

ВИЗНАЧЕННЯ МОДУЛЯ ПРУЖНОСТІ ОДНОШАРОВИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК МЕТОДАМИ СТРУКТУРНОЇ МЕХАНІКИ

¹Карвацький А.Я., *д.т.н., професор, с.н.с.*, ¹Мікульонок І.О., *д.т.н., професор, с.н.с.*, ²Лазарєв Т.В., *к.т.н.*, ¹Короленко К.М., *магістрант*

¹¹Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

²ДП «Конструкторське Бюро «Південне» ім. М.К. Янгеля

Вуглецеві нанотрубки, і зокрема одношарові вуглецеві нанотрубки (ОВНТ)/(SWCNT), з моменту їх відкриття в 1991 р. Iijima [1], набули широкого застосування в різних галузях науки і техніки. Завдяки своїм унікальним механічним, тепловим та електричним властивостям ОВНТ характеризуються винятково високою жорсткістю, міцністю і пружністю, і зазвичай використовуються як ідеальний армувальний матеріал для принципово нового класу нанокомпозитів [2], у тому числі й полімерних.

Для дослідження фізичних властивостей ОВНТ, зокрема механічних, застосовуються як експериментальні, так і теоретичні методи. Експериментальні методи характеризуються надзвичайною складністю проведення досліджень, розбіжністю одержуваних даних, великою вартістю тощо. Тому застосування теоретичних методів для прогнозування механічних властивостей ОВНТ, які є набагато менш затратними, набуває широкого поширення серед дослідників як потужний альтернативний інструмент порівняно з експериментальними методами. У свою чергу, застосовувані теоретичні методи поділяються на два підходи: перший – це квантова/молекулярна механіка, класична молекулярна динаміка і *ab initio*; другий – механіка суцільного середовища з використанням енергетичних потенціалів і силових коефіцієнтів молекулярної механіки. Наразі, для моделювання наноструктур беззаперечно перевагу має підхід наномасштабної континуальної або структурної механіки, у частині незрівнянно менших вимог до обчислювальних ресурсів [3].

Зазвичай числова реалізація континуального підходу до прогнозування механічних властивостей ОВНТ виконується методом скінченних елементів з використанням пружинних (spring) або стрижньових/балочних (beam) скінченних елементів у лінійному або нелінійному формулюванні. При цьому вважається, що під навантаженням ОВНТ проявляє властивості просторово-стрижньової структури. Ковалентні зв'язки між атомами вуглецю розглядаються як з'єднувальні силові елементи, а атоми вуглецю – як шарніри цих елементів.

Проблемі прогнозування механічних властивостей ОВНТ на базі континуального підходу присвячена велика кількість праць. Проте жодна з них не надає числової методики для визначення механічних властивостей ОВНТ як потужного інструменту їх теоретичного прогнозування. Тому саме завдання оволодіння цим інструментом і було поставлено авторами як мету досліджень.

Отже метою проведених авторами досліджень було відпрацювання та перевірка числових методик визначення модуля пружності ОВНТ з використанням методу скінченних елементів та зв'язку між параметрами молекулярної механіки та структурної механіки, що є необхідним для подальшого їх застосування для розробки нових нанокомпозитів.

Для досягнення сформульованої мети необхідно було вирішити такі задачі:

- побудова просторово-каркасних моделей ОВНТ різної хіральності;
- формулювання лінійних та нелінійних співвідношень для визначення параметрів структурної механіки на основі енергетичних потенціалів і силових коефіцієнтів молекулярної механіки;
- розробка числових моделей для дослідження модуля пружності ОВНТ різної хіральності та діаметра;
- порівняння отриманих результатів механічних властивостей ОВНТ з відомими теоретичними та експериментальними даними.

Результати аналізу проведених авторами досліджень дають змогу зробити такі висновки.

1. Розроблено програмні коди для побудови просторово-каркасних моделей ОВНТ різної хіральності з використанням вільно відкритого програмного забезпечення Gmsh.

2. Розглянуто формулювання лінійних і нелінійних співвідношень для визначення параметрів структурної механіки на основі енергетичних потенціалів та силових коефіцієнтів молекулярної механіки. Формулювання нелінійної задачі дістали певного уточнення в частині визначення співвідношень «узагальнена деформація – узагальнені напруження».

3. Розроблено числові моделі для дослідження модуля пружності ОВНТ різної хіральності та діаметра, що представляють собою макроси на мові програмування APDL ANSYS Mechanical APDL.

4. Результати порівняння отриманих результатів з механічних властивостей ОВНТ показали задовільне узгодження з теоретичними та експериментальними даними: розбіжність з відомими теоретичними оцінками становить 0,08–5,1 %; діапазон розкиду експериментальних даних 1–1,2 ТПа охоплює більшість з отриманих теоретичних результатів.

5. Верифіковані числові методики для визначення модуля пружності ОВНТ у подальшому планується застосовувати для розроблення нових полімерних нанокомпозитів.

Література:

1. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature*. 1991. N 354. P. 56–58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>.
2. Lau K.-T., Hui D. The revolutionary creation of new advanced materials – carbon nanotube composites // *Composites Part B: Engineering*. 2002. Vol. 33. P. 263–277.
3. Lu X., Hu Z. Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling // *Composites. Part B: Engineering*. 2012. Vol. 43, N 4. P. 1902–1913. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.02.002>.