

УДК 539.372

© *О. И. Евстафьев, С. П. Копысов***МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА
С ШУНГИТОВЫМ НАПОЛНИТЕЛЕМ¹**

Рассматривается молекулярно-динамическая модель деформирования наноконпозиционного материала с шунгитовым наполнителем.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, наноконпозиты, шунгит, прогнозирование физико-механических характеристик.

Введение

Рассматривается молекулярно-динамическая (МД) модель шунгитонаполненного композита. Интерес к использованию шунгитового наполнителя вызван следующим обстоятельством: доступностью шунгитовых пород и высоким содержанием в них углерода до 97 – 99%.

1. Представления о структуре шунгита

Шунгит — природное фуллереноподобное, неграфитирующееся углеродистое вещество. Существующие в настоящее время представления о структурном состоянии фуллереноподобных форм углерода являются весьма противоречивыми [1]. Основной единицей надмолекулярной структуры шунгита является глобула — плавно изогнутые пакеты углеродных слоев. Молекулярная структура шунгита характеризуется графитоподобным структурным порядком с увеличенными по сравнению с графитом межсечеточными расстояниями.

2. Модель шунгита

На основании имеющихся данных, шунгитовый наполнитель моделировался пакетом из 5 гексагональных дефектных графитоподобных углеродных сеток, случайно развернутых относительно друг друга и содержащих от 397 до 422 атомов углерода.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 07-01-96069-р урал).

3. Модель нанокompозита

Математическая модель полимерного нанокompозита состояла из пакета шунгитового наполнителя, окруженного 31 макромолекулой полиэтилена по 1100 мономерных единиц в каждой, что соответствовало 5% степени массового наполнения. Для получения равновесного состояния исследуемой системы при нормальных условиях $T = 300\text{K}$, $P = 10^5\text{Па}$ потребовалось $t = 1200\text{пс}$, что при численном моделировании составило 600000 шагов, с шагом по времени $\Delta t = 0.002\text{пс}$ или порядка 70 часов счетного времени на шести процессорах кластера Paraclete ИПМ УрО РАН. При релаксации до равновесного состояния контролировались энергетические и термодинамические параметры молекулярной системы композита.

4. Модель деформирования композита

Моделировались три различные схемы деформирования нанокompозита: одноосное растяжение параллельно углеродным сеткам; одноосное растяжение в направлении поперечном сеткам; нагружение образца внешним давлением для определения упругих характеристик нанокompозита по методике, предложенной в статье [2]. При моделировании одноосного растяжения композита использовался канонический МД-ансамбль NVT , моделирование нагружения материала внешним давлением осуществлялось в МД-ансамбле NPT . Для анализа напряженно-деформированного состояния материала использовался тензор вириальных напряжений и его инварианты.

На рис. 1, 2 приведены некоторые результаты МД-моделирования механического поведения полимерного нанокompозита с шунгитовым наполнителем. Из зависимостей главного напряжения σ_i в направлении растяжения от времени видно, что нанокompозит с шунгитовым наполнителем проявляет выраженную анизотропию механического поведения. Кроме того, из анализа результатов моделирования деформирования образцов можно сделать вывод, что участки макромолекул в непосредственной близости от частицы шунгита испытывают меньшие деформации, чем в глубине полимерной матрицы, где появляются фрагменты полимерных цепей, ориентированные в направлении растяжения.

Получены эффективные упругие характеристики материала (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль объемного сжатия). Проведено сравнение полученных характеристик с другими композитами и полимерами.

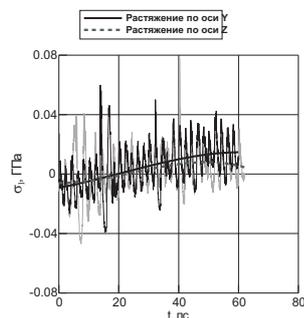


Рис. 1. Зависимость σ_i при различных схемах деформирования

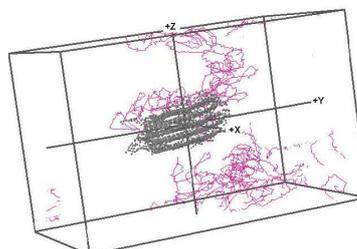


Рис. 2. Структура нанокompозита при растяжении (деформация 25%) вдоль углеродных сеток

* * *

1. Ковалевский В. В. Углеродистое вещество шунгит: Структура, генезис, классификация: Автореф. дис. ... д-ра геолог.-мин. наук. Сыктывкар: Ин-т геологии УрО РАН, 2007. 37 с.
2. Евстафьев О. И., Копысов С. П. Определение эффективных упругих характеристик полимерных нанокompозитов при циклическом деформировании // Химическая физика и мезоскопия. 2007. Т. 9, № 4. С. 377-383.

Поступила в редакцию 15.02.08

O. I. Evstafiev, S. P. Kopysov

Molecular dynamic modelling of the structure and behavior for nanocomposites with shungit

A method of molecular-dynamic modelling is proposed for forecasting the structure and physical-mechanical behaviour of polymer nanocomposites with Shungit and for estimating the effective characteristics.

Евстафьев Олег Иванович
Институт прикладной механики
УрО РАН,
426067, г. Ижевск,
ул. Т. Барамзиной, 34
E-mail: ole1965@gmail.com

Копысов Сергей Петрович
Институт прикладной механики
УрО РАН,
426067, г. Ижевск,
ул. Т. Барамзиной, 34
E-mail: s.kopysov@gmail.com