

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ НАПОЛНЕННЫХ НЕРАВНООСНЫМИ НЕОРГАНИЧЕСКИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Громов С.В.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, e-mail: gromov@asu.misis.ru

В работе приведены результаты численного моделирования деформирования и разрушения наполненных неравноосными неорганическими включениями (короткие волокна, многостенные углеродные нанотрубки, трубки, пластинчатые включения) композиционных материалов. Использование высокопрочных и высокомодульных волокон позволяет создавать композиционные материалы, обладающие малой массой, управлять физико-механическими, электрическими, теплофизическими свойствами, регулировать анизотропию этих характеристик, обеспечивая достижение максимальных характеристик в выбранном направлении. Указанные возможности позволяют применять такие материалы для создания конструкций с высокой весовой эффективностью для различных областей применения. Назначение материала, требования, регламентирующие условия его работы в изделиях, определяют выбор схемы армирования, материала матрицы и армирующего наполнителя. Необходимость обеспечить высокую пластическую деформацию композиционного материала делает целесообразным применение в качестве материала матрицы термопластичных полимеров, способных переходить в высокоэластичное состояние и не претерпевающих химических превращений в процессе нагрева и охлаждения.

Ключевые слова: многоуровневое моделирование, полимерные композиционные материалы, сверхвысокомолекулярный полиэтилен, нанотрубки, углеродное волокно, композиционный материал, структура, адгезия, прочностные характеристики, асимметричные включения, армирование.

NUMERICAL SIMULATION OF DEFORMATION AND FRACTURE FILLED NONEQUIAXIAL INCLUSIONS INORGANIC COMPOSITE MATERIALS

Gromov S.V.

National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, 119049, Russia

The paper presents the results of a numerical simulation of deformation and fracture filled nonequiauxial inorganic inclusions (short grain, multi-walled carbon nanotubes tube, plate inclusion) composite materials. The use of high-strength and high-modulus fibers allows you to create composite materials that have low mass, to manage physical, mechanical, electrical, thermal properties, adjust the anisotropy of these characteristics, providing maximum performance in a selected direction. These features allow you to use these materials to create a design with high performance weight for various applications. Appointment of material requirements governing the conditions of his work in the products, determine the choice of reinforcement scheme, the matrix material and a reinforcing filler. The need to provide a high plastic deformation of the composite material makes it useful as a matrix material thermoplastic polymers capable of going into high condition and undergoing chemical transformation by a process of heating and cooling.

Keywords: multi-level simulation, polymer composite materials, UHMWPE, nanotubes, carbon fiber, composite material, structure and adhesion strength characteristics asymmetrical inclusion reinforcement.

Введение

Использование высокопрочных и высокомодульных волокон позволяет создавать композиционные материалы, обладающие малой массой, управлять физико-механическими, электрическими, теплофизическими свойствами, регулировать анизотропию этих характеристик, обеспечивая достижение максимальных характеристик в выбранном

направлении. Указанные возможности позволяют применять такие материалы для создания конструкций с высокой весовой эффективностью для различных областей применения.

Назначение материала, требования, регламентирующие условия его работы в изделиях, определяют выбор схемы армирования, материала матрицы и армирующего наполнителя. Необходимость обеспечить высокую пластическую деформацию композиционного материала делает целесообразным применение в качестве материала матрицы термопластичных полимеров, способных переходить в высокоэластичное состояние и не претерпевающих химических превращений в процессе нагрева и охлаждения [3-5].

В настоящей работе решалась задача численного моделирования последствий механических воздействий на указанные полимерные нанокомпозиты, содержащие асимметричные включения.

Методика численного моделирования

В работе проводился расчет огрубленной (coarse-grained) мезоскопической модели. Моделировалась полиэтиленовая матрица, состоящая из 10 молекул полиэтилена из 5000 мономеров CH_2 . В coarse-grained модели полимер состоял из суператомов, которые представляют мономеры CH_2 .

Для молекулярно-динамического расчета использовалась комбинация гармонического потенциала, потенциала валентного угла и потенциала Леннарда-Джонса благодаря своей простоте и универсальности. Полная энергия полимера состоит из следующих частей [1].

1. Гармонический потенциал между соседними суператомами, соединенными химической связью:

$$U_{bond}(r) = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2$$

$$k_r = 700 \text{ ккал/моль}, r_0 = 1.557 \text{ \AA}.$$

2. Потенциал, зависящий от изменения валентного угла между соседними суператомами:

$$U_{angle}(\theta) = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2$$

$$k_\theta = 112 \text{ ккал/моль}, \theta_0 = 112 \text{ град}$$

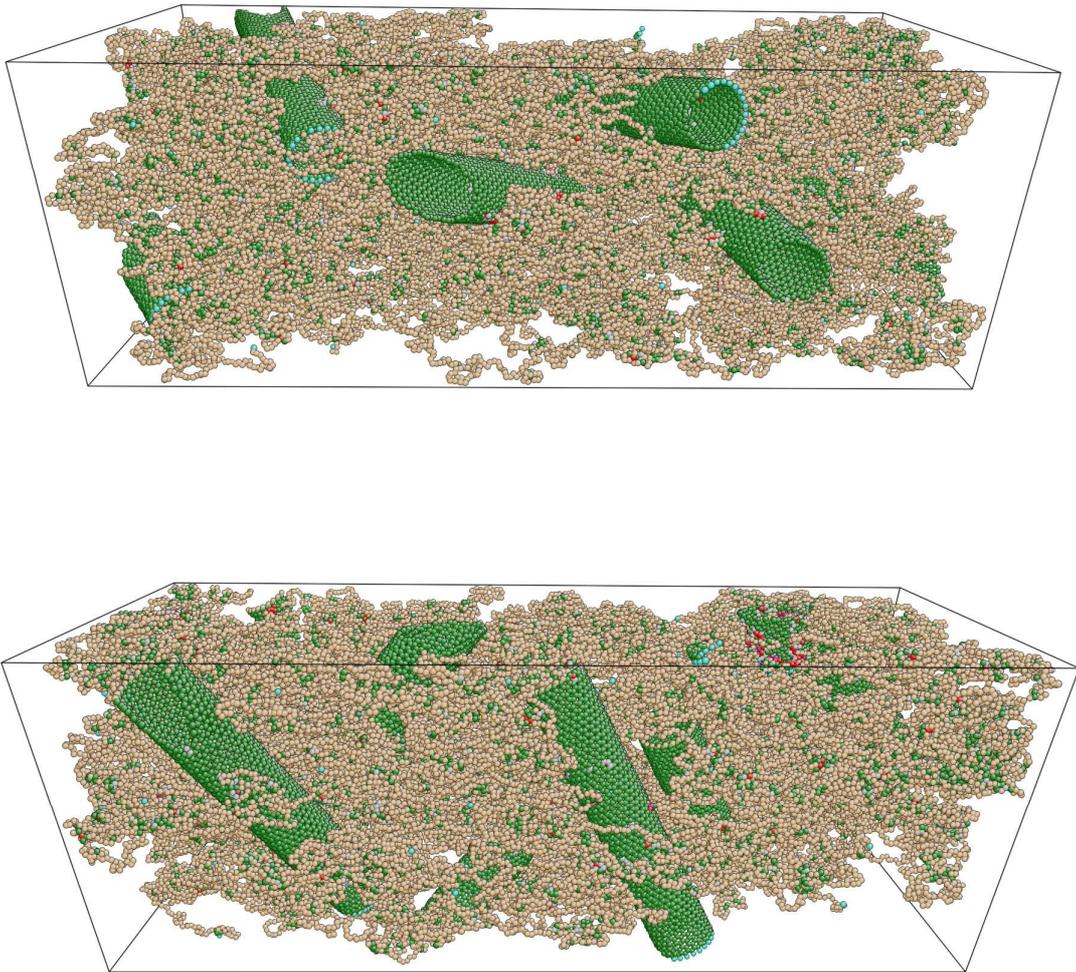


Рисунок 1. Пример огрубленной модели с углеродными нанотрубками.

3. Потенциал Леннарда-Джонса для описания Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия между атомами, не связанными химической связью:

$$U(r) = 4u \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

$$u = 0.113266 \text{ ккал/моль}, \sigma = 4.28 \text{ \AA}.$$

Для ускорения генерации полиэтиленовой матрицы при плотности $\sim 1 \text{ г/см}^3$ сначала создавалась матрица плотностью 0.074375 г/см^3 , и в молекулярно-динамическом расчете производилось 3-осное сжатие до плотности 0.97 г/см^3 при 500 К . Затем в течение 0.3 пс температура понижалась до 250 К для получения стеклообразного состояния полиэтилена.

Примеры начальных структур показаны на рисунках 1 и 2.

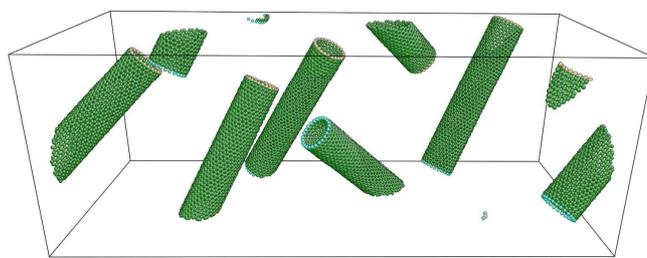
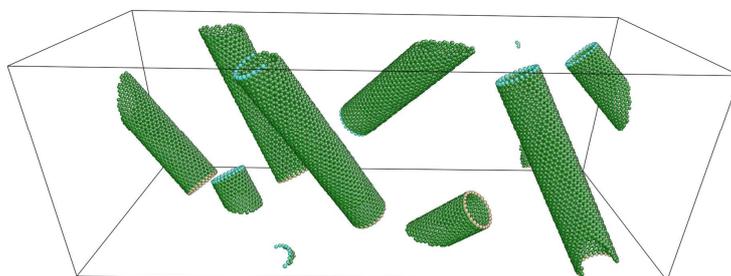


Рисунок 2. Пример огрубленной модели с углеродными нанотрубками (молекулы полимера не показаны)

Деформирование образца моделировалось путем одноосного растяжения с различными скоростями (показано на рисунке 3). Напряжение дано в относительных единицах. Для используемой модели CG-потенциала 10^6 отн. ед. = 20 МПа. Черная и красная линия соответствуют скоростям растяжения, отличающимся на порядок величины.

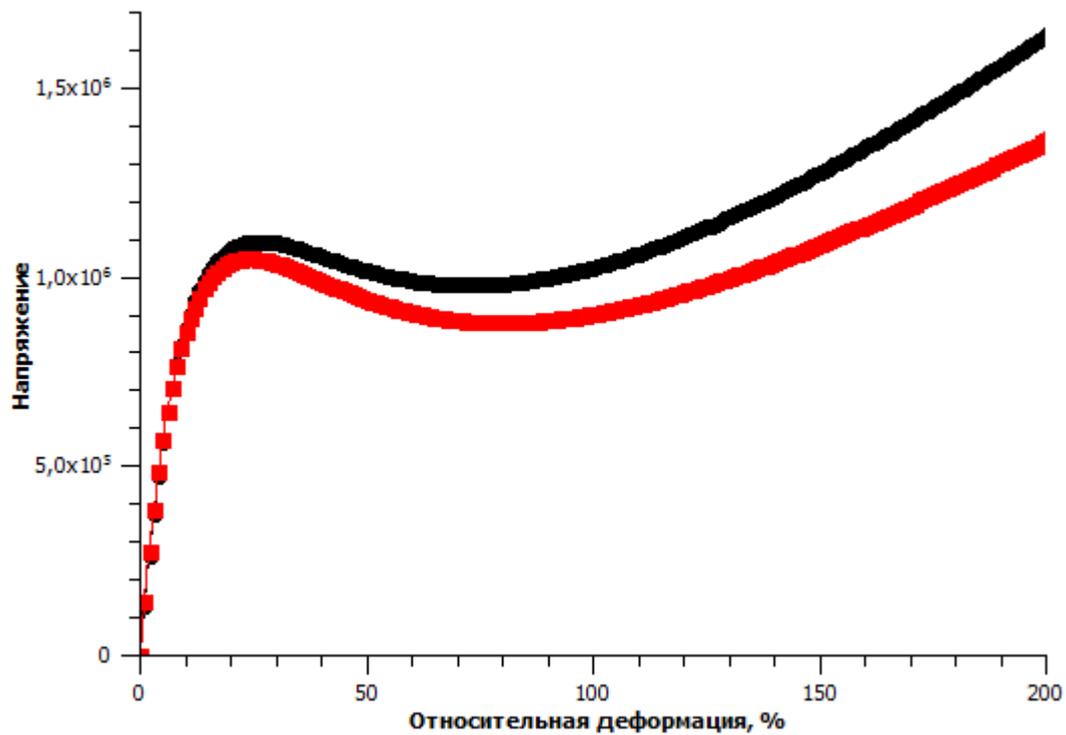


Рисунок 3. Зависимость напряжения в образце от величины относительной деформации

Результаты показывают наличие слабой зависимости напряжения в образце от скорости растяжения. Однако ее влияние не превышает требуемого уровня точности для расчета (как в данном примере) предела текучести нанокompозитного материала (10%).

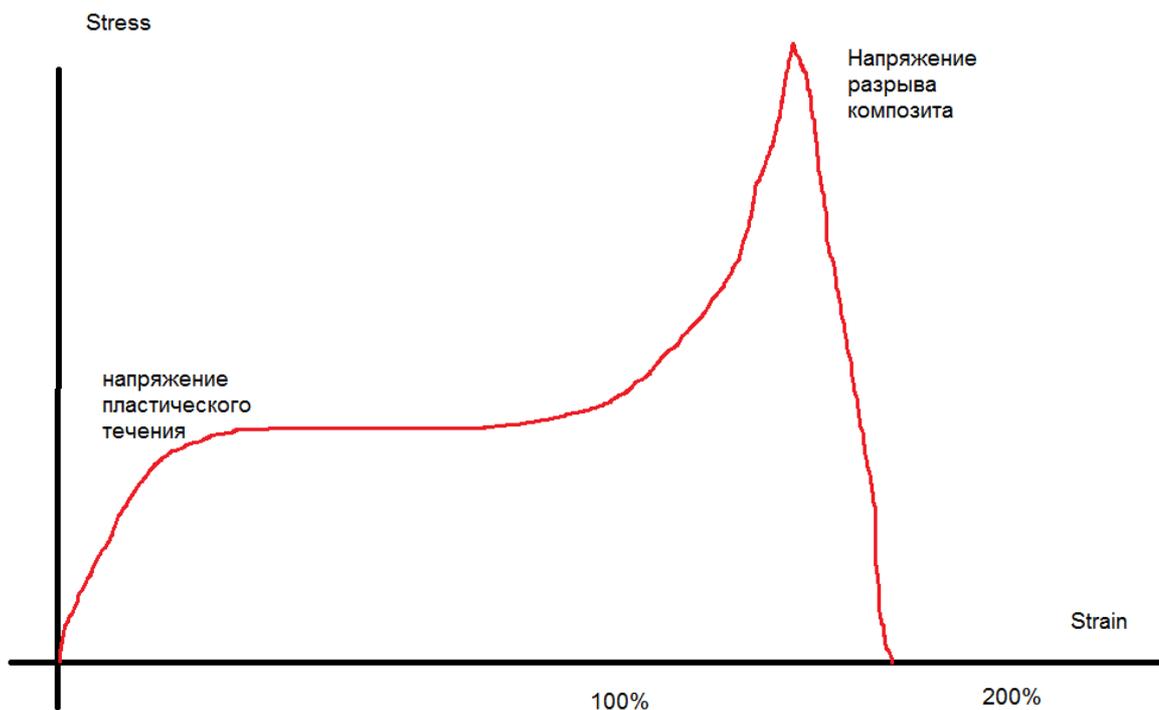


Рисунок 4. Качественный пример выходных данных

Рассчитанные значения напряжения и модуля упругости при одноосном растяжении аморфного полиэтилена Сравнение полученных с помощью МД-моделирования данных с экспериментальными приведено в таблице 1.

Таблица 1 - Значения напряжения и модуля упругости для UHMWPE

	МД	Эксперимент
Напряжение при 1% растяжения, МПа	48.6	37.1±1.8
Модуль упругости, ГПа	4.8	3.7±0.17

Расхождение данных молекулярно-динамического моделирования с экспериментальными можно объяснить, в частности, значительной разницей молекулярных масс и числа мономеров в полиэтилене.

Функциональных форм для подобного эмпирического описания потенциалов предложено большое количество. Например, в [2] используется потенциал, представленный следующими компонентами:

$$U(l) = b (l - l_0)^2$$

$$b = 13.74302 \text{ эВ/Å}^2, l_0 = 1.53 \text{ Å},$$

$$U(\theta) = a_1(\theta - \theta_0)^2 + a_2(\theta - \theta_0)^3$$

$$\theta_0 = 109.47 \text{ град}, \alpha_1 = 5.2038893 \times 10^{-4} \text{ эВ/град}^2, \alpha_2 = 4.9955775 \times 10^{-6} \text{ эВ/град}^3,$$

$$U(\varphi) = c_1(d_0 + d_1 \cos \varphi + d_2 \cos^2 \varphi + d_3 \cos^3 \varphi + d_4 \cos^4 \varphi + d_5 \cos^5 \varphi)$$

$$c_1 = 0.010364269 \text{ эВ}, d_0 = 9.279, d_1 = -12.136, d_2 = -13.120,$$

$$d_3 = 3.060, d_4 = 26.240, d_5 = 31.594,$$

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

$$\varepsilon = 6.2040512 \times 10^{-3} \text{ эВ}, \sigma = 3.923$$

где r_0, l_0 – равновесные длины связи, θ_0 – равновесное значение угла между соседними атомами в молекуле.

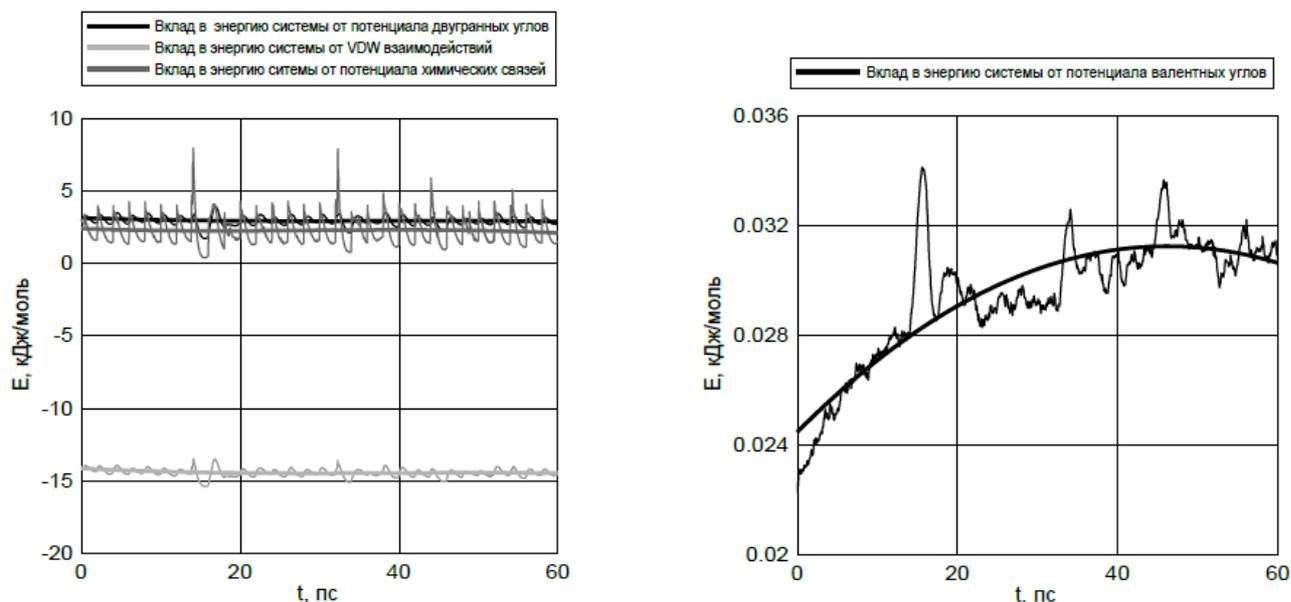


Рисунок 5. Вклады в суммарную потенциальную энергию молекулярной системы

Анализ энергетических параметров молекулярной системы (рис. 5) свидетельствует о том, что основным механизмом механического поведения нанокompозита при одноосном растяжении является деформация валентных углов; энергии химических связей, парных и торсионных взаимодействий остаются практически неизменными.

Выводы

В данной работе методом молекулярно-динамического моделирования исследована структура и физико-механические свойства полиэтилена. Для определения эффективных упругих характеристик моделировалось различные типы деформирования образца: одноосное растяжение и нагружение образца внешним давлением.

Результаты показывают наличие слабой зависимости напряжения в образце от скорости растяжения. Также показано, что основным механизмом механического поведения нанокompозита при одноосном растяжении является деформация валентных углов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы», государственный контракт 01 марта 2013 г. № 14.514.11.4053.

Список литературы

1. Евстафьев О.И., Копысов С.П. Моделирование структуры и физико-механических свойств полиэтилена с шунгитовым наполнителем // Химическая физика и мезоскопия. - 2007. - Vol. 10, № 1. - P. 25–31.
2. Khan M.R. et al. Elastic Properties of UHMWPE-SWCNT Nanocomposites' Fiber: An Experimental, Theoretic, and Molecular Dynamics Evaluation // Journal of Materials Engineering and Performance. - 2013. - № Ref 16.
3. Maksimkin A.V., Kaloshkin S.D., Kaloshkina M.S., Gorshenkov M.V., Tcherdyntsev V.V., Ergin K.S., Shchetinin I.V. Ultra-high molecular weight polyethylene reinforced with multi-walled carbon nanotubes: Fabrication method and properties // Journal of Alloys and Compounds. - 2012. - V. 536. - P. S538-S540.
4. Ren LQ, Liu CZ, Jiang M, Tong J, Zhao YG and Li JQ. Characteristics and mechanism of abrasive wear of particle reinforced UHMWPE matrix composites // Tribology. – 1997. - № 17. - P. 334–339.
5. Shoufan Cao, Hongtao Liu, Shirong Ge, Gaofeng Wu Mechanical and tribological behaviors of UHMWPE composites filled with basalt fibers // Journal of Reinforced Plastics and Composites. – 2011. – 30 (4). – P. 347–355.

Рецензенты:

Кривоножко В.Е. д.ф.-м.н., заведующий кафедрой АСУ НИТУ «МИСиС», г. Москва.

Красильников О.М., д.ф.-м.н., профессор НИТУ «МИСиС», г. Москва.