



# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ МОРФОЛОГИИ СТРУКТУРЫ НА ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОМОДИФИЦИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ

Тиунова А.Д., Ташкинов М.А.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет

## Введение

В последние годы активно развиваются экспериментальные и теоретические исследования, посвященные композитам с внедренными наночастицами. Перспективным направлением является модифицирование матриц композиционных материалов нанобъектами, в частности, углеродными нанотрубками. Например, традиционно слабые прочностные свойства при поперечном растяжении и продольном сжатии волоконно-армированных композитных материалов могут быть улучшены путем замены стандартной полимерной матрицы на наномодифицированную. Также известно, что низкая плотность и высокая проводимость нанотрубок могут значительно улучшать проводящие свойства полимера без влияния на другие значимые характеристики.

## Модель

На конечные свойства наномодифицированных композитов могут влиять многие факторы, в том числе тип и собственные свойства нанобъектов, их дисперсия в полимерной матрице, межфазные взаимодействия. Так, установлено, что параметры кластеризации нанотрубок могут оказывать ощутимое влияние на эффективные механические и проводящие свойства наномодифицированной полимерной матрицы.

В данной работе предложена многомасштабная модель, согласно которой на первом этапе на микроуровне (от 0.1 до 1 мкм) исследуются представительные объемы, содержащие отдельные включения или их комбинации с различными геометрическими параметрами, для которых производится расчет эффективных свойств. На втором этапе создается модель неоднородной среды на макроуровне (характерный размер – около 1 мм), в которой матрице и неоднородностями присваиваются свойства, полученные на предыдущем этапе. Таким образом, на микроуровне производится учет морфологических особенностей, связанных с формой, распределением и размерами наночастиц, а на макроуровне исследуются параметры кластеризации, а также неоднородность свойств наномодифицированной матрицы. На каждом этапе эффективные свойства могут быть определены как при помощи прямого моделирования методом конечных элементов, так и с использованием общеизвестных аналитических теорий гомогенизации, таких как метод среднего поля. Предложенный многоуровневый подход может быть использован при изучении как механического, так и физического поведения наномодифицированных композитов

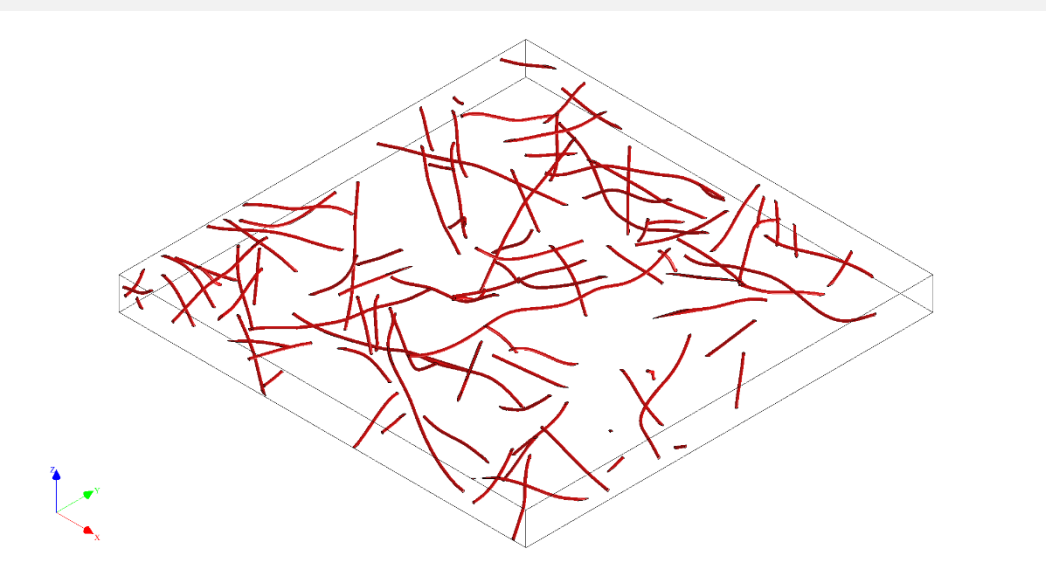


Рисунок 1. Представительный объем матрицы с нанотрубками на микроуровне

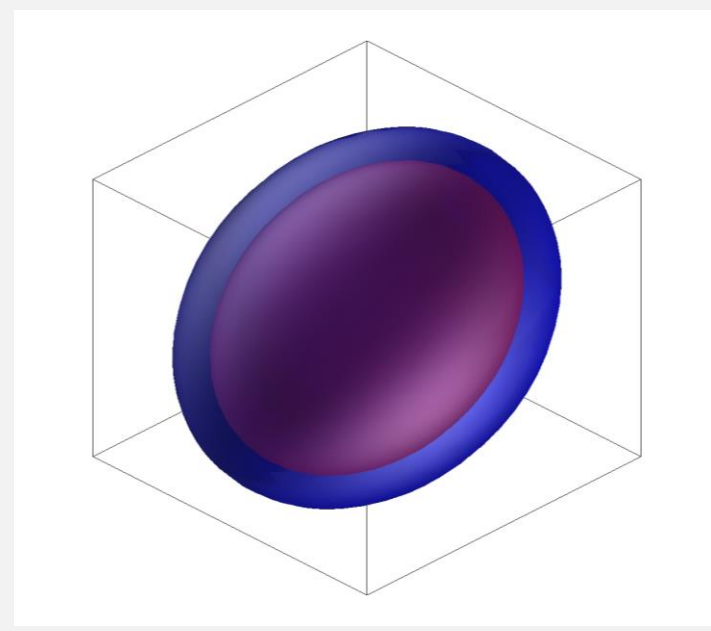


Рисунок 2. Кластер с эффективными свойствами и переходной фазой

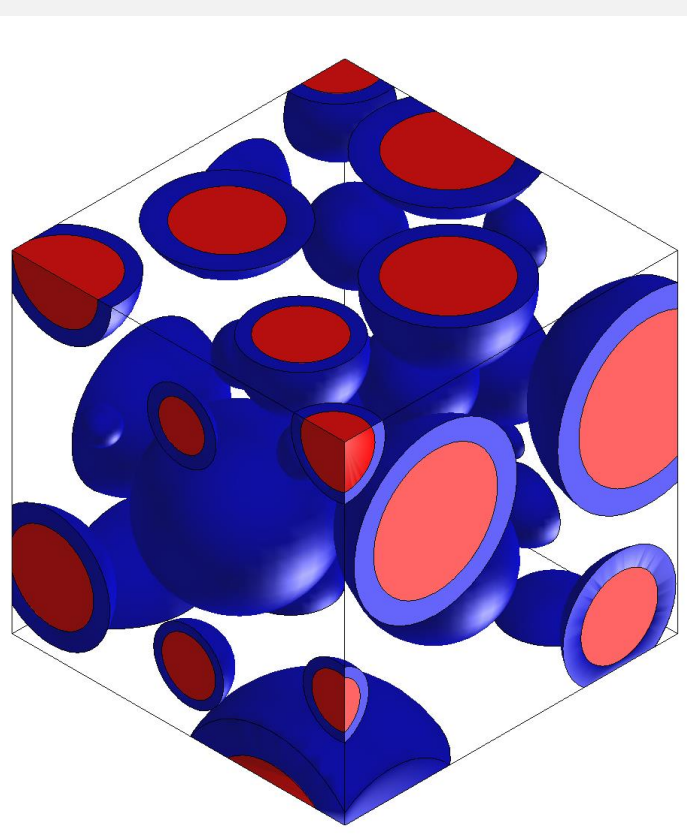


Рисунок 3. Модельная конфигурация кластеров наночастиц с переходной фазой в полимерной матрице

Таблица 1. Свойства, использованные в расчетах

	Однослойные нанотрубки	Полимерная матрица
Модуль упругости, ГПа	1	0.0029
Коэффициент Пуассона	0.16	0.35
Теплопроводность, $Wm^{-1}K^{-1}$	6000	0.8

## Выводы

Получены результаты вычислительных экспериментов по исследованию поведения наномодифицированной матрицы при различных условиях нагружения. При помощи предложенных иерархических подходов получены зависимости эффективных механических и физических свойств полимерной матрицы от параметров углеродных нанотрубок, выступающих в роли наполнителя.

При помощи предложенных иерархических подходов изучены механические, а также физические свойства наномодифицированных композитов с учетом агломераций включений. Считается, что нанотрубки распределены в матрице однородно, за исключением областей агломерации (кластеризации), внутри которых наблюдается повышенная концентрация нанотрубок. Такие зоны на макроуровне моделировались в виде отдельных включений сферической или эллипсоидальной формы, с отличными от матрицы эффективными свойствами. Исследовано влияние переходной фазы, окружающей кластер нанотрубок. Установлено, что параметры кластеризации нанотрубок могут оказывать ощутимое влияние на эффективные механические и проводящие свойства наномодифицированной полимерной матрицы. Уменьшение объемной доли равномерно распределенных нанотрубок в матрице с одновременным повышением степени кластеризации наночастиц приводит к снижению модуля упругости.

## Результаты

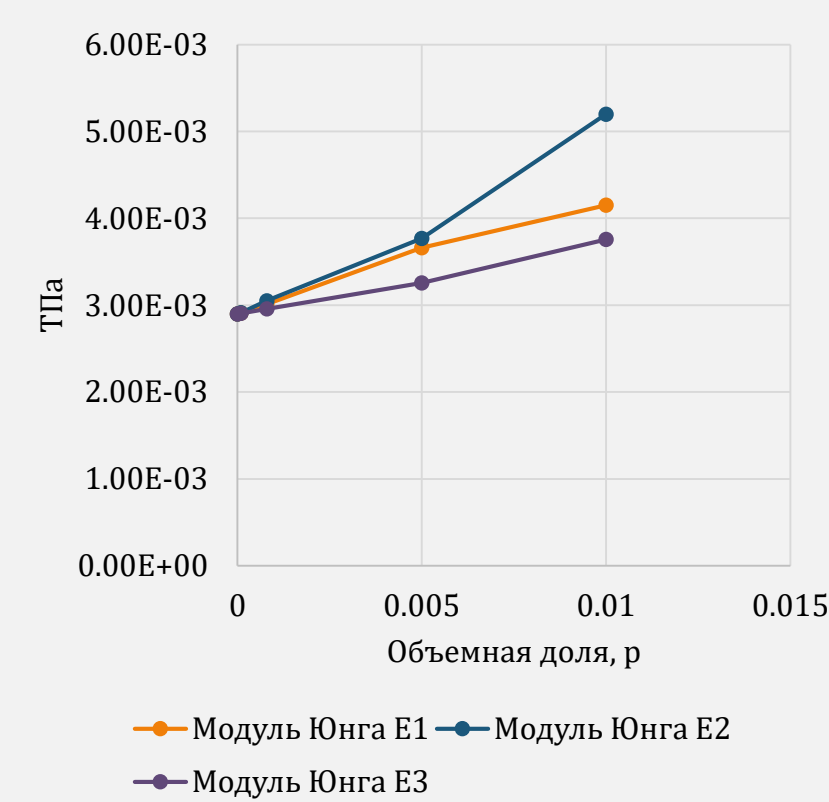


Рисунок 4. Зависимость механических характеристик от объемной доли нанотрубок (кривизна нанотрубок 5)

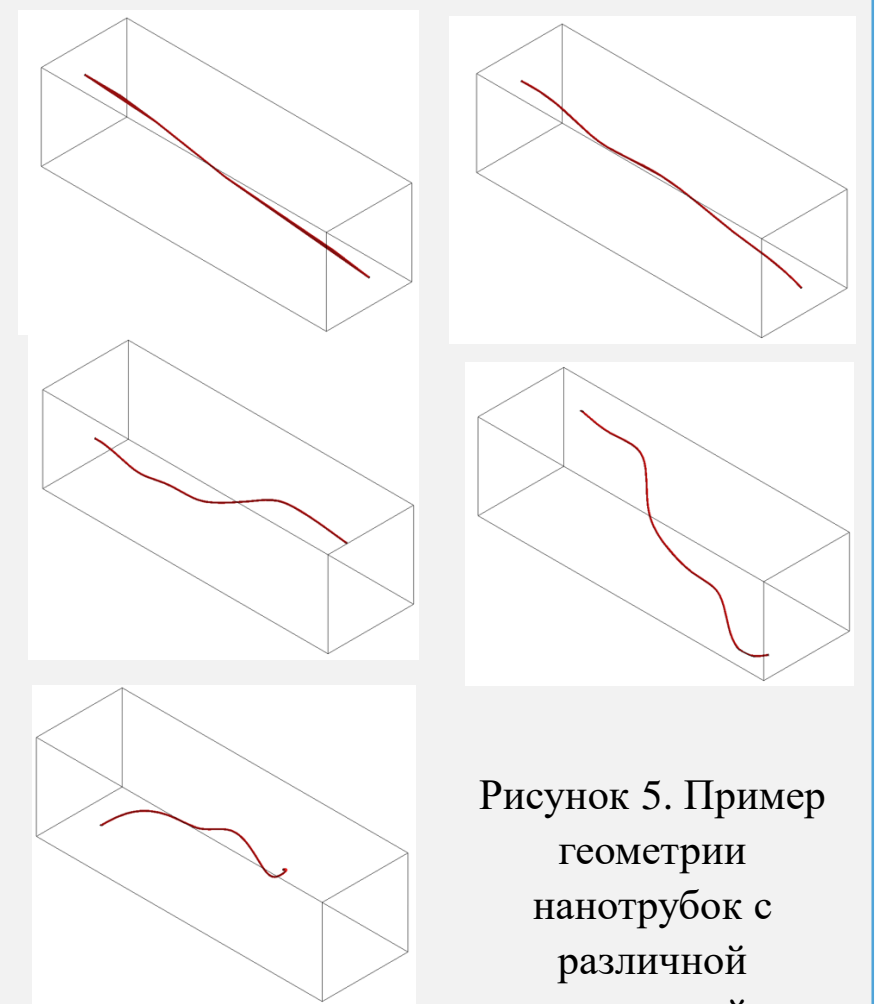


Рисунок 5. Пример геометрии нанотрубок с различной кривизной

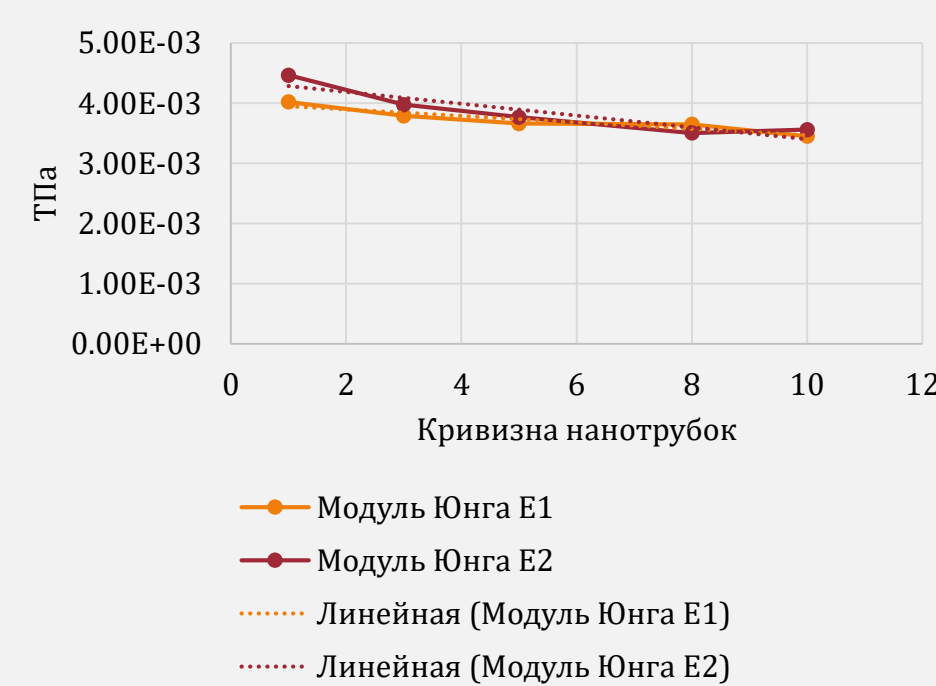


Рисунок 6. Зависимость механических характеристик от кривизны нанотрубок (объемная доля 0.005)

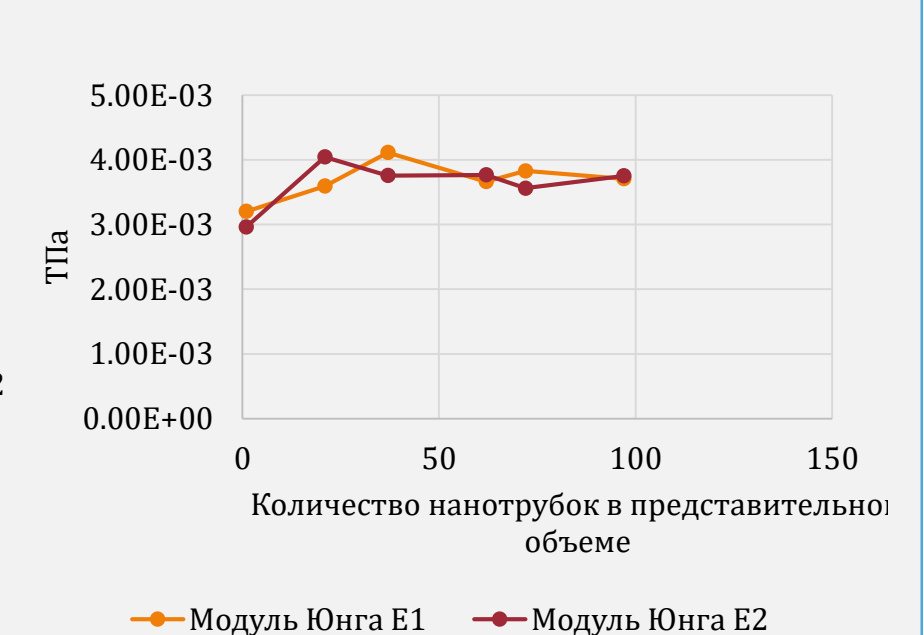


Рисунок 7. Зависимость механических характеристик от размера представительного объема (кривизна 5, объемная доля 0.005)

Таблица 2. Различия эффективных механических свойств полимерной матрицы при различной ориентации нанотрубок

Ориентация нанотрубок	Модуль Юнга E1, ТПа	Модуль Юнга E2, ТПа
Ориентация в направлении оси 1	5.54E-03	3.22E-03
Произвольная ориентация в плоскости 1-2	3.79E-03	3.97E-03
Произвольная ориентация в трехмерном пространстве	3.61E-03	3.70E-03

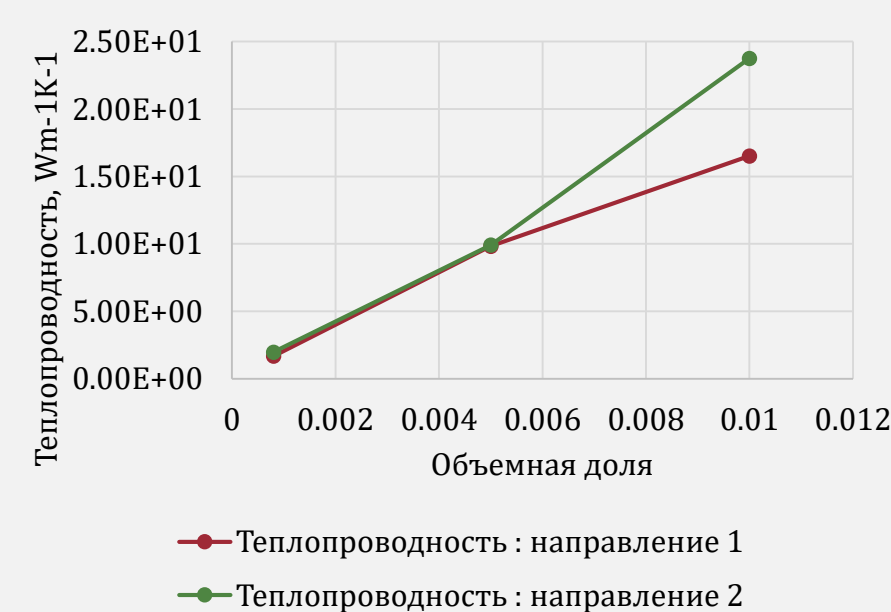


Рисунок 8. Зависимость теплопроводности от объемной доли (кривизна 5, объемная доля 0.0005-0.005)

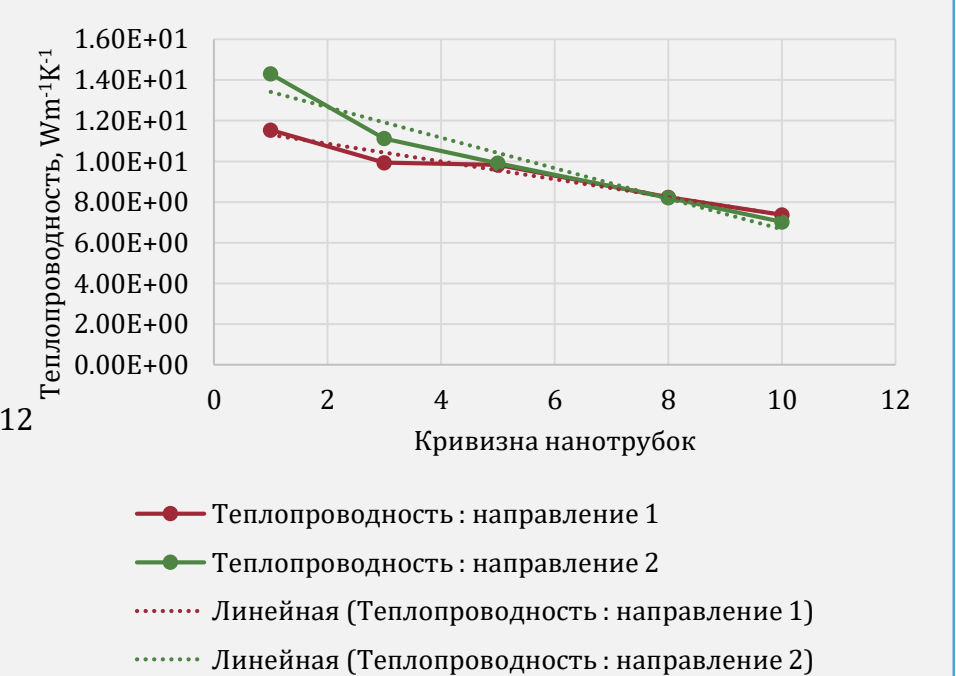


Рисунок 9. Зависимость теплопроводности от кривизны нанотрубок (объемная доля 0.005)