

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОТРУБКОВИХ КОМПОЗИТІВ З УРАХУВАННЯМ ЕФЕКТУ ОРІЄНТАЦІЇ

Юрій Оленич, Іван Карбовник

COMPUTER MODELING OF THE MECHANICAL PROPERTIES OF NANOTUBE
COMPOSITES CONSIDERING THE ORIENTATION EFFECT

Yuriy Olenych, Ivan Karbovnyk

Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Ген. Тарнавського, 107,
79013, Львів, Україна

Abstract. *This paper proposes a model for predicting the mechanical properties of composite materials based on their structural features at the nanoscale. The computer model considers not only the content, but also the predominant orientation of the filler in the rule of mixtures and the Halpin–Tsai equation. The predominant orientation of the filler is maintained by restricting the orientation angles of randomly arranged nanotubes.*

Передовим напрямком сучасних наукових досліджень є розробка нових композитних матеріалів з покращеними функціональними властивостями. Для різних інженерних застосувань використовуються різні типи як матриць, так і наноструктурованих наповнювачів, серед яких особливу увагу дослідників викликають вуглецеві нанотрубки. Зокрема, завдяки унікальним фізико-механічним властивостям нанотрубки використовують як наповнювач полімерної матриці для отримання міцних та легких конструкційних матеріалів. Додавання навіть невеликого вмісту нанотрубок до полімеру може суттєво покращити міцність і жорсткість композитного матеріалу [1].

Оцінювання механічних характеристик нанокомпозитів на основі експериментальних досліджень показало, що між одержаними результатами існує мінливість, зумовлена структурними особливостями композитів у наномасштабі [2]. Для з'ясування впливу мікроструктури композитів на їхні механічні властивості зазвичай використовують обчислювальні методи, а саме молекулярну динаміку [3], механіку суцільного середовища [4], метод скінченних елементів [5] та ін. Однак такі методи, як молекулярна динаміка, потребують великі обчислювальні ресурси через значну трудомісткість та складність моделі. Крім того, більшість симуляцій композитних матеріалів обмежені моделями, які містять лише один тип наповнювача з певним розподілом у матриці. Зокрема, за орієнтацією нанотрубок розглянуті моделі зазвичай класифікують на дві групи, а саме: вирівняні та випадково розподілені. Враховуючи, що нанокомпозити можуть охоплювати наповнювачі з багатьма різними формами, розмірами та різноманітністю орієнтацій наночастинок, а обмеження кутів орієнтації нанотрубок суттєво впливає на перколяційні процеси у мережі прямих нанотрубок [6], метою дослідження було встановлення особливостей механічних властивостей нанокомпозитів на основі нанотрубок, зумовлених переважаючою орієнтацією нанотрубок у допороговому діапазоні їх концентрації.

У роботі запропоновано модель композитного матеріалу у вигляді об'ємного елемента з формою паралелепіпеда з хаотично розташованими нанотрубками, положення кожної з яких задається випадковим чином за допомогою координат двох граничних точок на протилежних кінцях трубки та орієнтаційних кутів між віссю нанотрубки та гранями паралелепіпеда. Анізотропний розподіл нанотрубок у композиті був створений за допомогою обмеження кутів орієнтації наповнювача [6].

Моделювання механічних властивостей здійснювалося з використанням двох найбільш поширених підходів – правила сумішей та рівнянь Халпіна–Цая [7]. Зазначені підходи розглядають композит як ізотропну пружну матрицю, заповнену однаково вирівняними еластичними волокнами, які охоплюють всю довжину зразка, і припускають, що матриця і волокна дуже добре скріплені. За таких обставин відповідно до правила сумішей підвищення міцності композиту на розтяг у напрямку вирівнювання визначається як

$$\frac{Y_c}{Y_m} = \left(\frac{Y_f}{Y_m} - 1 \right) V_f + 1, \quad (1)$$

де V_f – об'ємна частка волокна, Y_c , Y_f і Y_m – модуль міцності композиту, волокна і матриці, відповідно. Іншим поширеним аналітичним підходом оцінювання міцності композитних матеріалів є рівняння Халпіна–Цая

$$\frac{Y_c}{Y_m} = \frac{1 + \xi \eta V_f}{1 - \eta V_f}, \quad (2)$$

де ξ – відношення довжини нанотрубки до її радіуса, а

$$\eta = \frac{Y_f - Y_m}{Y_f + Y_m}. \quad (3)$$

Для встановлення зв'язку між структурними особливостями композитних матеріалів у наномасштабі та їхніми механічними властивостями на макрорівні запропоновано модель, яка для довільного перерізу об'ємного елемента у трьох взаємно перпендикулярних напрямках враховує не тільки вміст, але й переважаючу орієнтацію наповнювача. У результаті комп'ютерного моделювання було одержано координатні залежності міцності нанокомпозиту вздовж цих напрямів для об'ємної концентрації нанотрубок у діапазоні 0,2–2,0 %. Застосування обмежень для орієнтаційних кутів забезпечує аналіз впливу переважаючої орієнтації нанотрубок на механічні властивості матеріалу.

Виявлено, що міцність композиту суттєво залежить як від концентрації нанотрубок, так і від їхньої переважаючої орієнтації. Оцінка ефективності розробленої моделі здійснювалася шляхом порівняння результатів обчислень зі значеннями модуля міцності композитного матеріалу, одержаними за допомогою правила сумішей і рівняння Халпіна–Цая для граничних випадків (вирівняні та випадково розподілені нанотрубки). Запропонована модель дає змогу прогнозувати властивості композитів на основі їх структурних характеристик.

Бібліографія

1. Tarfaoui M., Lafdi K., El Moumen A. Mechanical properties of carbon nanotubes based polymer composites. *Composites Part B: Engineering*. 2016. Vol. 103. P. 113–121.
2. Baykasoglu C, Kirca M, Mugan A. Nonlinear failure analysis of carbon nanotubes by using molecular-mechanics based models. *Composites Part B: Engineering*. 2013. Vol. 50. P. 150–157.
3. Sharma S., Chandra R., Kumar P., Kumar N. Thermo-mechanical characterization of multi-walled carbon nanotube reinforced polycarbonate composites: a molecular dynamics approach. *Comptes Rendus Mecanique*. 2015. Vol. 343. P. 371–396.
4. Arroyo M., Belytschko T. Continuum mechanics modeling and simulation of carbon nanotubes. *Meccanica*. 2005. Vol. 40. P. 455–469.
5. Yuan Z., Lu Z. Numerical analysis of elastic–plastic properties of polymer composite reinforced by wavy and random CNTs. *Computational Materials Science*. 2014. Vol. 95. P. 610–619.
6. Olenych Y., Karbovnyk I., Klym H. In: *Proceedings of 14th International Conference on Perspective Technologies and Methods in MEMS Design*. 2018. P. 48–51.
7. Coleman J.N., Khan U., Blau W.J., Gun'ko Y.K. Small but strong: A review of the mechanical properties of carbon nanotube–polymer composites. *Carbon*. 2006. Vol. 44. P. 1624–1652.