

**Tesista:** Nahuel Rull

**Título al que aspira:** Doctor en Ciencia de Materiales, UNMdP

**Tema:** “Comportamiento constitutivo de materiales elastoméricos de distinta composición físico-química: simulación por elementos finitos y validación experimental”

**Directora de tesis:** Dra. Patricia Frontini

**Lugar de Trabajo:** Facultad de Ingeniería, UNMdP

**Fecha de Defensa:** 27 de diciembre de 2019

**Jurados:**

Dr. Angel José Marzocca (UBA, Fate SAICI)

Dr. Juan Pablo Torres (Borealis Polyolefine GmbH, Austria)

Dr. Diego Santiado (CDS, UNMdP)

**Resumen**

El diseño ingenieril de componentes estructurales mediante métodos computacionales requiere del conocimiento de modelos constitutivos adecuados y de datos precisos de las propiedades del material. En el caso de materiales que admiten grandes deformaciones, como los elastoméricos, los modelos constitutivos sencillos o convencionales no resultan adecuados debido a la no-linealidad en su respuesta mecánica.

En esta tesis doctoral se presentan ejemplos de determinación del comportamiento constitutivo capaz de capturar el comportamiento de elastómeros de distintas características, con el fin de ser utilizado para simulaciones computacionales por elementos finitos (FEA). La técnica de FEA resulta de mucha utilidad en el caso de diseño estructural de piezas y sub-componentes que impliquen la utilización de modelos constitutivos complejos

En esta tesis se ha investigado el comportamiento mecánico de tres materiales de características físico-químicas distintas: Poliurea (PU), Policaprolactona (PCL) y goma sintética (IR). Tanto la poliurea como la policaprolactona se caracterizan por tener cadenas poliméricas formadas por segmentos duros y segmentos blandos; mientras que la goma sintética presenta cadenas poliméricas de configuración cis-1,4 con cargas duras (sílice). Los elastómeros tienen un comportamiento mecánico altamente no lineal que en casos relativamente sencillos se pueden representar con modelos hiperlásticos. Sin embargo, estos modelos no siempre son capaces de capturar todos los aspectos del comportamiento, especialmente cuando son sometidos a solicitaciones complejas o exigentes. Estudios previos han develado que en estos casos la estructura de los elastómeros puede evolucionar durante la deformación, siendo este el principal motivo por el cual pueden presentar histéresis, ablandamiento por carga cíclica y/o dependencia con la velocidad de deformación. Con este fin, se han llevado a cabo ensayos de tracción y compresión uniaxial, tanto monotónicos como

cíclicos, hasta grandes deformaciones. Además se realizaron ensayos a diferentes velocidades de deformación. Los ensayos fueron realizados utilizando la técnica de correlación digital de imágenes lo que permitió la determinación del campo completo de deformaciones. En base a las características determinadas a través de estos ensayos relativamente simples y tras una búsqueda de los modelos constitutivos presentes en bibliografía, se optó por la implementación de modelos derivados del de Bergström-Boyce para aproximar la respuesta mecánica específica de cada material. Dicho modelo tiene la capacidad de reproducir elementos fundamentales del comportamiento mecánico de elastómeros no ideales: una respuesta inicial elástica, una transición visco-elástica y un posterior endurecimiento a grandes deformaciones debido a la alineación de las cadenas poliméricas con la dirección de la carga. Para poder determinar los parámetros constitutivos del modelo seleccionado para los tres materiales analizados en este trabajo, se utilizó el método de optimización de Nelder-mead para ajustar las curvas de los distintos ensayos mecánicos simultáneamente.

En el caso de las PU se estudió el comportamiento mecánico de tres compuestos con distinto grado de entrecruzamiento. Estas redes elásticas están compuestas de dominios duros y blandos, donde el peso molecular segmentario entre los puntos de entrecruzamiento difiere entre las tres muestras y permite estudiar el efecto de este parámetro en las propiedades mecánicas. Así mismo, se determinó el modelo constitutivo acorde para cada caso observándose una transición en el comportamiento mecánico para la PU con alto grado de entrecruzamiento.

En el caso de la PCL, adicionalmente a la determinación de los parámetros constitutivos, se realizó un ensayo de inflado para validar mediante elementos finitos el modelo constitutivo seleccionado. Este ensayo tiene gran importancia tecnológica para los elastómeros debido a que se genera un estado de tensión biaxial, siendo una de las principales solicitaciones a las que se exponen en servicio.

Finalmente, en la goma IR, y para completar la caracterización de los materiales elastoméricos, se realizaron ensayos de fractura en corte puro. Se obtuvieron valores de resistencia a la fractura tanto con el criterio de integral-J como también de energía de desgarro (tearing). Como consecuencia, se realizaron FEM donde se agregó al modelo constitutivo, anteriormente utilizado para los otros materiales, un criterio de falla basado en distintos criterios a la rotura.

De esta manera se concluye que el modelo constitutivo de Bergström-Boyce y el criterio de falla basado en el estiramiento de las cadenas poliméricas a la rotura fueron útiles para caracterizar constitutivamente el comportamiento de los elastómeros en las condiciones evaluadas, encontrándose muy buena concordancia entre los resultados experimentales y los simulados.

## **Abstract**

The engineering design of structural components through computational methods requires the knowledge of appropriate constitutive models and accurate data on the material properties. In the case of materials that admit large deformations, such as elastomers, simple or conventional constitutive models are not suitable due to their nonlinear mechanical response.

This doctoral thesis presents examples of the determination of the constitutive models capable of capturing the behaviour of elastomers of different characteristics in order to be used for computational simulations by finite element analysis (FEA). The FEA technique is very useful in the case of structural design of parts and sub-components that involve the use of complex constitutive models.

In this thesis, the mechanical behaviour of three materials with different physical and chemical characteristics has been assessed: Polyurea (PU), Polycaprolactone (PCL) and synthetic rubber (IR). Both polyurea and polycaprolactone are characterized by having polymer chains formed by hard segments and soft segments; while synthetic rubber has polymer chains of cis-1,4 configuration with hard fillers (silica). Elastomers have a highly nonlinear mechanical behaviour that in relatively simple cases can be represented with hyperelastic constitutive models. However, these models are not always able to capture all aspects of the mechanical response of elastomers, especially when they are subjected to complex or demanding solicitations. Previous studies have revealed that in these cases the structure of the elastomers may evolve during deformation, this being the main reason why they may present hysteresis, softening due to cyclic loading and/or dependence with the strain rate. For this purpose, tensile and uniaxial compression tests, both monotonic and cyclic, have been carried out on elastomers under large deformations. In addition, tests were performed at different strain rates. The tests were performed using the digital image correlation technique, which allowed the determination of the complete field of deformations. Based on the characteristics determined through these relatively simple tests and after a research of the constitutive models present in literature, we opted for the implementation of models derived from Bergström-Boyce to approximate the specific mechanical response of each material. This model has the ability to reproduce fundamental elements of the mechanical behavior of non-ideal elastomers: an initial elastic response, a visco-elastic transition event and a subsequent hardening for large strains due to the alignment of the polymer chains with the direction of the load. In order to determine the constitutive parameters of the selected model, for the three materials analysed in this work, the Nelder-mead optimization method was used to adjust the curves of the different mechanical tests simultaneously.

In the case of the PU elastomers, the mechanical behaviour of three compounds with different degrees of cross-linking density was studied. These elastic networks are composed of hard and soft domains, where the segmental molecular weight between the cross-linking points differs between the three samples and allows studying the effect of this parameter on mechanical properties. Likewise, the constitutive model accurate to each case was determined, observing a transition in the mechanical behavior for PU with high degree of crosslinking (low segmental molecular weight of the hard domains and soft domains).

In the case of the PCL, in addition to the determination of the constitutive parameters, an inflation test was performed to validate the selected constitutive model using finite element analysis. This test is of great technological importance for elastomers because a biaxial tension state is generated at the tip of the bulge being one of the main solicitations to which they are exposed in service.

Finally, in synthetic rubber, and to complete the characterization of elastomeric materials, fracture tests were performed in pure shear test configuration. Fracture resistance values were obtained both with the criterion of j-integral as well as tearing energy. As a consequence,

FEM analysis was performed adding a failure criterion to the constitutive model, previously used for the other materials. With this purpose the FE model was approached by three different configurations.

In this way, it is concluded that the constitutive model of Bergström-Boyce and the failure criterion based principal chain stretch at failure were useful for constitutively characterizing the behaviour of elastomeric materials under the conditions they were evaluated, resulting in good agreement between experimental and simulated results.