

Використання методів комп'ютерного моделювання для дослідження поведінки полімерів, армувальних компонентів та композитних матеріалів на їх основі

Омельчук І.В., аспірант, Карвацький А.Я., д.т.н., проф.
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», м. Київ

Розглянуто ряд останніх досліджень у галузі комп'ютерного моделювання полімерів та композитів на їх основі та наведено підходи до поєднання методів молекулярної динаміки та структурної механіки для багатомасштабних досліджень полімерних систем. Наведено результати розрахунків модуля пружності та коефіцієнта Пуассона кремнію – базового хімічного елементу широко використовуваного як армувальний компонент для наноматеріалів.

Полімери є одними з найважливіших матеріалів в сучасному світі, що обумовлюється їх специфічними фізико-хімічними властивостями. Їх переваги над металами, папером, склом, керамікою та іншими матеріалами зробили полімери одними з найбільш використовуваних матеріалів у пакувальній індустрії [1]. Проте полімерні матеріали, наприклад такі як поліетилен, у чистому вигляді не можуть задовольняти сучасним технологічним вимогам, що викликає попит на дисперсно-зміцнені полімери – композитні матеріали [2].

Заповнення матриці армувальними компонентами покращує фізико-механічні властивості полімерів. Як домішки для полімерних композитних матеріалів використовуються органічні матеріали, силікати та матеріали на основі вуглецю тощо у вигляді волокон та порошків. Важливим армувальним компонентом для композитів можуть слугувати вуглецеві нанотрубки (ВНТ). За рахунок значного відношення поверхні ВНТ до їх об'єму та унікальних фізико-механічних властивостей, армовані таким чином полімери набувають все більшого поширення у світі, проте проблемою експериментальних досліджень цих композитів є висока вартість армувального матеріалу [2, 3]. Комп'ютерне моделювання є певною альтернативою експериментальним методам дослідження полімерних композитів і є потужним інструментом для дослідження поведінки цих матеріалів, зокрема, їх фізичних властивостей. Поєднання можливостей обчислювальної техніки та класичних методів фізико-структурного аналізу дозволяють досліджувати поведінку матеріалів навіть на нанорозмірному рівні. Різні підходи до комп'ютерного моделювання, включаючи молекулярно-динамічні методи (МД), є важливими інструментами для скорочення терміну розробки (проектування) нового матеріалу.

Методи МД реалізовані як у комерційних пакетах (Materials Studio, GROMACS, AMBER), так і в програмному забезпеченні з відкритим кодом, наприклад, LAMMPS, VMD тощо. Моделювання методами МД дає можливість досліджувати поведінку полімерних матеріалів у реальних умовах експлуатації (ударні, теплові та інші види навантаження) на атомному рівні та визначити їх ефективність для вирішення конкретної задачі навіть у ситуаціях, коли це неможливо зробити за допомогою традиційних аналітичних або експериментальних методів [3, 4].

Важливість МД для дослідження властивостей матеріалів ілюструє праця А. Р. Thompson та ін. [5]. Автори вказують на можливість використання методів МД для пошуку відповідей на прикладах вузько спрямованих задач шляхом поєднання інструментів LAMMPS з іншим програмним забезпеченням. Такий підхід також наведено у праці Т. Murashima та ін. [6] з використанням багатомасштабного моделювання одновісного розтягнення/стискання та асиметричної деформації за допомогою комбінації методів скінченних елементів і Coarse-Grained-Parinello-Rahman (рис. 1). Подібний підхід bottom-up використовується для дослідження нелінійної вібрації матеріалів у праці J. F. Wang та ін. [7]. N. Subramanian та ін. [8] наводять методи багатомасштабного моделювання нанокompозитів та алгоритм дослідження природи виникнення умов ініціації пошкоджень в матеріалах.

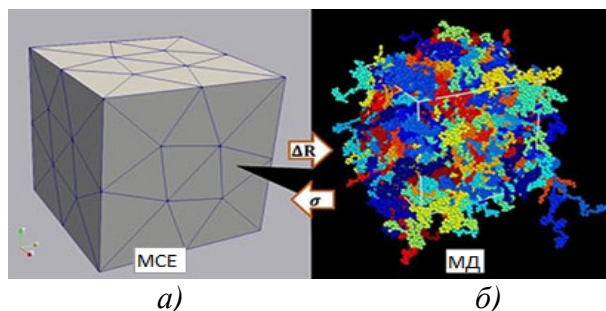


Рисунок 1 – Схематичне зображення багатомасштабного моделювання полімерного матеріалу: *а* – куб матеріалу зі скінченно-елементною сіткою; *б* – репрезентативний елемент молекулярної моделі полімеру [6]

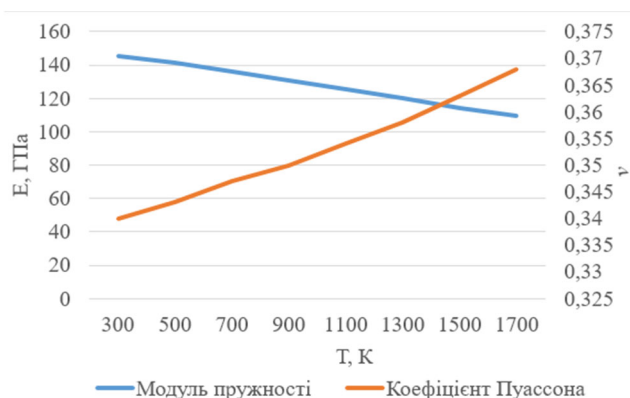


Рисунок 2 – Залежність модуля пружності та коефіцієнта Пуассона від температури

На відміну від вуглецевих нанотрубок, завдяки своїй доступності та стабільності фізико-хімічних властивостей, важливе місце як армувальний матеріал композитів займають матеріали на основі кремнію [2]. З використанням скриптів LAMMPS виконано дослідження фізико-механічних властивостей кремнію, а саме модуля пружності та коефіцієнта Пуассона залежно від температури за допомогою комп'ютерного МД моделювання (рис. 2).

Отримані дані механічних властивостей кремнію можуть бути використані, наприклад, для визначення ефективних властивостей дисперсно-зміцнених полімерних композитів.

Висновки. Моделювання полімерних композитних (наномодифікованих) матеріалів з використанням методів комп'ютерного моделювання є ефективним способом вивчення їх поведінки у процесах виготовлення та використання полімерних пакувань.

Перелік посилань

1. S. K. Bharathi et al.. Recent Trends in Nanocomposite Packaging Materials/ Innovative Food Processing Technologies: A Comprehensive Review, 2020. pp. 731-755.
2. Nasreen Taj, M. et al.. Polymer - Silicate nanocomposites: Package material for nanodevices as an EMI shielding/ Materials Today: Proceedings, 2020. pp. 6017-6021.
3. W. M. Qian et al.. Investigation on the effect of functionalization of single-walled carbon nanotubes on the mechanical properties of epoxy glass composites: Experimental and molecular dynamics simulation/ Journal of Materials Research and Technology, vol. 12, 2021. 15 p..
4. Карвацький А. Я., Омельчук І. В., Мікульонюк І. О., Витвицький В. М.. Дослідження властивостей полімерів методом молекулярної динаміки за допомогою LAMMPS (Огляд)/ Вісник НТУУ "КПІ ім. Ігоря Сікорського". Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження. № 4(19), 2020. 17–28 с.
5. A. P. Thompson et al.. «LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales/ Computer Physics Communications, vol. 271, 2022. 34 p..
6. T. Murashima, S. Urata and S. Li. Coupling finite element method with large scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS) for hierarchical multiscale simulations: Modeling and simulation of amorphous polymeric materials/ European Physical Journal B, vol. 92, 2019. 15 p..
7. J. F. Wang et al.. Effect of CNT volume fractions on nonlinear vibrations of PMMA/CNT composite plates: A multiscale simulation/ Thin-Walled Structures, vol. 170, 2022. 14 p..
8. N. Subramanian et al.. Molecular dynamics-based multiscale damage initiation model for CNT/epoxy nanopolymers/ Journal of Materials Science, vol. 53, 2018. pp. 2604-2617.