

УДК 658.512.011.56

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ,  
УКРЕПЛЕННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ**Л.В. БОЧКАРЁВА<sup>1</sup>, Д.М. САНИКОВИЧ<sup>2</sup><sup>1,2</sup>*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь,*<sup>1</sup>*Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси  
Сурганова, 6, 220006, Минск, Беларусь**Поступила в редакцию 15 февраля 2007*

Рассмотрены уникальные свойства углеродных нанотрубок и укрепленных ими материалов. Разработаны конечно-элементная модель и программное средство, позволяющие исследовать влияние углеродных нанотрубок на демпфирование материала, который испытывает напряжение деформации. Определены характеристики композитного материала, способные уменьшить его собственные колебания.

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование, углеродная нанотрубка, композитный материал, демпфирование, метод конечных элементов.

**Введение**

Работа посвящена созданию программного средства (ПС), предназначенного для изучения и моделирования свойств сложных (композитных) материалов на уровне нанообъектов — атомов и молекул. Среди современных программных пакетов для моделирования материалов наиболее популярными признаны MatLab, Nastran, ABAQUS и ANSYS. Однако большинство из них создавалось из расчета на структурные уровни макро- и микромира. Поэтому могут возникнуть проблемы в ходе применения названных программных продуктов для решения задач, рассматриваемых на уровне нанообъектов. Необходимость в подобном программном обеспечении (ПО) вызвана появлением материалов с уникальными механическими свойствами, новыми функциями и областями применения. Ввиду специфики нанотехнологий синтез и испытание наноматериалов являются довольно сложными процессами. Вследствие этого потребовались методики компьютерного моделирования физико-механических свойств нанообъектов. В этом аспекте компьютерное моделирование можно рассматривать как удобный инструмент, позволяющий всесторонне исследовать нанообъекты, а затем на их основе проектировать и создавать различные материалы с требуемыми характеристиками.

**Уникальные свойства материалов, созданных с применением углеродных нанотрубок**

Постоянно расширяется круг прикладных областей, охваченных нанотехнологиями. В каждой из них решаются свои задачи, однако для всех характерна одна особенность: продукты, созданные в результате моделирования на уровне нанообъектов, приобретают улучшенные характеристики, по сравнению с которыми другие продукты становятся неконкурентоспособными [1].

Большинство композитных материалов, создаваемых сегодня, строятся с применением углеродных нанотрубок. Они представляют собой протяженные цилиндрические структуры диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких микрон, состоят из одной или нескольких свернутых в трубку гексагональных графитовых плоскостей и заканчиваются обычно полусферической головкой. Композитные материалы, упрочненные нанотрубками, имеющими большие значения модуля упругости, показывают высокую прочность при сверхвысоких упругих деформациях. Кроме того, под действием механических напряжений, превышающих критические, нанотрубки не "рвутся" и не "ломаются", а перестраиваются. Как показывают результаты экспериментов и численного моделирования, модуль Юнга однослойной нанотрубки достигает величин порядка 1–5 ТПа, что на порядок больше, чем у стали. Еще одно полезное свойство нанотрубок заключается в том, что некоторые композитные материалы, в которые они добавлены, хорошо гасят вибрацию. Как правило, для ослабления колебаний используют вязкие демпфирующие материалы или пропитки на основе тяжелых углеводородов, каучуков и других полимеров с длинными молекулами. Они эффективно гасят колебания, однако утяжеляют конструкцию и снижают ее прочность. Кроме того, ни один из широко используемых демпфирующих материалов не выдерживает слишком высоких или низких температур, теряя вязкость или становясь слишком хрупким. В некоторых полимерных вибропоглощающих покрытиях используются жароустойчивые графитовые включения. Слои из атомов углерода в частичках графита при деформациях скользят друг по другу и эффективно гасят вибрацию, но не удается сделать графитовые композиты прочными. В противовес этому композиты на основе углеродных нанотрубок прочны, легки и эффективно поглощают вибрацию. Такое сочетание свойств необходимо, например, в диффузорах громкоговорителей. Их материал должен быть легким и жестким, чтобы не возникали паразитные колебания, и вязким, чтобы быстро эти колебания потушить. Не менее важны все эти свойства и для корпусов космических аппаратов, самолетов, деталей автомобилей. Там особенно ценится уникальная способность нанотрубок практически не менять характеристики в широком диапазоне температур. Более того, удалось показать, что демпфирующие свойства нанотрубок даже усиливаются при нагревании [2, 3].

### Постановка задачи моделирования свойств композитного материала

Необходимо разработать ПС, позволяющее исследовать такое свойство технической системы, как демпфирование — способность понижения собственных колебательных процессов. Затухание колебаний достигается за счет вязкого трения материалов, на которое тратится часть потенциальной энергии системы. Основным материалом композита — это резина, а наполнитель — углеродные нанотрубки (рис. 1). Резина задается модулями сдвига и Юнга. Главной целью моделирования является определение того, как внедрение нанотрубок влияет на колебательные процессы материала. Модель композита в масштабе одной нанотрубки представляет собой соединение двух цилиндров, один из которых вставлен в другой. Нанотрубка — это внутренний полый цилиндр, толщина которого принята равной межатомному расстоянию

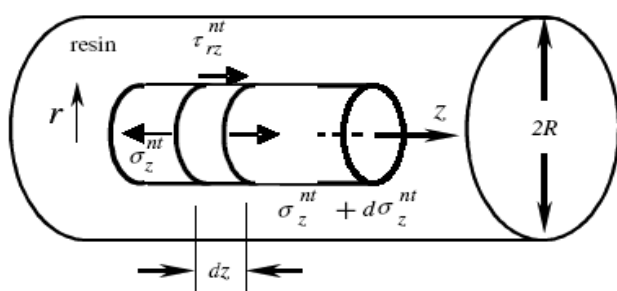


Рис. 1. Модель композитного материала

основного материала [4]. Исходными данными для построения модели композита являются следующие параметры:  $R$  — радиус цилиндра основного материала, равный 1 см;  $r$  — радиус цилиндра нанотрубки, варьируемый от 10 до 100 нм;  $l$  — длина нанотрубки, принимающая значения от 20 до 200 нм;  $\tau$  — переменное критическое давление материала;  $\sigma$  — напряжение деформации материала;  $\varepsilon$  — относительная деформация материала; объем каждого материала в композите в условных процентах.

## Построение конечно-элементной модели композитного материала

Для оценки демпфирования композит извне подвергается нагрузке, предполагающей следующую схему взаимодействия между нанотрубкой и резиной. Оба цилиндра растягиваются, в результате чего происходит деформация материалов, и они испытывают напряжение деформации. Определенное критическое напряжение приводит к разрыву связи между нанотрубкой и резиной, после чего данная нанотрубка перестает влиять на прочность композита. В работе прочность понимается как степень устойчивости материала к разрушающим воздействиям. При дальнейшем увеличении внешнего давления растяжению будет подвержена только резина.

Основная идея метода конечных элементов (МКЭ) состоит в том, что любую непрерывную величину, такую, как напряжение, давление и перемещение, можно аппроксимировать дискретной моделью, которая строится на множестве кусочно-непрерывных функций, заданных на конечном числе подобластей. Кусочно-непрерывные функции определяются с помощью значений непрерывной величины в конечном числе точек рассматриваемой области [5].

Построение конечно-элементной модели материала выполняется для расчета напряжения и модуля Юнга композита и включает в себя следующие этапы [5]:

- выбор интерполяционного полинома;
- разбиение области на элементы, соответствующие полиному;
- расчет матрицы жесткости и вектора нагрузки по элементам;
- формирование глобальной матрицы жесткости и вектора нагрузки;
- решение системы линейных уравнений.

Поскольку деформация происходит только в одном направлении, целесообразен выбор двумерных элементов. Для простоты и удобства используется линейный полином, а область разбита на симплекс элементы (прямоугольники, треугольники), как показано на рис. 2. Здесь каждый узел имеет две степени свободы, поэтому перемещения  $u$  и  $v$  внутри элемента определяются формулой 1, где  $N_i$  — функции формы, а  $U_i$  — компоненты вектора.

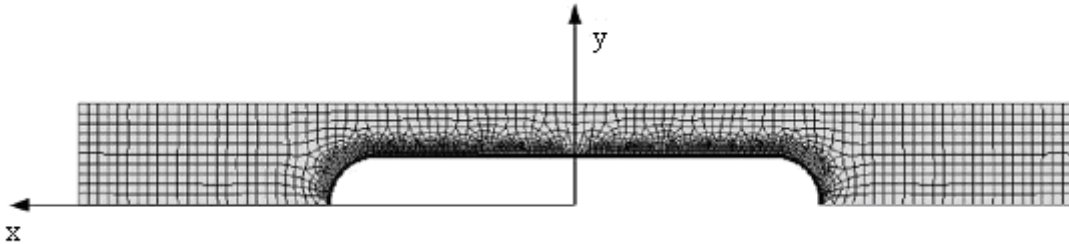


Рис. 2 Область, разбитая на элементы

$$\begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} N_i & 0 & N_j & 0 & N_k & 0 \\ 0 & N_i & 0 & N_j & 0 & N_k \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} U_{2i-1} \\ U_i \\ U_{2j-1} \\ U_j \\ U_{2k-1} \\ U_k \end{Bmatrix}. \quad (1)$$

Будем считать, что рассматриваемая область располагается в плоскости  $xu$ , и введем следующие компоненты деформации и напряжения:  $\{\varepsilon\}^T = [\varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy} \gamma_{xy}]$ ,  $\{\sigma\}^T = [\sigma_{xx} \sigma_{yy} \tau_{xy}]$ .

Для плоского напряженного состояния имеем  $\sigma_{zz} = \tau_{zx} = \tau_{zy} = 0$ . Компоненты тензора деформации  $\gamma_{yz}$  и  $\gamma_{xz}$  и тензора напряжений  $\tau_{zy}$  и  $\tau_{zx}$  тоже равны нулю, но  $\varepsilon_{xx}$  и  $\sigma_{zz}$  отличны от нуля и могут быть получены из закона Гука, после того как определены  $\{\sigma\}$  и  $\{\varepsilon\}$ . Деформации и перемещения в двумерном случае связаны между собой следующими соотношениями:  $\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}$ ,  $\varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}$ ,  $\gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}$ . С учетом формулы (1) получаем выражение (2), определяющее матрицу градиентов  $[B]$ , так как  $\{\varepsilon\} = \{B\}\{U\}$ . Матрица упругих характеристик  $[D]$  и вектор начальной деформации  $\{\varepsilon_0\}$  в случае плоской деформации определяются выражениями (3) и (4) соответственно. Формулы (3) и (4) представляют изотропный материал с модулем упругости  $E$  и коэффициентом Пуассона  $\mu$ :

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix} = \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} b_i & 0 & b_j & 0 & b_k & 0 \\ 0 & c_i & 0 & c_j & 0 & c_k \\ c_i & b_i & c_j & b_j & c_k & b_k \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} U_{2i-1} \\ U_i \\ U_{2j-1} \\ U_j \\ U_{2k-1} \\ U_k \end{Bmatrix}, \quad (2)$$

$$[D] = \frac{E(1-\mu)}{(1+\mu)(1-2\mu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\mu}{(1-\mu)} & 0 \\ \frac{\mu}{(1-\mu)} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_0 = (1+\mu)\alpha\Delta T \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (4)$$

Поскольку матрицы  $[B]$  и  $[D]$  содержат только константы, несложно вычислить интегралы, по которым составляются уравнения, определяющие элемент для МКЭ. Решение уравнений позволяет узнать напряжение в любой узловой точке. Решение системы линейных уравнений выполняется методом Гаусса.

### Определение свойств композитного материала

Для нахождения демпфирования нанокompозита необходимо установить связь между его собственными колебаниями и потенциальной энергией. Изменение потенциальной энергии оценивается коэффициентом рассеивания энергии  $\eta$  (5). По нему оценивается прочность материала, которая тем выше, чем выше коэффициент рассеивания энергии. Вычислив коэффициент до и после внедрения нанотрубок, можно определить, на сколько изменилось демпфирование материала:

$$\eta = \arcsin\left(\frac{\Delta W}{2\pi W}\right), \quad (5)$$

где  $W$  — полная энергия деформации, а  $\Delta W$  — энергия рассеивания. Эти характеристики определяются по следующим формулам:

$$W = \int_V (\sigma \varepsilon / 2) dV, \quad (6)$$

$$\Delta W = 4\tau \pi r l^2 \Delta \varepsilon, \quad (7)$$

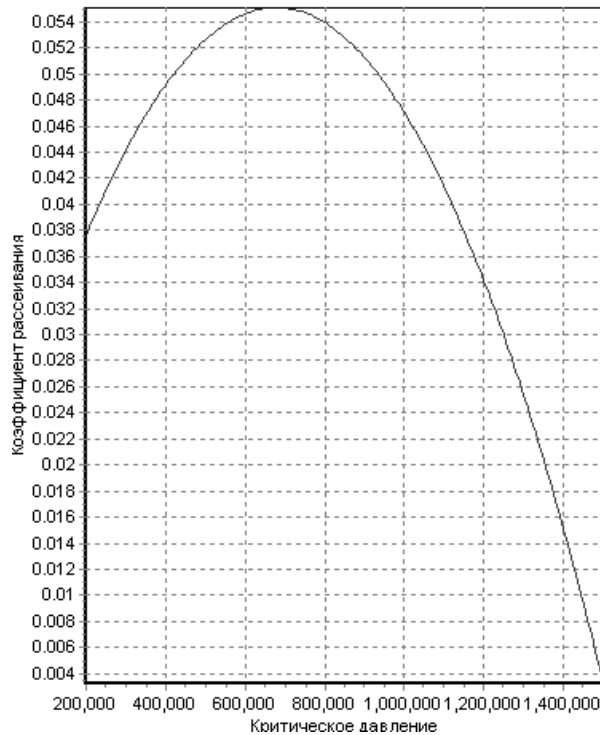


Рис. 3. Зависимость коэффициента рассеивания энергии от разных значений критического давления

та рассеивания энергии от степени деформации и концентрации нанотрубок. Так по характеру графиков видно, что с ростом деформации коэффициент рассеивания увеличивается, но, достигнув определенного критического значения, начинает падать. На рисунке нижний график соответствует концентрации 0,5%, средний — концентрации в 1%, верхний — концентрации в 2%. Следовательно, увеличение концентрации нанотрубок уменьшает колебания системы.

Как уже отмечалось, основной материал в работе задается модулями сдвига и Юнга, значения которых наряду с другими физическими характеристиками хранятся в базе данных. Поэтому, подставив в модель характеристики выбранных материалов, можно протестировать полученный композит.

где переменное напряжение  $\tau$ , приводящее к разрыву нанотрубок и основного материала, задается в диапазоне 0,2–1,4 МПа,  $\Delta \varepsilon$  — изменение относительной деформации. Количество нанотрубок в композите измеряется их процентной долей от общего объема материала, называется концентрацией и принимает значения: 0,5; 1; 2%.

Созданное программное средство позволяет получить и проанализировать ряд характеристик композитного материала. На рис. 3 показана зависимость коэффициента рассеивания энергии  $\eta$  от разных значений критического давления, когда концентрация нанотрубок равна 0,5%, а относительная деформация равна 0,002 нм. Критическое давление изменяется от 0,2 МПа до 1,4 МПа. По рисунку можно проследить, что до 0,8 МПа с ростом критического давления увеличивался и коэффициент рассеивания, а значит, и прочность материала, затем коэффициент рассеивания начал резко падать. Из этого можно сделать вывод, что нанотрубки терпят разрыв с основным материалом, после чего растягиванию подвергается только резина. На рис. 4 показана зависимость коэффициента

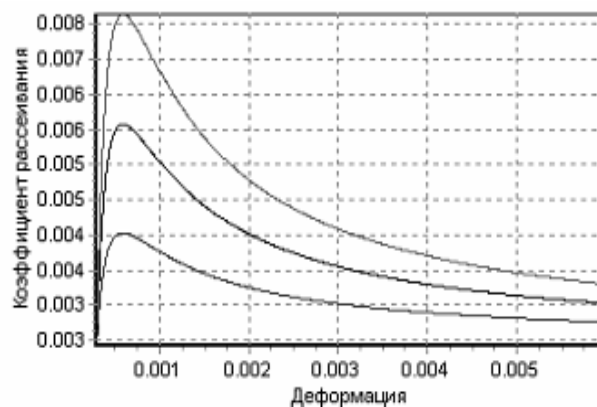


Рис. 4. Зависимости коэффициента рассеивания энергии от концентраций нанотрубок и деформации материала

Так, например, было получено, что у алюминия, укрепленного нанотрубками с концентрацией, равной 1%, способность понижать колебания увеличилась в 2,5 раза.

### Заключение

Корректность результатов выполненной работы подтверждена экспериментальными данными, полученными в Пенсильванском университете [6], поскольку при одинаковых исходных данных программное средство, созданное на основе предложенной модели, и эксперимент показали близкие результаты. В ходе проведенных над моделью испытаний были сделаны следующие выводы:

внедрение в материал нанотрубок способно значительно понизить его колебания;

демпфирование материала зависит от его деформации, критического напряжения и концентрации нанотрубок в нем;

при использовании нанотрубок меньшего радиуса уровень демпфирования материала повышается.

Таким образом, разработанная модель и созданное на ее основе программное средство могут быть использованы для изучения и оценки свойства демпфирования различных композитов. С другой стороны, предложенный способ позволяет получить заданный уровень демпфирования технической системы путем качественного и количественного подбора входящих в нее материалов. Однако следует отметить, что в процессе построения модели были допущены некоторые упрощения. Во-первых, сделано предположение о том, что критическое напряжение деформации и разрыв наступают одновременно для всех нанотрубок, хотя на практике момент отрыва нанотрубки является вероятностной функцией Вейбула от напряжения деформации. Во-вторых, в модели композит подвергался деформации только в одном направлении, что значительно упростило все расчеты. В дальнейшем предполагается снять все ограничения и рассмотреть модель в общем случае.

Работа выполнена при поддержке ИНТАС и ОИПИ НАН Беларуси в рамках проекта № 04-83-3067 под руководством профессоров В.И. Махнача (Беларусь), В. Компиша (Словакия) и Х. Альтенбаха (Германия).

## COMPUTER MODELING OF PROPERTIES MATERIALS REINFORCED CARBONE NANOTUBES

L.V. BOCHKAREVA, D.M. SANIKOVICH

### Abstract

The unique properties carbone nanotubes and composite materials created on their basis are considered. Finite element model and software are developed. They allow to investigate damping characteristics of composite materials reinforced carbone nanotubes. Composite material exposed interfacial shear stress, as to it apply external deformation. The characteristics of a material are determined which can change its damping.

### Литературы

1. *Buongiorno Nardelli M., Fattebert J.-L., Orlikowski D., et al.* // Carbon. 2000. Vol. 38. P. 1703–1711.
2. *Yao N., Lordi V.* // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 84 (4). P. 1939–1943.
3. *Cornwell C.F., Wille L.T.* // Solid State Communications. 1997. Vol. 101. P. 555–558.
4. *Kireitseu M.V., Tomlinson G.R., Hui D. et al.* // Journal of Mechanical Engineering. 2006. Vol. 57 (2) P. 95–111.
5. *Сегерлинд Л.* Применение метода конечных элементов. М., 1976.
6. *Zhou X., Shin E., Wang K.W., Bakis C.E.* // Composites Science and Technology. 2004. Vol. 71. P. 1825–1831.