{(s_1-s_2)}\int_0^t (e^{s_1(t-\tau)} - e^{s_2(t-\tau)})\varepsilon(\tau)d\tau + \\ + \frac{\omega^2(\lambda-\vartheta\Theta\omega^2)}{(s_1-s_2)}\int_0^t (e^{s_1(t-\tau)} - e^{s_2(t-\tau)})\dot{\varepsilon}(\tau)d\tau\end{aligned} \tag{18}$$

ahol :

$\mathbf{s}_{1,2} = -\delta \pm \sqrt{\delta^2 - \omega^2}$,

$\delta = \frac{\vartheta\omega^2}{2}$ - a csillapítási tényező

IRODALOMJEGYZÉK

[1] Fényes Imre: Modern fizikai kisenciklopédia, Gondolat Könyvkiadó, Budapest, 1971

[2] Asszonyi Csaba: A bányászat mechanikai rendszere. 2. kötet. Kőzetkontinuumok mechanikája. Veszprémi Akadémiai Bizottság, Veszprém, 1981

[3] Bodor Géza- Vas László M.: Polimer anyagszerkezettan, Műegyetemi Kiadó, 2001

[4] Halász László-Zrínyi Miklós: Bevezetés a polimerfizikába, Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1989

[5] Pukánszky Béla : Műanyagok. Műegyetemi kiadó, Budapest, 2003

[6] Baranyi P.- Dr. Fehér J.- Dr. Geleji F.- Dr. Kóczy L.- Vas L.: Nemfémes szerkezeti anyagok, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 1993
[7] Gyarmati István: Nemegyensúlyi termodinamika. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1967

MATERIAL EQUATION OF SOLID PLASTIC CONTINUUMS

Idealized reological material models (ideal spring, ideal viscous element, etc.) are used for the mathematical description of mechanical behaviour of solid polymers. Material equations for the description of material properties (creeping, relaxation) can be made from these models with optional linkings. In this study we demonstrate a procedure for writing down of different material equations from Onsager's law of conduction using tools of irreversible thermodynamics. This principle is illustrated by demonstration of material equation of a body from five elements. Under this procedure material parameters (flexibility modulus, creeping factor, relaxation constant, etc.) are explained in thermodynamic route by traditional measures.