

**Шахова Екатерина Анатольевна**

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ  
ТЕРМОВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Специальность 05.19.01 – Материаловедение производств текстильной и  
легкой промышленности

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном военном образовательном учреждении высшего образования «Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского» Министерства обороны Российской Федерации

Научный руководитель: **Рымкевич Павел Павлович**,  
доктор технических наук, доцент,  
ФГБВОУ ВО «Военно-космическая академия  
имени А.Ф. Можайского» Министерства обороны РФ,  
профессор кафедры физики

Официальные оппоненты: **Коновалов Александр Сергеевич**,  
доктор технических наук, профессор,  
ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный  
университет аэрокосмического приборостроения»,  
профессор кафедры метрологического обеспечения  
инновационных технологий и промышленной  
безопасности

**Федоровский Георгий Дмитриевич**,  
кандидат физико-математических наук,  
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный  
университет», старший научный сотрудник кафедры  
теории упругости математико-механического факультета

**Ведущая организация:** ФГБУН Институт проблем машиноведения РАН,  
г. Санкт-Петербург

Защита диссертации состоится 14 июня 2022 г. в 12:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.236.01 при ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна» по адресу: 191186, Санкт-Петербург, ул. Большая Морская, д. 18, ауд. 437.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна» по адресу: 190068, Санкт-Петербург, Вознесенский пр., д.46, <http://www.sutd.ru/>

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д 212.236.01  
кандидат технических наук, доцент

Вагнер Виктория Игоревна

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** В современном мире полимерные материалы используются практически во всех областях производства, в том числе в текстильной и легкой промышленности (ТЛП).

Производство синтетических полимеров, а также волокон и нитей имеет важное значение для выпуска текстильных материалов, технических изделий, строительства, машиностроения, в самолето-, судо-, автомобилестроении и во многих других отраслях промышленности.

В условиях повышенной конкуренции на рынке материалов ТЛП качество продукции является главным фактором ее конкурентоспособности.

С целью улучшения эксплуатационных свойств и функциональных характеристик полимерных текстильных материалов требуется модернизация известных математических моделей, предназначенных для описания поведения указанных материалов.

Таким образом, актуальность темы диссертационной работы обоснована.

**Степень научной разработанности проблемы.** Значительный вклад в формирование представлений о релаксационных процессах в полимерных материалах внесли А.А. Аскадский, Г.М. Бартенев, В.А. Каргин, Дж. Ферри и др.

К настоящему времени известно достаточно много разных методов, позволяющих использовать математические модели с целью описания термовязкоупругого поведения материалов ТЛП. Общие принципы прогнозирования свойств полимерных материалов рассмотрены в работах А.А. Ильюшина, В.А. Пальмова, А.М. Сталевича, А.Г. Макарова, А.В. Демидова и др. Однако, они имеют некоторые недостатки, которые обусловлены трудностью математического представления и физической трактовки деформационных свойств изучаемых материалов. В результате чего появляются затруднения при прогнозировании деформационных процессов.

Анализ изученных работ дает возможность говорить о том, что разработана значительная теоретическая база и накоплен огромный опыт по решению задач, связанных с описанием деформационных свойств, однако, отмеченные недостатки и ограничения используемых методов не позволяют к настоящему моменту широко применять их в практике материаловедения полимерных текстильных материалов.

**Цель работы** заключается в разработке и усовершенствовании методов моделирования и прогнозирования термовязкоупругих свойств материалов ТЛП.

Для реализации цели были решены следующие задачи:

- разработаны методики для прогнозирования термовязкоупругих свойств полимерных текстильных материалов;
- разработаны методы компьютерного прогнозирования термовязкоупругого поведения материалов ТЛП;
- доказано существование и исследована равновесная диаграмма растяжения;
- построена термодинамика полимерных текстильных материалов;
- исследовано и построено термическое уравнение состояния материалов ТЛП, позволяющее использовать термодинамические методы для анализа состояния текстильных изделий;
- проанализированы и исследованы термовязкоупругие процессы, возникающие в процессе производства полимерных текстильных материалов.

**Методы исследования.**

В основе разрабатываемых методов математического описания при помощи моделирования, а также компьютерного прогнозирования термовязкоупругих свойств текстильных материалов лежат следующие подходы:

- математическое моделирование релаксационных процессов для полимерных текстильных материалов, учитывающее влияние конформационно-энергетических

структурных межмолекулярных переходов сегментов макромолекул на деформационные и релаксационные процессы;

- основные термодинамические методы;
- статистический анализ.

**Соответствие диссертационной работы Паспорту научной специальности.**

Диссертационная работа выполнена в рамках Паспорта научной специальности 05.19.01 – Материаловедение производств текстильной и легкой промышленности ВАК Министерства науки и высшего образования РФ и соответствует следующим его пунктам:

1. Строение, свойства и показатели качества натуральных и химических волокон, нитей и полупродуктов прядения, ткачества и отделки.

3. Строение, свойства и показатели качества сырья, полупродуктов и готовых швейных изделий.

8. Методы проектирования и прогнозирования свойств и показателей качества материалов и изделий текстильной и легкой промышленности.

**Научная новизна работы:**

- предложена новая физическая интерпретация метода нормированного арктангенса логарифма приведенного времени (НАЛ), основанная на методе энергетических барьеров;
- доказано, что процессы ползучести и релаксации механического напряжения возможно рассматривать как единый релаксационный процесс высокоэластичной части деформации;
- получено обобщенное уравнение для релаксационной части высокоэластичной деформации;
- исследована равновесная диаграмма растяжения;
- исследовано и применено термическое уравнение состояния полимерных текстильных материалов.

**Теоретическая и практическая значимость работы:**

- получены определяющие уравнения, позволяющие описывать термовязкоупругие свойства текстильных материалов в большом интервале температур и механических нагрузок;
- предложена методика, которая позволяет осуществлять прогнозирование деформационных процессов материалов ТЛП;
- модернизированы известные методы, позволяющие моделировать и прогнозировать термовязкоупругие свойства текстильных материалов;
- исследована усадка и изучен изометрический нагрев для ряда материалов ТЛП;
- получены явные выражения для основных термодинамических функций материалов ТЛП.

**Положения, выносимые на защиту:**

- обобщенное уравнение для описания процесса релаксации высокоэластичной части деформации;
- методы расчетного прогнозирования термовязкоупругих процессов полимерных текстильных материалов в различных режимах использования;
- термическое уравнение состояния материалов ТЛП.

**Степень достоверности результатов** обеспечивается надежностью результатов, подтвержденных благодаря всестороннему анализу предыдущих научных работ по теме исследования, а также применением для моделирования термовязкоупругих свойств исследуемых материалов опробованного математического аппарата.

**Апробация результатов работы.** Результаты работы были озвучены на Всероссийской научной конференции молодых ученых «Инновации молодежной науки» (Санкт-Петербург, 2019), на Международной конференции «Прикладная физика, информационные технологии и инжиниринг» (Красноярск, 2019), на Международной научно-технической конференции Smart Energy Systems 2019 (Казань, 2019).

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 16 научных статей, из них 8 - в изданиях, рекомендованных перечнем ВАК РФ, 6 - в изданиях, входящих в Web of Science и Scopus, 2 - в сборниках научных трудов и материалах конференций. Также по теме диссертационного исследования получено 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, выводов, списка использованной литературы (183 наименований) и приложений. Основное содержание работы изложено на 137 страницах без учета приложений, иллюстрировано 34 рисунками.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность развиваемого научного направления, сформулированы цели и задачи диссертационного исследования, научная новизна, положения, выносимые на защиту, теоретическая и практическая значимость, степень достоверности и апробация результатов исследования.

**Первая глава** посвящена обзору литературных источников по теме диссертации. В ней изложены представления о деформационных свойствах полимерных материалов. Описана структура полимерных материалов как молекулярная, так и надмолекулярная. Приведены известные методы исследования физико-механических свойств полимерных текстильных материалов (Ю.Н. Работнов, М.А. Колтунов, А.Р. Ржаницын), методы моделирования и прогнозирования данных свойств. Проведен сравнительный анализ, известных на сегодняшний день, линейных и нелинейных математических моделей вязкоупругого поведения полимерных текстильных материалов.

В главе дано описание современных методов моделирования и прогнозирования термовязкоупругих свойств материалов ТЛП, развитых в работах А.М. Сталевича, А.Г. Макарова, А.В. Демидова, П.П. Рымкевича и др. Рассмотрены их преимущества и недостатки.

**Вторая глава** посвящена разработанным методам моделирования и прогнозирования деформационных и релаксационных процессов материалов ТЛП, а также методике определения вязкоупругих характеристик.

Установлена взаимосвязь между методом НАЛ и методом энергетических барьеров.

На основе симметричного вида ядер релаксации и запаздывания предложено единое интегральное уравнение, описывающее релаксационные процессы в полимерных текстильных материалах.

Особое внимание уделено методу НАЛ, который является простым и удобным в применении. В основе построения математической модели процесса релаксации механического напряжения и процесса ползучести лежит аппроксимация обобщенной кривой модуля релаксации и обобщенной кривой податливости функциями  $\varphi_{\varepsilon t}, \varphi_{\sigma t}$  соответственно.

$$\varphi_{\varepsilon t} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{b_{n\varepsilon}} \ln \frac{t}{\tau_{\varepsilon}} \right) - \quad (1)$$

для процесса релаксации механического напряжения и

$$\varphi_{\sigma t} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{b_{n\sigma}} \ln \frac{t}{\tau_{\sigma}} \right) - \quad (2)$$

для процесса ползучести.

При этом, для математического моделирования применяются формулы

$$E_{\varepsilon t} = E_0 - (E_0 - E_{\infty}) \varphi_{\varepsilon t} - \quad (3)$$

для процесса релаксации механического напряжения и

$$D_{\sigma t} = D_0 + (D_{\infty} - D_0) \varphi_{\sigma t} - \quad (4)$$

для процесса ползучести.

Здесь введены следующие обозначения:  $\varepsilon$  - деформация,  $\sigma$  - напряжение,  $t$  - время,  $\frac{1}{b_{n\varepsilon}}$  - параметр интенсивности процесса релаксации механического напряжения,  $\frac{1}{b_{n\sigma}}$  - параметр интенсивности процесса ползучести,  $\tau_\varepsilon$ ,  $\tau_\sigma$  - среднее время соответствующего процесса,  $E_\varepsilon$  - модуль релаксации,  $E_0$  - упругий модуль,  $E_\infty$  - предельный модуль,  $D_{\varepsilon t}$  - податливость,  $D_0$  - начальная податливость,  $D_\infty$  - предельная податливость.

К преимуществам данной модели можно отнести отсутствие значительного количества параметров и возможность физической интерпретации характеристик модели.

Далее в главе описана физико-математическая модель материалов ТЛП, основанная на теории барьеров. Согласно этой теории, поведение материалов ТЛП, находящихся под воздействием механической нагрузки, обусловлено числом переходов через энергетические барьеры. Надмолекулярное строение материалов ТЛП может быть представлено в виде совокупности групп макромолекул, которые называют кластерами, или активными конформационными элементами (АКЭ). При этом любой АКЭ имеет не менее двух устойчивых состояний различных по своей геометрии. Геометрическая иллюстрация данных состояний представлена на рисунке 1.

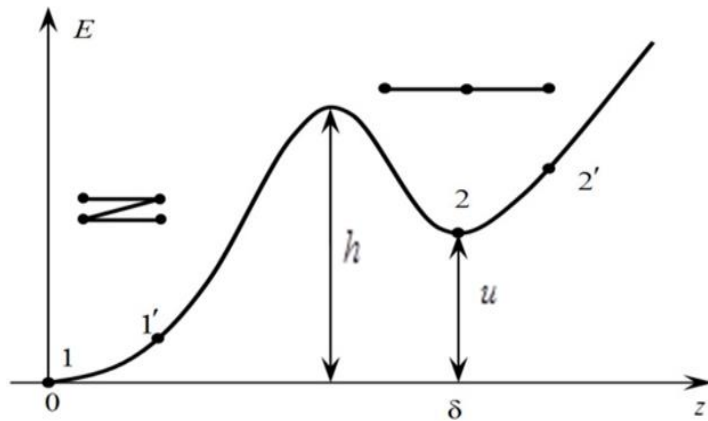


Рисунок 1 - Энергетическая диаграмма АКЭ в зависимости от размера кластера

На рисунке 1  $h$ ,  $u$ ,  $\delta$  характеристики предложенной модели, описывающие высоту барьера, ширину зазора и величину кванта деформации при квантовом переходе.

Термовязкоупругое состояние материалов ТЛП описывается при помощи величины, которая обусловлена переходами через механические барьеры различные по своей высоте.

При переходе из состояния (1) в (2) и наоборот происходит изменение формы материала. Таким образом, можно считать, что процесс деформации квантован.

Если полимерную нить представить в виде объединения последовательно соединенных кластеров, то материал ТЛП подчиняется уравнению (5):

$$\frac{d}{d\tau} [\varepsilon(\tau) - x(\tau)] + [\varepsilon(\tau) - x(\tau)] (e^{\eta^* x^2} + A e^{-\eta^* x^2}) = qsh(\eta^* x^2). \quad (5)$$

Здесь введены следующие обозначения:  $\varepsilon$  - деформация,  $x$  - упругая часть деформации,  $\tau = \frac{t}{\tau_p}$  - безразмерное время,  $\eta$  - коэффициент, который зависит от структуры

(параметр материала),  $\eta^* = \frac{\eta}{T}$  - приведенный коэффициент, зависящий от структуры,

$\tau_p = \frac{1}{v} e^{\frac{h}{kT}}$  - внутреннее время релаксации, определяемое приведенной высотой

энергетического барьера  $h^* = \frac{h}{T}$ ,  $T$  – термодинамическая температура,  $\nu$  – частота подхода к барьеру,  $A = e^{u^*}$ ;  $u^* = \frac{u}{T}$  – приведенная величина энергетического зазора,  $q = \frac{2M_0 A \delta}{1+A} = \frac{2M_0 \delta}{1+e^{-u^*}}$  – константа материала, зависящая от температуры,  $M_0$  – количество кластеров в единице длины образца.

Уравнение (5) и его модернизированные варианты успешно применяют для изучения термовязкоупругих свойств материалов ТЛШ. К недостаткам этого направления можно отнести сложность определения характеристик модели.

Далее в главе показано, что с позиции метода энергетических барьеров выражения (3) и (4) могут быть переписаны в виде:

$$r(t) = \varepsilon - x = (\varepsilon - x_p) \varphi_{\varepsilon t}, \quad (6)$$

$$r(t) = \varepsilon - x = (\varepsilon_p - x) \varphi_{\sigma t}, \quad (7)$$

Здесь введены следующие обозначения:  $\varepsilon$  – деформация,  $x$  – упругая часть деформации,  $r$  – высокоэластичная часть деформации,  $x = \sigma/E_0$ ,  $\sigma_p = E_\infty \varepsilon$ ,  $\varepsilon_p = D_\infty \sigma$ .

Отмечено, что обобщая уравнения (6) и (7), с учетом того, что  $x = x_p = const$  и  $\varepsilon = \varepsilon_p = const$ , можно получить выражение для высокоэластичной компоненты деформации:

$$r(t) = r_p \varphi_{r_p t}, \quad (8)$$

$$r(t) = \int_0^t r_p(t-s) \varphi'_{r_p, s} ds, \quad (9)$$

где  $\varphi_{r_p t} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg \left( \frac{1}{b_n} \ln \frac{t}{\tau_p} \right)$ ,  $\tau_p$  – внутреннее время релаксации,

$r_p$  – значение высокоэластичной части деформации в состоянии равновесия.

Таким образом, согласно барьерной теории и уравнению (9) можно рассматривать процесс высокоэластичной деформации как один из видов релаксационного процесса.

Геометрическая иллюстрация данного факта представлена на рисунке 2.

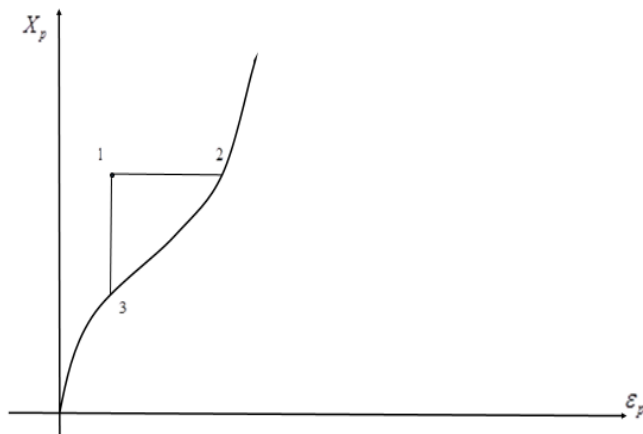


Рисунок 2 – Равновесная диаграмма растяжения

Данное движение обусловлено стремлением макромолекул занять устойчивое положение.

Пусть система находится в состоянии (1). В таком случае она имеет некоторое безразмерное напряжение и деформацию. Так как система находится в неравновесном состоянии, то она стремится перейти в состояние равновесия. Понятно, что при этом движение на диаграмме зависит от граничных условий, которые мы накладываем. Если рассматривать процесс ползучести, то движение будет происходить из положения (1) в положение (2), в случае релаксации механического напряжения из положения (1) в положение (3).

Использование равновесных диаграмм растяжения позволяет более точно прогнозировать термовязкоупругое поведение материалов ТЛП в различных режимах деформирования.

Таким образом, выражения (6) и (7) представляют единый релаксационный процесс.

На рисунке 3 построена зависимость высокоэластичной части деформации от безразмерной нагрузки  $x = \frac{\sigma}{E_0}$ .

Анализируя график, изображенный на рисунке 3, можно сделать вывод, что с увеличением нагрузки количество переходов групп АКЭ растет.

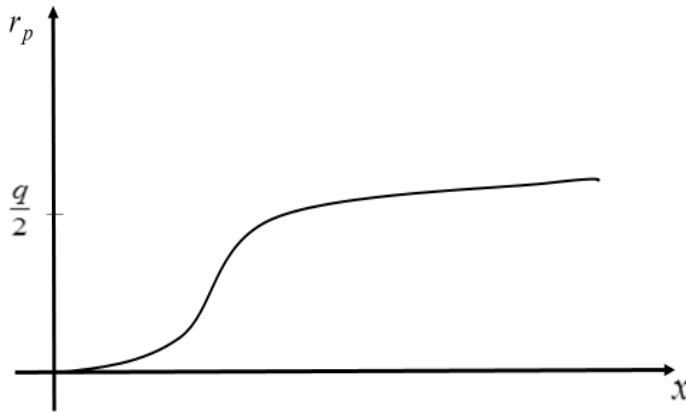


Рисунок 3 – Зависимость высокоэластичной части деформации от безразмерной нагрузки

Та часть кривой изображением которой является практически горизонтальная прямая соответствует насыщению. Это свидетельствует о том, что большинство релаксирующих элементов теперь находятся в новом устойчивом состоянии, а их небольшой рост возникает в результате переходов через более высокие механические барьеры. Для тех АКЭ, которые занимали менее устойчивое состояние начинает происходить истощение.

Полученное выражение (9) можно использовать для моделирования и прогнозирования термовязкоупругого поведения материалов ТЛП в различных режимах их использования. Для решения поставленной задачи были разработаны программы для ЭВМ.

**В третьей главе** получены и проанализированы решения определяющего уравнения (5) полимерного текстильного материала для различных режимов деформирования. Установлено как будет меняться вид диаграммы растяжения в зависимости от скорости деформирования.

Для режима ползучести при  $x = const$  анализ определяющего уравнения (5) приводит к выражению вида:

$$\varepsilon(\tau) = \varepsilon_0 + (\varepsilon_\infty - \varepsilon_0)(1 - e^{-c_1\tau}), \quad (10)$$

$$\text{где } \varepsilon_0 = \varepsilon(\tau = 0), \quad \varepsilon_\infty = x + \frac{q(x)}{p(x)}, \quad c_1(x) = e^{\eta^*x^2} + Ae^{-\eta^*x^2}.$$

Исследована зависимость показателя экспоненты от нагрузки для процесса ползучести.

Для режима релаксации механического напряжения ( $\varepsilon = const$ ) рассмотрены два предельных случая. Проанализированы полученные решения. Исследована зависимость показателя экспоненты от уровня деформации и от уровня установившегося напряжения.

$$x = \varepsilon - \frac{q(\varepsilon)(1 - e^{-A_1\tau})}{p(\varepsilon) + q'(\varepsilon)} \text{ при } t \rightarrow 0, \quad (11)$$

$$\text{где } A_1 = e^{\eta^*\varepsilon^2} \left( q_0\eta^*\varepsilon^2 + 1 + (q_0\eta^*\varepsilon^2 + A)e^{-2\eta^*\varepsilon^2} \right).$$

$$x = x_p + c_5e^{-A_2\tau} \text{ при } t \rightarrow \infty, \quad (12)$$

$$\text{где } A_2 = e^{\eta^*x_p^2} + Ae^{-\eta^*x_p^2} + \frac{2\eta^*x_pq_0(A+1)e^{\eta^*x_p^2}}{e^{\eta^*x_p^2} + Ae^{-\eta^*x_p^2}}$$



В главе 3 была исследована зависимость вида диаграммы растяжения от скорости деформирования. Так как реальные диаграммы растяжения всегда осуществляются с конечной скоростью деформирования, то наиболее интересен был вопрос о том, как меняется диаграмма растяжения в зависимости от скорости деформирования.

Анализ определяющего уравнения (5) для случая  $\dot{\varepsilon} = const$  (постоянная скорость деформирования) приводит к выражению вида:

$$\begin{aligned}
 x(\varepsilon) = & \frac{\dot{\varepsilon}}{q_0\eta} \frac{(1+A)\dot{\varepsilon} + (2\dot{\varepsilon}q_0\eta - \frac{(1+A)^2\dot{\varepsilon}}{2})\varepsilon + ((q_0\eta - \frac{(1+A)^2}{4})(1+A) + 2q_0\eta(1+A))\frac{\varepsilon^2}{2}}{2(\dot{\varepsilon})^2 + (1+A)\dot{\varepsilon}\varepsilon + \frac{(2\dot{\varepsilon}q_0\eta - \frac{(1+A)^2\dot{\varepsilon}}{2})}{2}\varepsilon^2 + (2\dot{\varepsilon}q_0\eta(1+A) + 2q_0\eta(1+A))\frac{\varepsilon^3}{6}} + \\
 & + \frac{\frac{(q_0\eta - \frac{(1+A)^2}{4})}{6}((q_0\eta - \frac{(1+A)^2}{4}) + 1+A)\varepsilon^3}{(\dot{\varepsilon})^2 + \frac{(1+A)\dot{\varepsilon}}{2}\varepsilon\varepsilon + \frac{(q_0\eta - \frac{(1+A)^2}{4})\dot{\varepsilon}}{2}\varepsilon^2 + (q_0\eta(1+A)\dot{\varepsilon} + q_0\eta(1+A))\frac{\varepsilon^3}{6}}.
 \end{aligned} \tag{13}$$

Выражение (13) представляет явный вид диаграммы растяжения без учета температурного фактора в процессе растяжения.

**Четвертая глава** посвящена сравнительному анализу деформационно–временных и сило-временных функций.

На примере образцов ПКА пленочных нитей разной степени вытяжки и нити лавсан 114 текс  $T=40^0C$  по экспериментальным данным, опубликованным в открытых источниках, проведен сравнительный анализ указанных функций, а также исследована взаимосвязь между процессом ползучести и процессом релаксации механического напряжения.

На рисунке 4 представлены геометрические образы рассматриваемых функций для образца ПКА пленочных нитей степени вытяжки  $\lambda = 2, 4$

При  $\lambda = 2, 4$

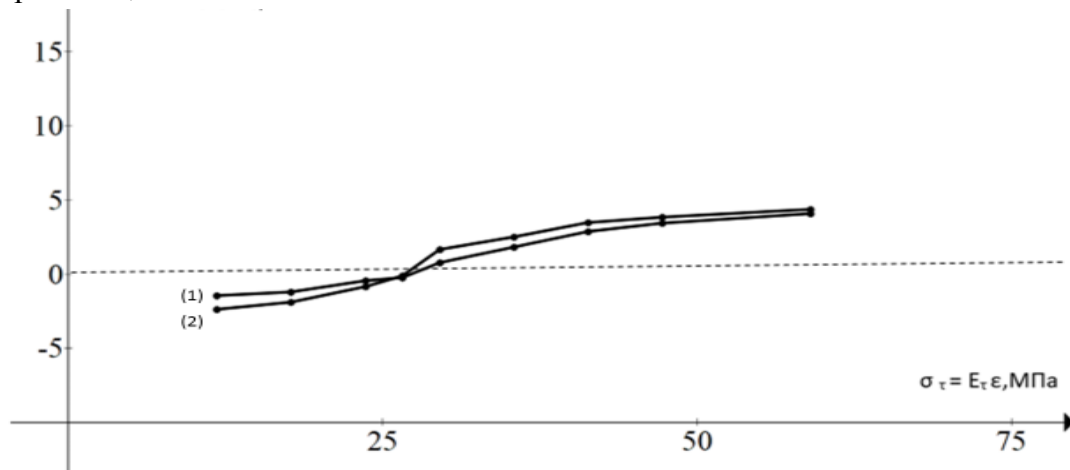


Рисунок 4 - Деформационно-временная функция (1) и сило-временная функция (2) для образца ПКА пленочных нитей степени вытяжки  $\lambda = 2, 4$

Таким образом, сравнительный анализ рассматриваемых функций показал, что их значения достаточно близки, что позволяет сделать вывод о том, что, зная деформацию мы можем спрогнозировать нагрузку и наоборот. По сути, вместо двух процессов можно рассматривать один.

Также в главе 4 предложена методика прогнозирования термовязкоупругих свойств материалов ТЛП на основе кривых ползучести.

**Пятая глава** посвящена исследованию термовязкоупругих свойств материалов ТЛП.

В главе 5 получено определяющее уравнение, позволяющее учитывать влияние температуры.

Следует отметить, что уравнение (5) позволяет описывать деформационно – релаксационные процессы в материалах ТЛП только при фиксированном значении температуры. Но наибольший практический интерес представляет более общая задача, которая состоит в уточнении данного уравнения для внешних условий, определяемых переменной температурой.

Для случая меняющейся в процессе деформирования температуры получено новое определяющее уравнение.

В простейшем случае, с учетом одного энергетического барьера, данное уравнение имеет вид:

$$\frac{d\varepsilon_{\varepsilon_3}}{d\tau} + \varepsilon_{\varepsilon_3} p(x) = \frac{q}{2} \left( A_0 e^{\eta^* x^2} - A e^{-\eta^* x^2} \right), \quad (14)$$

Здесь и далее введены следующие обозначения:  $\varepsilon_{\varepsilon_3}$  - величина высокоэластичной компоненты деформации,  $x$  - величина упругой компоненты деформации,  $\tau = \frac{t}{\tau_p}$  - безразмерное время,  $\tau_p = \frac{1}{\nu} e^{\frac{h}{T}}$  - внутреннее время релаксации, зависящее от  $h^* = \frac{h}{T}$ ,  $h^* = \frac{h}{T}$  - приведенная высота барьера,  $\nu$  - частота подхода к барьеру,  $\eta$  - коэффициент, который зависит от структуры (параметр материала),  $\eta^* = \frac{\eta}{T}$  - приведенный структурно-чувствительный коэффициент,  $T_0$  - начальная температура,  $T$  - текущая абсолютная температура,  $\delta$  - величина кванта деформации соответствующая переходу кластеров через барьер,  $u$  - величина, характеризующая ширину зазора,  $u_0^* = \frac{u}{T_0}$  - приведенная величина зазора при начальной температуре,  $u^* = \frac{u}{T}$  - приведенная величина зазора при текущей температуре,  $A_0 = e^{u_0^*}$ ,  $A = e^{u^*}$ ,  $q = \frac{2M_0\delta}{1 + e^{-u_0^*}}$  - константа материала, зависящая от температуры,  $M_0$  - число кластеров приходящихся на единицу длины образца.

С учетом того, что в материале чаще всего не один, а несколько барьеров с разной высотой, то согласно барьерной теории в материалах ТЛП может быть несколько энергетических уровней и энергетических зазоров между ними. Поэтому в общем случае высокоэластичная часть деформации может быть представлена как сумма:

$$\varepsilon_{\varepsilon_3} = \varepsilon_{\varepsilon_31} + \varepsilon_{\varepsilon_32} + \dots + \varepsilon_{\varepsilon_3N}. \quad (15)$$

Тогда в случае произвольного числа барьеров с учетом формулы (15) определяющее уравнение можно обобщить на случай нескольких барьеров:

$$\begin{cases} \frac{d\varepsilon_{\varepsilon_3N}}{d\tau_n} + \varepsilon_{\varepsilon_3N} p_N(x) = \frac{q_N}{2} \left( A_0 e^{\eta_N^* x^2} - A e^{-\eta_N^* x^2} \right) \\ \varepsilon_{\varepsilon_3} = (\varepsilon - x) = \sum_N \varepsilon_{\varepsilon_3N} \end{cases}. \quad (16)$$

В системе (16) мы имеем n-уравнений для каждого барьера и последнее замыкающее уравнение.

Система выражений (16) называется преобразованным определяющим уравнением полимерного текстильного материала.

Далее в работе рассмотрена термодинамика полимерных текстильных материалов. Получено термическое уравнение состояния для одного и нескольких энергетических барьеров.

Для случая одного энергетического барьера термическое уравнение состояния имеет вид:

$$(\varepsilon - \alpha T - x) p(x) = \frac{q}{2} (A_0 e^{\eta^* x^2} - A e^{-\eta^* x^2}), \quad (17)$$

где  $\alpha$  - линейный коэффициент теплового расширения в термодинамике упругих стержней.

В выражении (17) учтены текущая температура и коэффициент линейного расширения упругого стержня. Уравнение (17) называется однобарьерным уравнением состояния материала ТЛП.

Для случая произвольного числа барьеров общее уравнение состояния полимерных текстильных материалов имеет вид:

$$\varepsilon - \alpha T - x = \frac{1}{2} \sum_N \frac{q_N}{p_N(x)} (A_{0N} e^{\eta_N^* x^2} - A_N e^{-\eta_N^* x^2}). \quad (18)$$

Также в главе 5 были получены явные выражения для описания основных термодинамических функций материалов ТЛП.

Линейная плотность внутренней энергии материала представлена, как сумма энергий упругого стержня и групп макромолекул, находящихся в различных энергетических состояниях.

$$U = U_0 + m_0 E_1 + \frac{u m_0}{1 + e^{\beta u}} + \frac{E_0 s_0}{2} x^2, \quad (19)$$

где  $U_0$  - линейная плотность внутренней энергии при начальных условиях,  $m_0$  - полное число АКЭ данного типа,  $E_1$  - энергия АКЭ в свернутом состоянии,  $\beta = \frac{1}{T}$  - обратная температура,  $s_0$  - площадь на единицу длины образца,  $E_0$  - модуль упругости,  $\frac{E_0 s_0}{2} x^2$  - линейная плотность энергии на единицу длины материала.

В случае нескольких барьеров внутреннюю энергию можно представить в виде:

$$U = U_0 + \sum_k \frac{u_k m_{0k}}{1 + e^{u_k \beta}} + \frac{E_0 s_0}{2} x^2. \quad (20)$$

С позиции термодинамики энтальпию материала можно записать следующим образом:

$$H(f, \beta) = U(f, \beta) - l f, \quad (21)$$

где  $l$  - длина образца после деформации,  $l_0$  - длина образца в недеформированном состоянии,  $f = E_0 s_0 x$ .

Согласно уравнению (17) выражение (21) примет вид

$$H(f, \beta) = U - E_0 s_0 l_0 x - E_0 s_0 l_0 x \left( x + \frac{q(x)}{p(x)} \right), \quad (22)$$

где  $p(x) = e^{\beta \eta x^2} + A e^{-\beta \eta x^2}$ ,  $q(x) = \frac{q}{2} (A_0 e^{\beta \eta x^2} - A e^{-\beta \eta x^2})$ .

В случае нескольких энергетических барьеров получим:

$$H(f, \beta) = U_0 + \sum_{(k)} \frac{u_k m_{0k}}{1 + e^{\beta u_k}} + \frac{E_0 s_0}{2} x^2 - E_0 s_0 l_0 x \left( 1 + \sum_N \frac{q_N(x)}{p_N(x)} + x \right). \quad (23)$$

Еще одной из важнейших термодинамических функций является энтропия.

$$dS = \frac{dQ}{T} = \frac{CdT}{T}, \quad (24)$$

где  $C$  – теплоемкость.

$$S - S_0 = h\beta - h\beta_0 + \Delta S_{\text{мер}} + m_0 \ln \left( \frac{1 + e^{-\beta u}}{1 + e^{-\beta_0 u}} \right) + \left( \frac{E_0 s_0}{2} x^2 + E_0 s_0 l_0 x + E_0 s_0 l_0 x^2 \right) (\beta_0 - \beta) + \\ + \frac{E_0 s_0 l_0 x q A_0}{2(u - 2\eta x^2)} \ln \left( \frac{1 + e^{-\beta(u - 2\eta x^2)}}{1 + e^{-\beta_0(u - 2\eta x^2)}} \right) + \frac{E_0 s_0 l_0 x q}{2(u - 2\eta x^2)} \ln \left( \frac{1 + e^{\beta(u - 2\eta x^2)}}{1 + e^{\beta_0(u - 2\eta x^2)}} \right). \quad (25)$$

Выражение (25) определяет изменение энтропии полимерного текстильного материала.

В главе также представлен способ применимости термодинамического метода к полимерным текстильным материалам.

Исследована усадка материалов ТЛП. Для многих материалов ТЛП при нагревании происходит усадка. Объяснение данного явления с помощью барьерной теории следующее: если более «вытянутое» состояние имеет меньшую энергию, то при низких температурах более заполнены «развернутые» состояния. При повышении температуры, по статистике Больцмана, наиболее заполненным будет состояние с большей энергией, т.е. квант деформации поглощается, и образец сжимается. Таким образом, усадка происходит за счет внутренних энергетических переходов.

В случае отсутствия внешних нагрузок, уравнение (17) примет вид:

$$(\varepsilon - \alpha(T - T_0))(1 + A) = \frac{q}{2}(A_0 - A). \quad (26)$$

В этом случае деформация усадки имеет вид:

$$\varepsilon_{\text{yc}} = -\varepsilon = -\frac{qu}{4} \left( \frac{T - T_0}{TT_0} \right) - \alpha(T - T_0). \quad (27)$$

Исследуя уравнение (27), можно сказать, что полная усадка происходит в некотором интервале температур  $T_0 < T < \tilde{T}$ . При  $T_0 < T$  она начинается, а при  $T \leq \tilde{T}$  заканчивается.

Температура, при которой происходит максимальная усадка имеет вид:

$$T_{\text{max}} = \sqrt{T_0 \tilde{T}}, \quad (28)$$

где  $-\frac{qu}{4\alpha} = T^2$ .

Определена максимальная усадка

$$\varepsilon_{\text{max yc}} = \frac{\alpha \left( \tilde{T} \sqrt{T_0 \tilde{T}} - T_0 \tilde{T} - T_0 \tilde{T} + T_0 \sqrt{T_0 \tilde{T}} \right)}{\sqrt{T_0 \tilde{T}}} = \alpha \left( \tilde{T} - 2\sqrt{T_0 \tilde{T}} + T_0 \right) = \alpha \left( \sqrt{\tilde{T}} - \sqrt{T_0} \right)^2. \quad (29)$$

В более общем случае  $\varepsilon_{\text{yc}}$  может быть описана следующим образом:

$$\varepsilon_{\text{yc}} = \alpha t - \frac{q}{2} \left[ \frac{e^{\frac{-ut}{(T_0+t)T_0}} - 1}{e^{\frac{-ut}{(T_0+t)T_0}} + e^{\frac{-ut}{(T_0+t)T_0}}} \right]. \quad (30)$$

В главе рассмотрено прогнозирование изометрического нагрева. Показано, что усадка, возникающая при изометрическом нагреве, компенсируется истинно упругим напряжением  $x = \varepsilon_{yc}$ . Результаты полученные при исследовании усадки и изучении изометрического нагрева хорошо согласуются с результатами, полученными в работах других авторов (Шошина В.И., Никонович Г.В., Ташпулатова Ю.Т., Рымкевич О.В. и др.)

При рассмотрении вопроса о том, как влияет температурный фактор на поведение материалов ТЛП было дано объяснение такому явлению как «заторможенность» процессов восстановления.

Объяснение «заторможенности» процесса восстановления для материалов ТЛП может быть дано с использованием диаграммы, представленной на рисунке 5. В процессе нагружения в материале ТЛП возникают конформационные переходы из состояния условно свернутого в состояние условно развернутое, при этом освобождается квант деформации  $\delta$ . Такие переходы с точки зрения барьерной теории позволяют дать объяснение возникающей высокоэластичной части деформации. Затем при разгрузке, в результате снятия механического напряжения, кластеры изучаемого материала ТЛП, которые находятся в вытянутом состоянии (точки 2', 2'', 2''') осуществляют переход на нижний уровень потенциальной ямы, для того чтобы им осуществить переход обратно в начальное состояние 1, потребуется перескочить

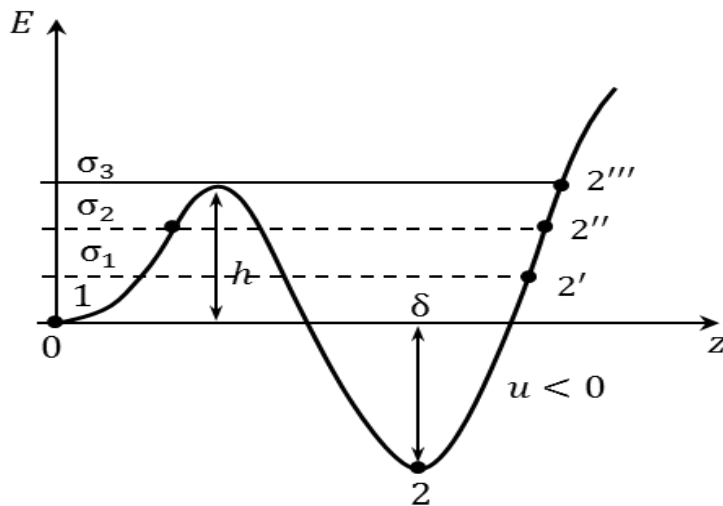


Рисунок 5 - Энергетическая диаграмма активных конформационных элементов в зависимости от размера кластера

через высокий барьер, равный  $h + |u|$ .

Следовательно, начиная с какого-то уровня нагружения, соответствующее механическому напряжению  $\sigma_3$ , когда произойдет полная разгрузка те кластеры, которые находятся в состоянии 2, после перехода окажутся на дне потенциальной ямы. Таким образом, в результате разгрузки (в условиях отсутствия упругой части деформации) у материала будет одинаковая высокоэластичная деформация.

В главе 5 на основании уравнения состояния (17) был получен термодинамический коэффициент для политропного процесса.

$$\frac{dT}{dx} = - \frac{qE_0 s_0 l_0 (u - 2\eta x^2) (1 + A_0) e^{\beta(u - 2\eta x^2)}}{2TC (1 + e^{\beta(u - 2\eta x^2)})^2} \quad (31)$$

Выражение (31) позволяет анализировать диаграммы растяжения в зависимости от скорости деформирования и скорости изменения температуры образца.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. На основе метода энергетических барьеров предложена новая физическая интерпретация метода моделирования и прогнозирования НАЛ.
2. Доказано, что процессы ползучести и релаксации механического напряжения возможно рассматривать как единый релаксационный процесс высокоэластичной части деформации, а также исследовано и получено обобщенное уравнение для релаксационной части высокоэластичной деформации.

3. На основе барьерной теории исследованы термовязкоупругие свойства текстильных материалов, характеризующие их поведение при использовании в разных режимах.
4. Исследован и получен явный вид зависимости диаграмм растяжения с разными скоростями деформации от величины скорости деформирования.
5. Исследована равновесная диаграмма растяжения и построена термодинамика полимерных текстильных материалов.
6. С использованием равновесной диаграммы растяжения уточнен метод НАЛ, который позволяет осуществлять моделирование и прогнозирование термовязкоупругого поведения исследуемых материалов.
7. Исследовано и построено термическое уравнение состояния полимерных текстильных материалов, позволяющее использовать термодинамические методы для анализа состояния текстильных изделий.
8. Методами термодинамики исследована усадка материалов ТЛП, а также изучен изометрический нагрев для ряда текстильных материалов. Получены явные выражения для описания усадки и изометрического нагрева, проведено сравнение с экспериментом.
9. На основании уравнения состояния, используя известные термодинамические тождества, получены явные выражения для основных термодинамических функций полимерных текстильных материалов.
10. Дано объяснение эффекту «заторможенности» процесса восстановления полимерных текстильных материалов, а также одинакового значения высокоэластичной деформации при снятии нагрузки в процессе восстановления у данных материалов.
11. С позиции термодинамики даны описания процессов ползучести, релаксации механического напряжения и активного растяжения, а также пояснения некоторых эффектов, наблюдаемых в ходе данных процессов.
12. На основании модельного уравнения состояния получен термодинамический коэффициент  $\frac{dT}{dx}$  для политропного процесса.

## СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Публикации в изданиях, входящих в «Перечень ВАК...»

1. Шахова, Е.А. Особенности влияния надмолекулярной структуры на механические свойства полимерных текстильных материалов / П.П. Рымкевич, В.В. Головина, Е.А. Шахова [и др.] // Вестник Санкт-Петербургского государственного университета технологии и дизайна. Серия 1: Естественные и технические науки. – 2017. – №2. – С.43-49.
2. Шахова, Е.А. Особенности влияния надмолекулярной структуры на спектр времен релаксации полимерных текстильных материалов / П.П. Рымкевич, В.В. Головина, Е.А. Шахова [и др.] // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2017. – Т.37. – №3. – С.79-85.
3. Шахова, Е.А. Прогнозирование механического поведения полимерных текстильных материалов на основе модели складчатой структуры / П.П. Рымкевич, А.А. Романова, Е.А. Шахова [и др.] // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2017. – Т.38. – №4. – С.42-45.
4. Шахова, Е.А. Исследование характера диаграмм растяжения полимерных текстильных материалов в зависимости от скорости деформирования / В.В. Головина, Д.С. Вавилов, П.П. Рымкевич, Е.А. Шахова // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2018. – Т.41. – №3. – С.13-16.
5. Шахова, Е.А. Описание термовязкоупругого поведения с учётом взаимодействия фибрилл полимерного текстильного материала на основе механики двухкомпонентной среды / Д.С. Вавилов, В.В. Головина, Е.А. Шахова [и др.] // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2019. – Т.43. – №1. – С.24-26.

6. Шахова, Е.А. Физическая модель надмолекулярной структуры аморфной части аморфно-кристаллического материала текстильной и легкой промышленности / Е.А. Шахова, В.В. Головина, А.Г. Макаров [и др.] // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2019. – Т.43. - №1. - С.46-51.

7. Шахова, Е.А. Обобщенное определяющее уравнение наследственной нелинейной вязкоупругости / Е.А. Шахова, В.В. Головина, А.Г. Макаров [и др.] // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2019. – Т.44. - №2. - С.5-8.

8. Шахова, Е.А. Моделирование термомеханических свойств полимерных одномерных структур / А.С. Степашкина, Е.А. Шахова, Е.С. Цобкалло // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2020. – Т.47. - №1. - С.79-82.

#### Публикации в изданиях Web of Science и Scopus

9. Shakhova, E.A. Thermal viscosity of polymeric materials from the standpoint of quantum transfer theory / P.P. Rymkevich, A.A. Romanova, E.A. Shakhova [and others] // APITECH – 2019 Journal of Physics: Conference Series (JPCS)-Q3, 2019.

10. Shakhova, E.A. Averaging using normal distribution and its application in condensed matter mechanics / P.P. Rymkevich, D.S. Vavilov, E.A. Shakhova, A.S. Stepashkina // APITECH – 2019 Journal of Physics: Conference Series (JPCS)-Q3, 2019.

11. Shakhova, E.A. Energy processes with natural quantization / E.A. Shakhova, P.P. Rymkevich, A.S. Gorshkov [and other] // E3S Web of Conferences, volume 124, 2019.

12. Шахова, Е.А. Уравнение состояния полимерных нитей / В.В. Головина, Е.А. Шахова, П.П. Рымкевич // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2020. – Т.20. - №6. – С.877-882.

13. Шахова, Е.А. Прогнозирование механических свойств одномерных полимерных структур / А.С. Степашкина, Е.А. Шахова, О.А. Москалюк [и др.] // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. - 2020.- Т.20. - №6. - С. 883-887.

14. Шахова, Е.А. Влияние температурного фактора на деформационные свойства полимерных нитей и плёнок / В.В. Головина, П.П. Рымкевич, Е.А. Шахова, О.Б. Прищепёнок // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2021. – Т.21. - №2. – С.267-274.

#### Прочие публикации

15. Шахова, Е.А. Прогнозирование термовязкоупругого поведения полимерных текстильных материалов методом энергетических барьеров с использованием методики НАЛ / Е.А. Шахова // Вестник Молодых ученых Санкт-Петербургского государственного университета технологии и дизайна. - 2019.- №1. - С.114-122.

16. Шахова, Е.А. Моделирование термовязкоупругого поведения аморфно-кристаллического материала текстильной и легкой промышленности с помощью физической модели / Е.А. Шахова, В.В. Головина, П.П. Рымкевич // Экспериментальные и теоретические исследования в современной науке: сб. ст. по матер. XXXIV-XXXV междунар. науч.-практ. конф. №4-5(32). – Новосибирск: СибАК, 2019. - С.79-87.

#### Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ

17. Степашкина А.С, Чижкова Е.А., Шахова Е.А. Прогнозирование термомеханических свойств одномерных структур. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020616092 от 09.06.2020.

18. Степашкина А.С., Чупринова О.В., Шахова Е.А., Мишура Т.П. Прогнозирование механических свойств одномерных структур. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020617478 от 08.07.2020.