

ХІМІЧНА ІНЖЕНЕРІЯ

УДК 678.019.3

ГОНДЛЯХ О. В., МАМЧУР О. В.*
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

ОСОБЛИВОСТІ ТРІЩИНОУТВОРЕННЯ В СИСТЕМІ «НАНОТРУБКА-ПОЛІМЕР» ЗА УМОВ ЇЇ АСИМЕТРИЧНОГО НАВАНТАЖЕННЯ

В даний час елементи конструкції з полімерних і гумових матеріалів набули широкого застосування в різних галузях машинобудування. Одним із провідних напрямів покращення властивостей таких елементів є процедура їх зміцнення шляхом наномодифікації вуглецевими нанотрубками. Аналіз літературних джерел дозволяє стверджувати, що процес наномодифікації є надійним інструментом підвищення параметрів міцності та тріщиностійкості полімерних виробів.

Метою даної роботи є побудова та чисельна реалізація моделі для фізичного прогнозування властивостей наномодифікованих матеріалів з метою визначення параметрів міцності наномодифікованих об'єктів. Для аналізу механізмів утворення та поширення дефектів на нано-, мікро- та макрорівнях використано метод дискретно-віртуального просування тріщин, який дозволяє ефективно досліджувати міцність просторових систем полімерних нанокомпозитів.

В результаті проведених чисельних експериментів встановлено, що процес витягування вуглецевої нанотрубки, яка знаходиться під дією асиметричного навантаження, супроводжується складним процесом накопичення дефектів, який залежить від зміни умов навантажень та суттєво впливає на еволюційну схему руйнування нанокомпозиту.

Розроблені методи дозволяють достовірно оцінити міцність наномодифікованих полімерних матеріалів і можуть бути використані при розробці та впровадженні систем інформаційного забезпечення їх життєвого циклу елементів машинобудівного обладнання.

Ключові слова: руйнування, дефекти, нанотрубка, наномодифікація, каучук, полімери, метод скінченних елементів

DOI: 10.20535/2617-9741.4.2022.269740

*Corresponding author: oleksandr.mamch@gmail.com

Received 21 November 2022; Accepted 9 December 2022

Постановка проблеми. Вироби та елементи конструкцій з полімерних і гумових матеріалів набули широкого застосування в різних галузях промисловості таких як: машинобудування, літакобудування, суднобудування, автомобільна промисловість, будівництво та інших. В основному такими об'єктами є різні види конструкцій виконаних з полімерних нанокомпозитів, таких як: елементи сонячних панелей, препреги, антирадіолокаційні та антистатичні захисні панелі, каталітичні нейтралізатори, втулки та фільтри [1], автомобільні шини, амортизатори та ущільнювачі [2] і т.д. Такі конструкції як правило працюють в складних експлуатаційних умовах при циклічних силових і температурних навантаженнях, в агресивних кислотних і лужних середовищах, під дією сонячного і радіаційного впливу. Тому до матеріалів, з яких виготовлені ці відповідальні конструкції, пред'являються підвищені вимоги фізико механічних, експлуатаційних характеристик та параметрів їх міцності та надійності.

Покращення властивостей полімерів в основному виконується шляхом модифікації різними наповнювачами. Одним із провідних напрямів розробки сучасних матеріалів є процедура підвищення їх фізико-механічних властивостей та параметрів міцності шляхом наномодифікації вуглецевими нанотрубками (ВНТ).

Вирішення цієї задачі є особливо актуальним для забезпечення міцності та надійності автомобільних шин, виготовлених з наномодифікованої гуми. Однак, як свідчать дані з літературних джерел, повна

наномодифікація шин призводить до 10%-го збільшення їх загальної вартості в порівнянні з їх не наномодифікованими аналогами. Тому для зменшення витрат на їх виробництво потрібно чітко розуміти всі переваги які дає процес наномодифікації для подальшої експлуатації цих виробів. При вирішенні цієї задачі особливу увагу необхідно приділяти можливому виникненню процесів деградації наномодифікованих полімерів та гуми, що відбувається на макро-, мікро- та нанорівнях з точки зору формулювання основних положень єдиної фізичної моделі опису поведінки наномодифікованих полімерних структур, що являє собою ціль даної роботи.

Аналіз попередніх досліджень. Існує велика кількість публікацій присвячених дослідженню характеристик полімерних матеріалів наномодифікованих вуглецевими нанотрубками.

Аналіз публікацій, присвячених цій темі, свідчить про те, що на протязі останніх 30-ти років дослідження в цій сфері проводяться по таким напрямкам, як:

- експериментальні методи визначення фізико-механічних властивостей широкого спектру наномодифікованих полімерів та композитів на їх основі [3-5,8-9];
- впровадження наномодифікованих матеріалів в практику конструювання та проектування полімерних виробів [10-14];
- розробка уточнених моделей взаємодії вуглецевих нанотрбок (ВНТ) з полімерною матрицею на базі двохшарових схем «нанотрубка – полімер» [15-16], а також трьохшарові схеми «нанотрубка - контактний шар - полімер» [17-19].

З великого числа експериментальних досліджень [3] відомо, що введення вуглецевих нанотрбок в матрицю полімера від 0,5% до 1,0% по масі призводить до підвищення їх фізико-механічних характеристик, властивостей міцності та збільшення стійкості до зношування.

Для забезпечення надійного з'єднання нанотрубки з масивом полімеру в літературі розглянуто велику кількість методів функціоналізації ВНТ [4]. Детальний розгляд цієї проблеми необхідно виконувати для того, щоб забезпечити надійне приєднання різних функціональних груп, або частинок до поверхні цих вуглецевих нанотрбок. Коректне вирішення цієї проблеми дозволяє синтезувати високоефективні полімерні наноккомпозити, виявити вплив функціоналізації на вуглецеві наночастинки, та застосувати методи синтезу полімерних наноккомпозитів з вуглецевими наночастинками в якості нанонаповнювачів.

Аналіз літературних джерел свідчить про те, що велика увага авторів в даний час також приділяється питанням вивчення причин зародження і розповсюдження дефектів у наноармонічних полімерних та гумових матеріалах, особливостям впливу дефектів на характеристики наноструктур при навантаженнях та високих температурах встановлено, що механічні властивості як початкових, так і дефектних наноструктур знижуються зі збільшенням температури та розмірів дефектів [5].

Останнім часом при проектуванні складних конструкцій з полімерних матеріалів часто використовується метод 3D-прототипування. Нижче приведені найбільш поширені види 3D друку які зараз застосовуються в практиці конструювання [6, 7]:

- моделювання методом наплавлення (Fused Deposition Modeling, FDM);
- лазерна стереолітографія (Laser Stereolithography, SLA);
- селективне лазерне спікання (Selective Laser Sintering, SLS);
- селективне лазерне плавлення (Selective Laser Melting, SLM);
- пряме лазерне спікання металу (Direct Metal Laser Sintering, DMLS);
- вибіркоче теплове спікання (Selective Heat Sintering, SHS);
- виготовлення об'єктів за допомогою ламінування (Laminated Object Manufacturing, LOM);
- метод багатоструминного моделювання (Multi Jet Modeling, MJM);
- електронно-променеє плавлення (Electron-beam Melting, EBM);
- кольоровий струминний друк (Color Jet Printing, CJP);
- цифрова світлодіодна проекція (Digital Light Processing, DLP).

У всіх цих методах може застосовуватись не тільки стандартні полімерні матеріали для даних технологій, а також їх наномодифіковані аналоги.

Метод 3D друку використовується для виготовлення експериментальних зразків для дослідження характеристик наномодифікованих матеріалів. В цих технологіях використовуються одноступінні та багатоступінні вуглецеві нанотрубки, графенові нанопластили та комбінації різних наповнювачів. Отримані експериментальні дані дозволяють зробити висновок про ефективність та перспективність цього напрямку досліджень [8].

Ще одним напрямком в дослідженнях на цю тему є розробка технологій виробництва та способів наномодифікованих композитних матеріалів, які приведені в змістовних оглядах [1, 9]. В огляді [1] описують сучасні проблеми використання, розвитку та виготовлення композитних полімерних матеріалів, а огляд [9] містить відомості про еластомери, способи їх виробництва, мікро- та наномодифікацію, а також відомості про композити на їх основі.

В якості застосування нанополімерів та способів виробництва з них елементів конструкцій слід відзначити, наприклад, такі об'єкти як: нанокompозитні мембрани, які використовуються для очищення стічних вод і газо розділення [10], хімічні сенсори [11], елементи для сонячних панелей [12], ущільнювачі [13], наномодифікована асфальтобетонна суміші [14].

Невирішеною частиною наукової проблеми в роботах [3-5, 8-14] є те, що в більшості для застосування виробів, деталей, або технологій потрібно детально розуміти як буде поводитись наномодифікований полімер в різних умовах, а експериментальні методи дослідження не дають нам змоги достовірно спрогнозувати поведінку таких матеріалів в великому спектрі зовнішніх умов.

Для визначення характеристик полімерних композитів в випадку їх наномодифікації перспективним є використання методів молекулярної динаміки. Ці методи дозволяють аналізувати такі тонкі моменти деформування системи «нанотрубка-композит», включаючи аналіз міжфазної передачі навантаження, зміни властивостей з урахуванням пошкоджень в нанотрубках, властивості агломератів з нанотрубок у полімерній матриці за допомогою моделювання взаємодії окремих молекул полімера між собою та з нанотрубкою. Моделювання проводиться як правило на моделях періодичних елементарних комірок нанокompозиту з вуглецевою нанотрубкою та матрицею з аморфного полімеру [15-19].

Окремим розділом механіки наномодифікованих композитів є розробка та використання уточнених моделей взаємодії ВНТ з полімерною матрицею на базі двошарових та трьохшарових схем з подальшою перевіркою точності розрахунків методом порівняння даних числових та натурних експериментів дозволяють прогнозувати характеристики об'єктів та виробів з наномодифікованих полімерних матеріалів [16].

Існує велика кількість методів дослідження фізико-механічних характеристик наномодифікованих полімерів, для яких розробляють уточнені моделі взаємодії вуглецевих нанотрубок (ВНТ) з полімерною матрицею на базі двошарових схем «нанотрубка – полімер» [15-16] та трьохшарових схеми «нанотрубка - контактний шар -полімер» [17-19]. На базі цих моделей також виконуються розрахунки прогнозних оцінок фізико-механічних властивостей та параметрів міцності наномодифікованої гуми.

Моделювання процесів нелінійної деформації нанотрубок у полімерній матриці є дуже нетривіальним і призводить до необхідності використання чисельних методів, серед яких найбільшого поширення набув метод скінченних елементів (МСЕ) [22]. На базі цього методу ефективно виконується чисельне моделювання утворення та накопичення дефектів, механізмів процесів руйнування на межі розділу на контакті «нанотрубка – матриця» [15-18].

Проведення чисельних експериментів моделювання процесів руйнування та розшарування наномодифікованої гуми [18], дозволяє впевнено сказати, що чисельні методи розрахунку є достовірними та співпадають з значеннями експериментальних досліджень.

Однак, аналіз наукових джерел [15-18] які присвячені проблемі визначення властивостей полімерів наномодифікованих вуглецевими нанотрубками чисельними методами проводиться, як правило, з розрахунковими моделями в яких напрямок дії навантаження співпадає з напрямком осі нанотрубки.

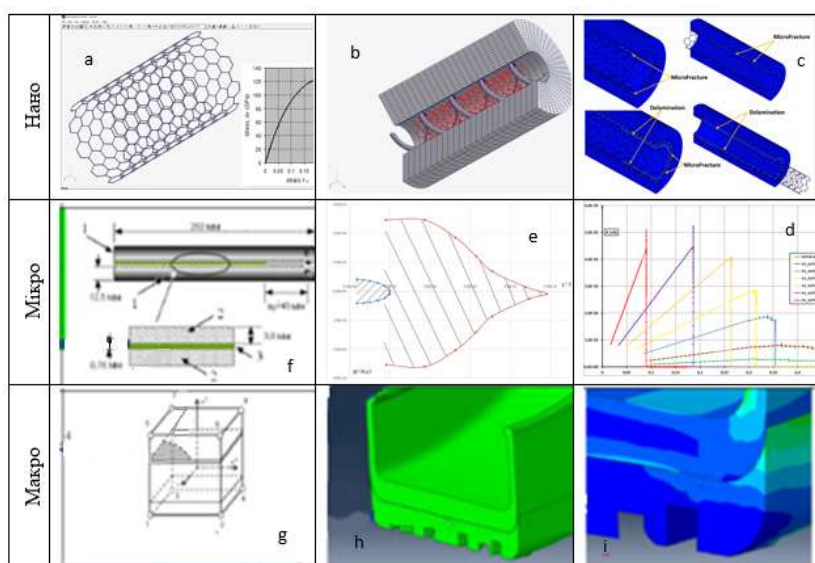
Метою статті є дослідження параметрів тріщиностійкості наномодифікованих матеріалів які знаходяться в умовах складного напруженого стану, побудова та чисельна реалізація цієї моделі з метою визначення параметрів міцності об'єктів з наномодифікованих полімерів.

Методика роботи. Для аналізу механізмів утворення та поширення дефектів на нано-, мікро- та макрорівнях використано метод дискретно-віртуального просування тріщин, який дозволяє ефективно досліджувати міцність просторових систем полімерних нанокompозитів.

Процес витягування вуглецевої нанотрубки в цій роботі здійснюється навантаженням від вимушених зміщень під різними кутами до вісі нанотрубки.

Для проведення коректного моделювання процесу накоплення дефектів на нонорівні проведено адаптацію загальних положень методу дискретно-віртуального розповсюдження дефектів на мікрорівні. Особливістю цього методу є те, що він базується на представленні реального фронту дефекту не тільки у вигляді його дискретного скінченно-елементного аналога, а також і на основі віртуального представлення фронту руйнування. (рис. 1) [19].

Такий підхід дає змогу повністю врахувати всю історію розвитку процесу руйнування елементу наномодифікованої конструкції, починаючи з оцінки деформівного стану окремої нанотрубки (рис.1,a), репрезентативного елементу об'єму (PEO) наноконструкції (рис.1,b, c). Ефективність цього методу полягає в тому, що на його базі вдається коректно фізично обґрунтоване моделювання накопичення навіть найменших приростів зруйнованих ділянок, та адекватно коригувати відповідну дискретну модель на кожному етапі просування зони ураження (рис.1,d, e). Верифікація чисельних результатів отриманих в рамках цієї моделі здійснюється шляхом порівняння отриманих фізико-механічних характеристик з даними експерименту (рис. 1, f). На основі цієї теорії в [17] розроблено уточнений скінченний елемент, який дає змогу моделювати ефекти накопичення нанопшкоджень залежно від рівня компонент напруженого стану наномодифікованого полімера (рис. 1, g). Крім цього даний підхід дозволяє розробити єдиний алгоритм для здійснення коректного переходу для оцінки напружено деформівного стану наномодифікованих конструкцій з нанорівня на мікро- та на макрорівні (рис. 1, h, i).



a – визначення фізико-механічних властивостей нанотрубок; b – визначення фізико-механічних властивостей репрезентативного елементу об'єму; c, d, e – чисельне визначення параметрів міцності; f – експериментальні дослідження міцності наноармованого полімеру; g – скінченний елемент з віртуальним фронтом дефекту; h, i - аналіз міцності наномодифікованих об'єктів

Рис. 1 – Етапи дослідження напружено-деформівного стану наномодифікованих полімерних конструкцій

Моделювання процесів руйнування в матриці наномодифікованого полімеру в цій роботі трактується як набуття матеріалом специфічних анізотропних властивостей у певній локальній зоні матеріалу за рахунок перерозподілу напружень внаслідок впливу тріщин на напружено-деформівний стан конструкції. Характерною особливістю даної методики є фізично обґрунтована корекція тензора фізико-механічних констант зони руйнування на основі гіпотез, прийнятих залежно від типу руйнування, відриву, зсуву чи зминання [21]. Чисельне моделювання процесів пластичного деформування матеріалу та зминання здійснено на основі покроково-ітераційного алгоритму послідовного навантаження на основі модифікованого методу Ньютона – Канторовича. Аналіз пластичного деформування матеріалу конструкції проведено на основі положень теорії пластичної течії з трансляційним ізотропним зміцненням.

Виклад основного матеріалу. В цій роботі досліджено фізико-механічні та міцнісні характеристики автомобільної гуми. Оцінка підвищення показників міцності наномодифікованого елемента гуми в даній роботі здійснюється шляхом чисельного моделювання процесу деформування репрезентативного елементу об'єму наномодифікованого матеріалу під різними кутами навантаження для отримання кількості додаткової енергії, необхідної для виконання процесу витягування нанотрубки з гумової маси (рис. 2).

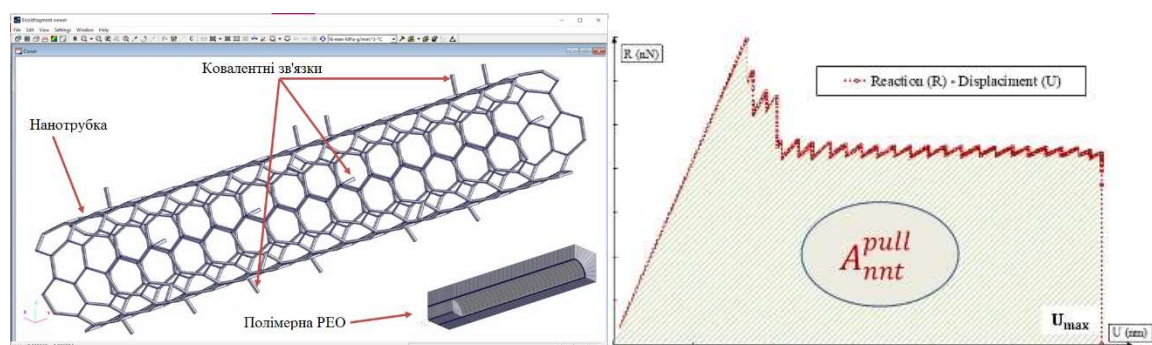


Рис. 2 – Скінченно-елементна модель нанотрубки з урахуванням ковалентних зв'язків та графік зміни реакції «R» в залежності від переміщення вузла нанотрубки «U»

Для цього в роботі розроблена тришарова модель – «нанотрубка - молекула каучуку – масив каучуку», скінченно-елементна модель якої представлена на рис. 3.

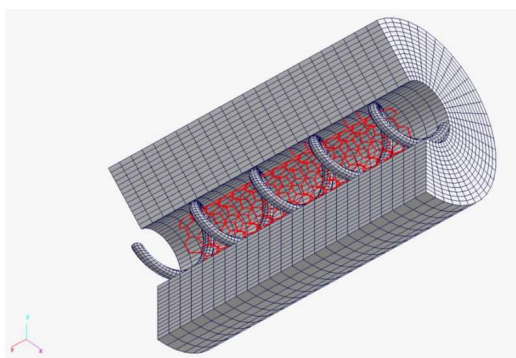
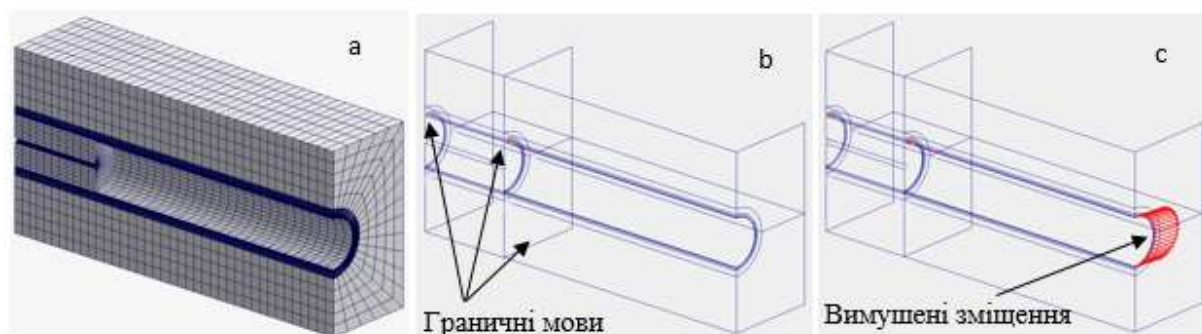


Рис. 3 – Тришарова модель – «нанотрубка - молекула каучуку - масив каучуку»

Параметризовану скінченно-елементну модель нанотрубки з урахуванням ковалентних зв'язків та молекулою каучуку створено в рамках автоматизованої системи розрахунку на міцність просторових конструкцій АПРОКС, яка розроблена на кафедрі ХПСМ НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського» (рис. 4). Розглядаються крисельна нанотрубка з хіральним числом (15, 5). Скінченно-елементна модель зразка наведена на (рис. 4, а). Граничні умови для репрезентативного елемента об'єму представлені на рис. 4b. Нанотрубка зазнає вимушених зміщень під певним кутом вздовж своєї поздовжньої осі (рис. 4с).



а - модель SE; b - граничні умови; c - умови навантаження

Рис. 4 – Розрахункова схема елементарного зразка наномодифікованого гумового елемента

На основі даної моделі проведено серію чисельних експериментів для визначення фізико-механічних властивостей репрезентативного елемента об'єму наномодифікованої гуми, а також для дослідження еволюційних процесів розповсюдження мікропошкоджень в зразку на протязі всієї історії навантаження нанотрубки аж до повного руйнування РЕО. Моделювання процесу витягування ВНТ з гуми в системі АПРОКС проводилось на основі покрокового методу Ньютона-Канторовича з урахуванням усіх типів нелінійностей, таких як фізичні та геометричні нелінійності, накопичення та поширення пошкоджень.

Досліджуються еволюційні процеси руйнування наномодифікованої гуми в залежності від зміни кута дії вимушених зміщень відносно продольної осі нанотрубки. Результати розрахунку приведені на рис. 5-7, 9-10.

В результаті аналізу виконаних чисельних експериментів встановлено той факт, що процес руйнування наноармованих полімерів, які знаходяться в умовах складного напруженого стану, залежить від багатьох факторів, та може змінюватись не тільки кількісно, але й якісно.

Також потрібно зауважити, що схема руйнування при куті 0° являється симетричною, а при інших кутах розподіл напружень відрізняється завдяки переміні знаку компонент напружено-деформівного стану РЕО (стиснення в верхній зоні контакту нанотрубки з каучуком та розтягування знизу).

Так при зміні кута навантаження нанотрубки в діапазоні від 0° до 30° еволюційний процес руйнування системи «нанотрубка- масив каучуку» проходить в чотири етапи.

На першому етапі (рис. 5а) виникає локальна зона відшарування від гумової маси на торці нанотрубки протилежному від зони прикладення вимушених зміщень. Внаслідок перерозподілу напружень після утворення цих зон розшарування починається другий етап, який характеризується поступовим зменшенням ковалентної взаємодії «нанотрубка-каучук» за рахунок накопичення дефектів в адгезивному шарі (рис. 5б).

Для третьої стадії руйнування характерне поступове накопичення дефектів за рахунок чого зменшується жорсткість РЕО та збільшується зона розшарування в адгезивному шарі (рис. 5с).

На четвертому етапі відбувається повне порушення контакту нанотрубки з масивом каучуку за рахунок прогресуючого процесу руйнування адгезивного шару (рис. 5д). В результаті контакт нанотрубки з гумовою масою повністю зникає, про що свідчить різке падіння параметра реакції «R» на рис. 9.

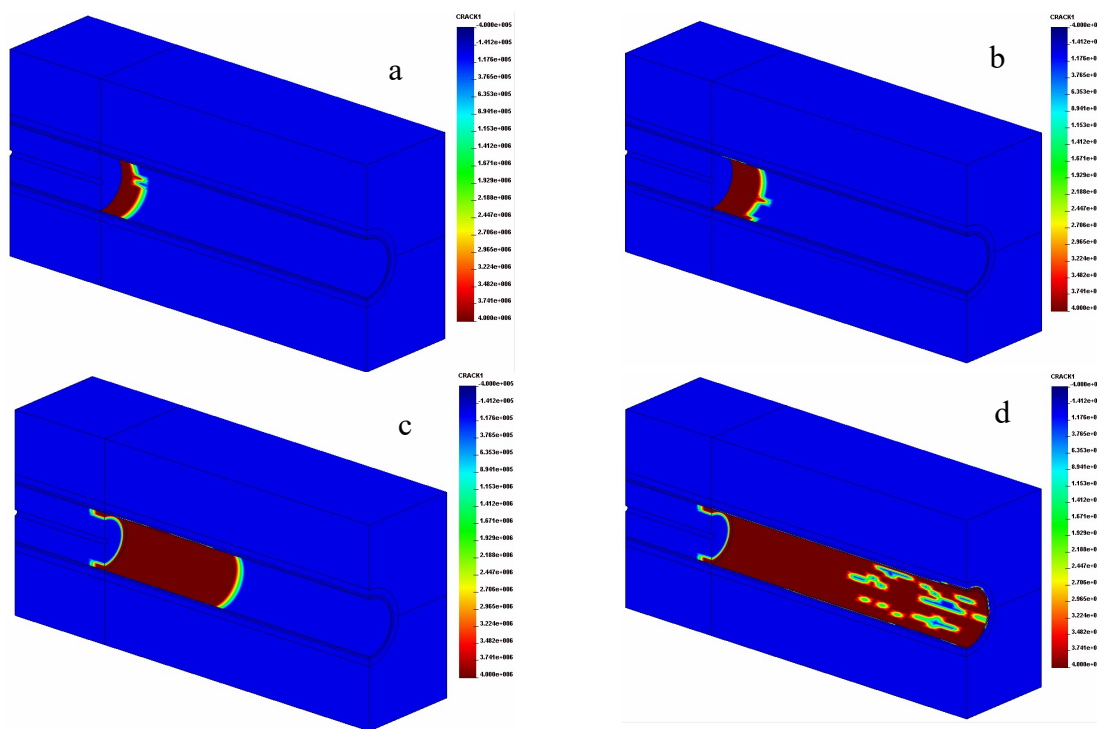


Рис. 5 – Процес витягування ВНТ з масиву каучуку, вимушені зміщення під кутом 10° до осі ВНТ

Схема руйнування при зміні кута від 30° до 60° характеризується тим, що перші два етапи руйнування за своєю якістю аналогічні етапам руйнування системи «нанотрубка-масив каучуку» при дії вимушених зміщень в діапазоні кута навантаження від 0° до 30° (рис. 6 a,b).

Третій етап відрізняється від схеми руйнування, яка була описана вище, тим, що крім розповсюдження зони відшарування вздовж осі нанотрубки з'являється, також зона руйнування в масиві каучуку (рис. 6c). Потрібно зауважити, що зони руйнування які утворюються в верхній частині контакту нанотрубки з каучуком виникають за рахунок стиснення. З протилежної сторони навпаки виникають зони відриву, які призводить до порушення контакту нанотрубки з каучуком.

Четвертий етап можна охарактеризувати повним порушенням контакту нанотрубки з масивом каучуку за рахунок прогресуючого руйнування (рис. 6d).

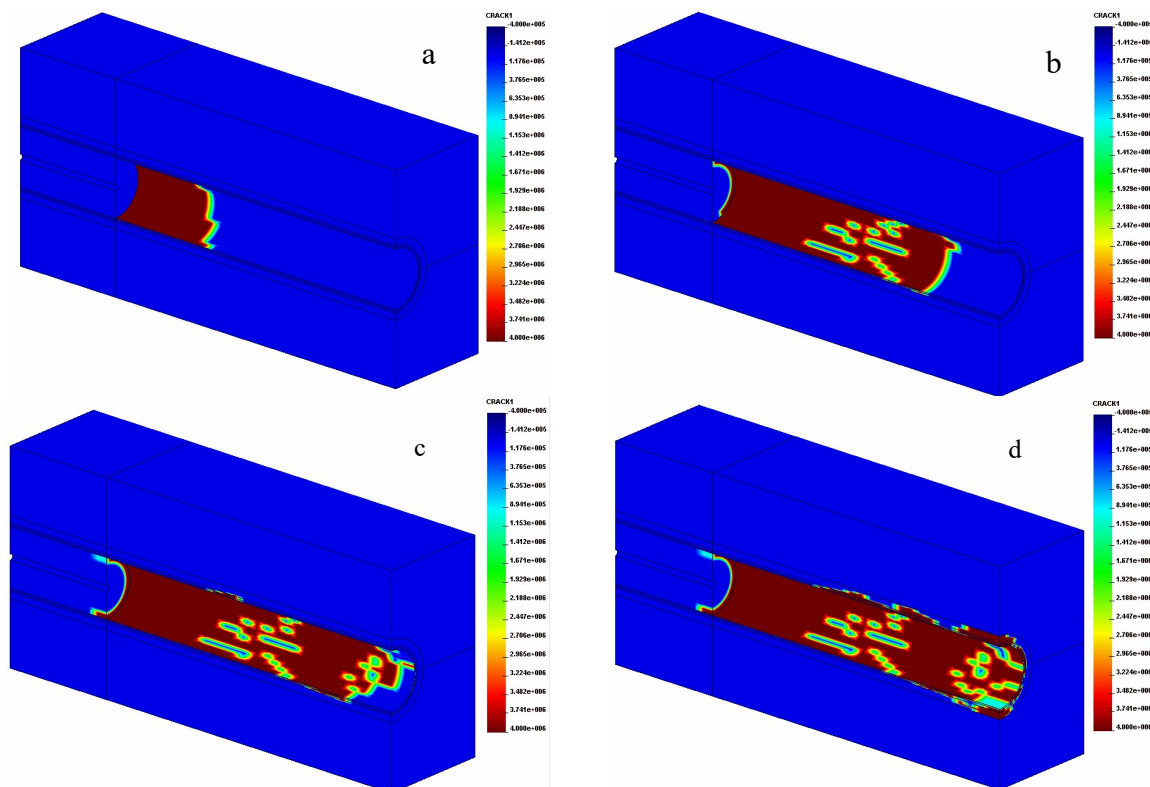


Рис. 6 – Процес витягування ВНТ з масиву каучуку, вимушені зміщення під кутом 60° до осі ВНТ

Подальший аналіз результатів виявив суттєву різницю схем руйнування системи «нанотрубка-масив каучуку» при дії вимушених зміщень від 70° до 80° . На відміну від схем руйнування під кутами дії вимушених зміщень від 0° до 60° першим етапом руйнування при таких кутах є відшарування, яке виникає з сторони торця нанотрубки до якого прикладені вимушені зміщення. Також потрібно зауважити, що напруження, які виникають при зародженні відшарування носять точковий дискретний характер (рис. 7a).

Внаслідок перерозподілу напружень починається другий етап руйнування, який характеризується появою значних зон відриву (в нижній зоні контакту нанотрубка-каучук) та зон руйнування по типу «змінання» (в верхній зоні контакту) (рис. 7b).

Характерним для третього етапу руйнування системи «нанотрубка- масив каучуку» при дії вимушених зміщень при кутах від 70° до 80° є розширення зони руйнування в масиві каучуку, а також зародження та розповсюдження зон руйнування по типу «зсув» про що свідчить характерна світла смуга на муаровій картині, приведений на рис.7c. Четвертий етап руйнування відмічається різким перерозподілом жорсткості за рахунок лавино подібного руйнування адгезивного шару, що призводить до повної втрати несучої спроможності репрезентативного елемента об'єму (рис. 7c).

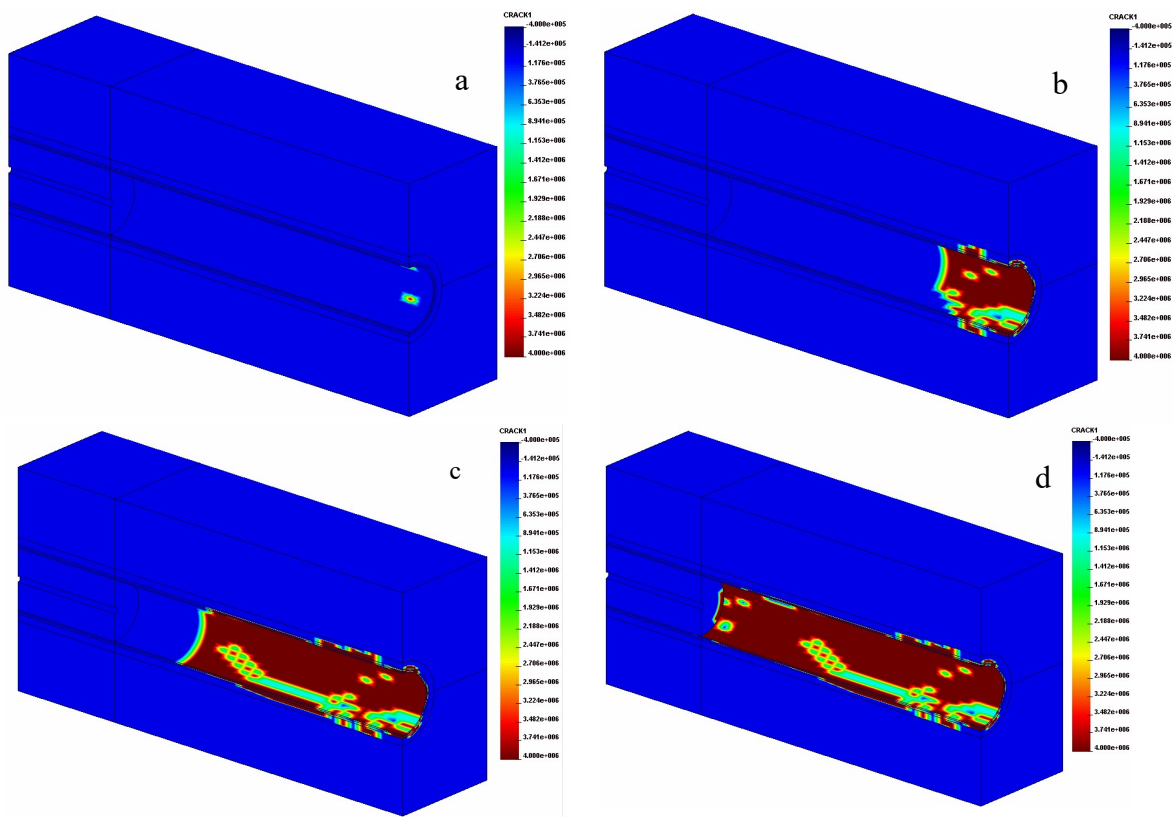


Рис. 7 – Процес витягування ВНТ з масиву каучуку, вимушені зміщення під кутом 70° до осі ВНТ

Також в цій роботі отримано графіки залежності реакцій в вузлах N1 та N2 скінченно-елементної моделі нанотрубки (рис. 8) та, які знаходяться під дією вимушених зміщень

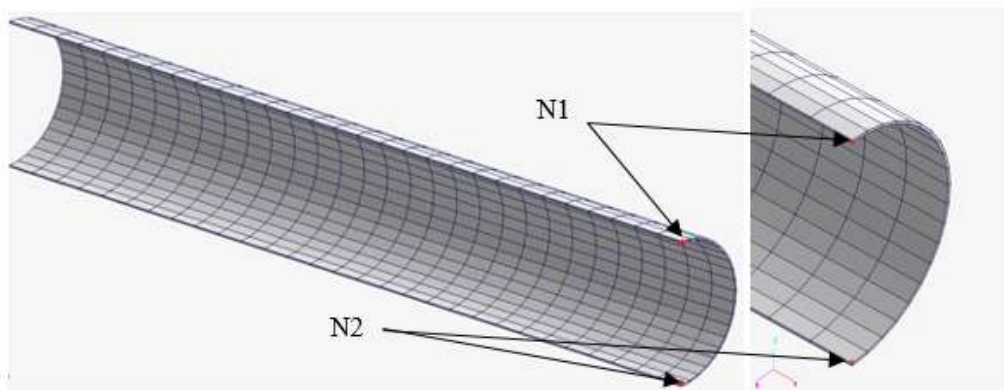


Рис. 8 – Вузли скінченно-елементної моделі на нанотрубки на яких знімаються реакції

На базі даних, отриманих в результаті чисельних експериментів, побудовано графіки залежності реакції від зміщення цих вузлів (рис.9). Аналіз цих графіків свідчить про те, що для обох точок значення графіків співпадають лише у випадку коли вимушені зміщення діють вздовж осі нанотрубки (кут 0°), оскільки у цьому випадку схеми деформування та руйнування є симетричні.

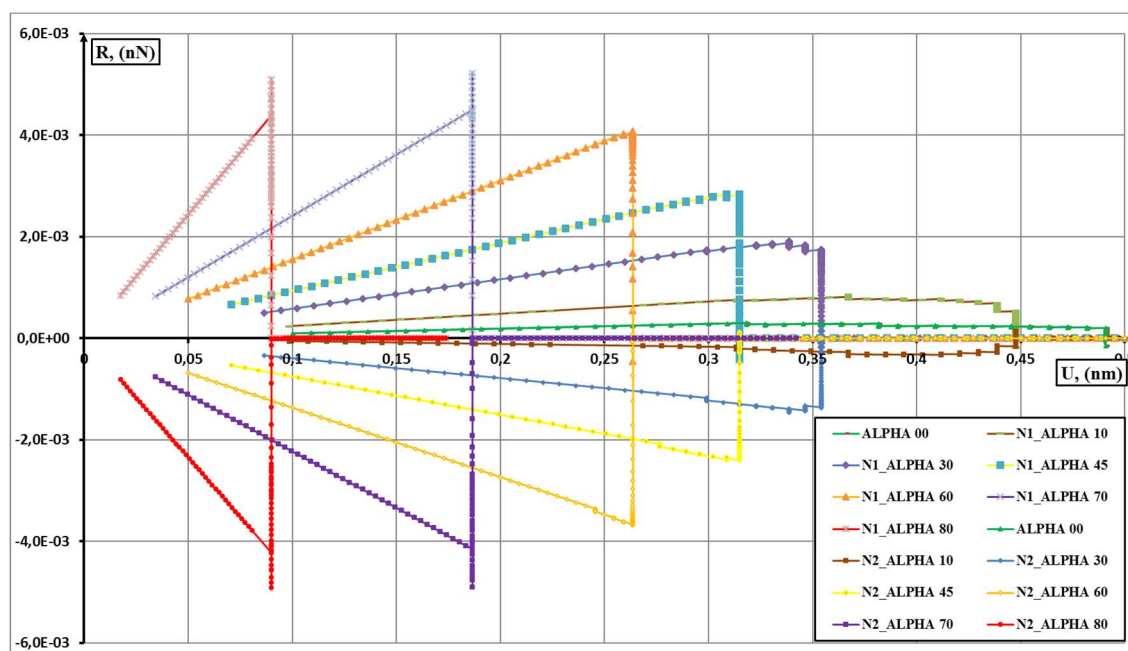


Рис. 9 – Графік залежності реакції «R» від вимушених переміщень «U» при різних кутах дії вимушених зміщень (точка N1 у першому квадранті, точка N2 у четвертому квадранті)

Подальший аналіз отриманих результатів чисельних експериментів свідчить про те, що для системи «нанотрубка-каучук» існує зона S1 де умови міцності завжди виконуються незалежно від зміни кута навантаження та цій зоні не відбувається жодних процесів руйнування (рис. 10). Також треба відмітити наявність зони часткового руйнування S2 системи «нанотрубка-каучук», що являє собою смугу між кривими Line1 та Line2, що відображає наявність часткового руйнування в системі «нанотрубка-каучук» (рис. 10). Втрата повної несучої здатності репрезентативного елемента об'єму настає у випадку коли напружено-деформівний стан в точці матеріалу досягає кривої Line2.

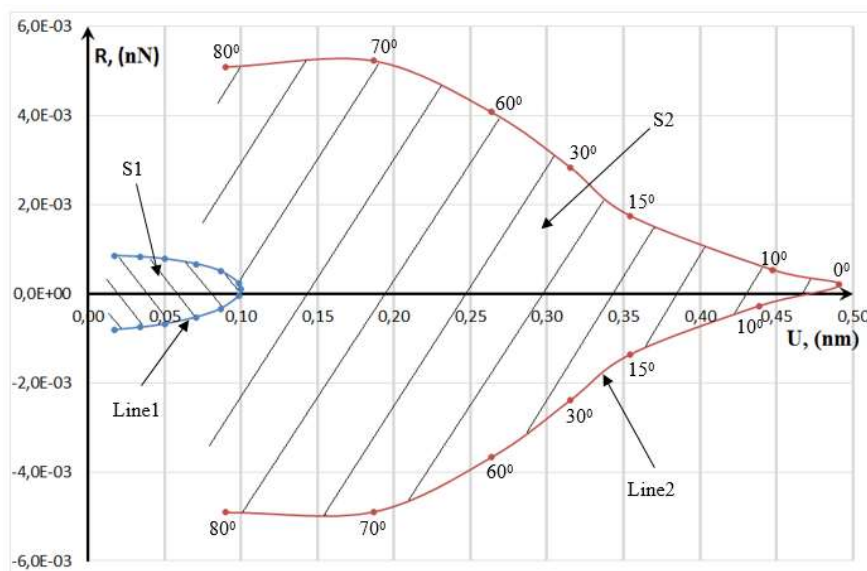


Рис. 10 – Діаграма несучої спроможності системи «нанотрубка-каучук» при різних кутах дії вимушених зміщень

Висновки. Для моделювання процесів деформації структур з наномодифікованих полімерів в рамках єдиної фізичної моделі, що описує поведінку структур наноматеріалів та поєднує взаємозв'язок процесів деградації наномодифікованих полімерів, що відбуваються на макро-, мікро- та нанорівнях, розроблено та чисельно реалізовано метод визначення фізико-механічних показників міцності машинобудівних виробів з наноармованих полімерів.

Побудовано та чисельно реалізовано модель, фізично обґрунтованого прогнозування властивостей наномодифікованої гуми з метою визначення параметрів міцності наномодифікованих об'єктів. Метод заснований на МСЕ. Встановлено, що на основі розробленого СЕ можливе детальне дослідження процесів нелінійного деформування нанотрубок і наномодифікованих полімерів.

Проведено чисельне моделювання еволюційних процесів накопичення мікродефектів у контактному шарі «нанотрубка – гума», а також виникнення макропошкоджень відшарування нанотрубки під час її витягування з гумового масиву при різних кутах дії вимушених зміщень. Побудовано діаграму несучої спроможності системи «нанотрубка-каучук» при різних кутах дії вимушених зміщень. Розроблені методи дозволяють достовірно оцінити міцність наномодифікованих полімерних та гумових елементів машинобудівного обладнання.

Перспективи подальших досліджень. Розвитком цієї роботи надалі буде аналіз фізико-механічних характеристик наномодифікованих полімерів з урахуванням стохастичного розкиду параметрів значень міцності при різних довжинах нанотрубок.

Список використаної літератури

1. Norizan M. N., M.R.M. Asyraf, Abdan K., Norli A. et al. Fabrication, Functionalization, and Application of Carbon Nanotube-Reinforced Polymer Composite: An Overview 2021, 13(7), 1047.
2. N. M. Nurazzi, F. A. Sabaruddin, M. M. Harussani et al. Mechanical Performance and Applications of CNTs Reinforced Polymer Composites—A Review, 2021, 11(9), 2186.
3. Trachevskiy, V., Kartel, M., Sementsov Y., et al . Modification of Specialty Rubbers by Carbon Nanomaterials// International Journal of Materials Science and Applications 8(6) 2019. pp. 135-135
4. Jun-Ven L., Soo-Tuen B. A Review on the Synthesis, Properties, and Utilities of Functionalized Carbon Nanoparticles for Polymer Nanocomposites 2021, 13(20), 3547.
5. Dehaghani, M.Z., Mashhadzadeh, A.H., Salmankhani, A., et al. Fracture toughness and crack propagation behavior of nanoscale beryllium oxide graphene-like structures: A molecular dynamics simulation analysis// Engineering Fracture Mechanics 2020, volume 235.
6. Aniket J., Vijay S.J., A review on 3D printing: An additive manufacturing technology// International Conference on Design, Manufacturing and Materials Engineering, 2022, pp.2094-2099.
7. Ma Quanjin, M.R.M.Rejab, M.S.Idris , Nallapaneni ManojKumar, M.H.Abdullah, Guduru RamakrishnaReddy, Recent 3D and 4D intelligent printing technologies: A comparative review and future perspective// International Conference on Computational Intelligence and Data Science, volume 167, 2020, pp. 1210-1219.
8. Giovanni S., Patrizia L., Vincenzo T., Morphological, Rheological and Electromagnetic Properties of Nanocarbon/Poly(lactic) Acid for 3D Printing: Solution Blending vs. Melt Mixing 2018, 11(11), 2256.
9. K.Song. Micro- and nano-fillers used in the rubber industry// Progress in Rubber Nanocomposites Woodhead Publishing Series in Composites Science and Engineering 2017. pp. 41-80
10. Oluranti A., Ojo S. I. F., Ayoola A. A Review on Polymer Nanocomposites and Their Effective Applications in Membranes and Adsorbents for Water Treatment and Gas Separation 2021, 11(2), 139.
11. Kong J, Franklin NR, Zhou C, Chapline MG, Peng S, Cho K, Dai H. Nanotube molecular wires as chemical sensors// Science 2000.
12. Maciej S., Małgorzata J., Katarzyna Z., Marcin S., Bartłomiej G., Carbon nanotube transparent conductive layers for solar cells applications// Optica Applicata 2011, pp. 375-381.
13. Dimoka P., Psarras S., Kostagiannakopoulou C., Kostopoulos V., Assessing the Damage Tolerance of Out of Autoclave Manufactured Carbon Fibre Reinforced Polymers Modified with Multi-Walled Carbon Nanotubes 2019 , 12 (7), 1080.
14. João V. S., Melo G. T., Evaluation of properties and fatigue life estimation of asphalt mixture modified by organophilic nanoclay// Construction and Building Materials 2017, pp. 364-373.
15. Seunghwa Y. Understanding Covalent Grafting of Nanotubes onto Polymer Nanocomposites: Molecular Dynamics Simulation Study 2021, 21(8), 2621.

16. Qiang, L., Baidurya, B. Fracture resistance of zigzag single walled carbon nanotubes// Nanotechnology, Institute of Physics 17, 2006. Pp. 1323 – 1332.
 17. Gondlyakh, A. V., Sokolskiy, A. L., Kolosov, A. E., Chemeris, A. O., Shcherbina, V. Y., Antonyuk, S.I. Modeling the Mechanisms of Fracture Formation in Nanomodified Polymers// 2020 IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), 2020, pp. 02TM06-1-02TM06-7.
 18. Gondlyakh A., Kolosov A., Scherbina V., Mamchur O., Yaroslav S.. Crack Resistance Parameters of Nano-reinforced Rubber Products in Mechanical Engineering// Advanced Manufacturing Processes III Selected Papers from the 3rd Grabchenko’s International Conference on Advanced Manufacturing Processes (InterPartner-2021), 2021. pp 272–281.
 19. Sklyut H., Kulak M. , Heinimann M., James M., Gondliakh O.V., Pashinskij R.. Automated finite element based predictions of simultaneous crack growth and delamination growth in multi-layers in advanced metallic hybrid stiffened panels using the Alcoa ASPAN-FP tool// Proceedings of the 6th International Conference on Computation of Shell and Spatial Structures IASS-IACM 2008: “Spanning Nano to Mega” 2008
 20. Sakharov, A.S., Gondlyakh, A.V., Mel'nikov, S.L., Snitko, A.N. Numerical modeling of processes of failure of multilayered composite shells// Mechanics of Composite Materials 25 (3), 1989. pp. 337–343.
 21. A. S. Sacharov, Altenbach I. Die methode der finiten elemente in der festkörpermechanik / I. Altenbach, U. Gabbert, J. Dankert, H. Köppler, S. Koczyk, A. S. Sacharov, V. N. Kislookij, V. V. Kiričevskij. Leipzig : VEB Fachbuchverlag, 1982. 480 p. <https://www.twirpx.com/file/1798167/>
-

Oleksandr Gondlyakh, Oleksandr Mamchur

PARAMETERS OF CRACK RESISTANCE OF NANOREINFORCED POLYMERIC ENGINEERING PRODUCTS

Currently, structural elements made of polymer and rubber materials are widely used in various branches of mechanical engineering. One of the leading directions for improving the properties of such elements is the procedure of strengthening them by nanomodification with carbon nanotubes. The analysis of literary sources allows us to state that the process of nanomodification is a reliable tool for increasing the parameters of strength and crack resistance of polymer products.

The purpose of this work is to build and numerically implement a model for physical prediction of the properties of nanomodified materials in order to determine the strength parameters of nanomodified objects. To analyze the mechanisms of formation and propagation of defects at the nano-, micro- and macro-levels, the method of discrete-virtual crack propagation was used, which allows for effective investigation of the strength of spatial systems of polymer nanocomposites.

As a result of the conducted numerical experiments, it was established that the process of pulling out a carbon nanotube, which is under the action of an asymmetric load, is accompanied by a complex process of accumulation of defects, which depends on the change in conditions load and significantly affects the evolutionary scheme of the destruction of the nanocomposite.

The developed methods make it possible to reliably assess the strength of nanomodified polymer materials and can be used in the development and implementation of information support systems for their life cycle elements of machine-building equipment.

Keywords: delamination zone, nanomodification, rubber, polymers, finite element method.

References

1. Norizan M. N., M.R.M. Asyraf, Abdan K., Norli A. et al. (2021), “Fabrication, Functionalization, and Application of Carbon Nanotube-Reinforced Polymer Composite: An Overview”, 13(7), 1047. <https://doi.org/10.3390/polym13071047>
2. N. M. Nurazzi, F. A. Sabaruddin, M. M. Harussani et al. (2021) “Mechanical Performance and Applications of CNTs Reinforced Polymer Composites—A Review”, 11(9), 2186.
3. Trachevskiy, V., Kartel, M., Sementsov Y., et al (2019), “Modification of Specialty Rubbers by Carbon Nanomaterials” *International Journal of Materials Science and Applications*, no 8(6), pp. 135-135. doi: 10.11648/j.ijmsa.20190806.17
4. Jun-Ven L., Soo-Tueen B (2021), “A Review on the Synthesis, Properties, and Utilities of Functionalized Carbon Nanoparticles for Polymer Nanocomposites”, 13(20), 3547. <https://doi.org/10.3390/polym13203547>

5. Dehaghani, M.Z., Mashhadzadeh, A.H., Salmankhani, A., et al (2020), “Fracture toughness and crack propagation behavior of nanoscale beryllium oxide graphene-like structures: A molecular dynamics simulation analysis”, *Engineering Fracture Mechanics*, volume 235. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.107194>
6. Aniket J., Vijay S.J. (2022), “A review on 3D printing: An additive manufacturing technology”, *International Conference on Design, Manufacturing and Materials Engineering*, pp. 2094-2099.
7. Ma Quanjin, M.R.M.Rejab, M.S.Idris, Nallapaneni ManojKumar, M.H.Abdullah, Guduru R.R. (2020), “Recent 3D and 4D intelligent printing technologies: A comparative review and future perspective”, *International Conference on Computational Intelligence and Data Science*, pp. 1210-1219.
8. Giovanni S., Patrizia L., Vincenzo T. (2018), “Morphological, Rheological and Electromagnetic Properties of Nanocarbon/Poly(lactic) Acid for 3D Printing: Solution Blending vs. Melt Mixing”, 11(11), 2256. <https://doi.org/10.3390/ma11112256>
9. K. Song (2017), “Micro- and nano-fillers used in the rubber industry”, *Progress in Rubber Nanocomposites Woodhead Publishing Series in Composites Science and Engineering*, pp. 41-80. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100409-8.00002-4>
10. Oluranti A., Ojo S. I. F., Ayoola A., et al. (2021), “A Review on Polymer Nanocomposites and Their Effective Applications in Membranes and Adsorbents for Water Treatment and Gas Separation”, 11(2), 139. <https://doi.org/10.3390/membranes11020139>
11. Kong J, Franklin NR, Zhou C, Chapline MG, Peng S, Cho K, Dai H. (2000), “Nanotube molecular wires as chemical sensors”, *Science*. doi: 10.1126/science.287.5453.622.
12. Maciej S., Małgorzata J., Katarzyna Z., Marcin S., Bartłomiej G. (2011), “Carbon nanotube transparent conductive layers for solar cells applications”, *Optica Applicata*, pp. 375-381.
13. Dimoka P., Psarras S., Kostagiannakopoulou C., Kostopoulos V.(2019), “Assessing the Damage Tolerance of Out of Autoclave Manufactured Carbon Fibre Reinforced Polymers Modified with Multi-Walled Carbon Nanotubes”, 12 (7), 1080. <https://doi.org/10.3390/ma12071080>
14. João V. S., Melo G. T. (2017), “Evaluation of properties and fatigue life estimation of asphalt mixture modified by organophilic nanoclay”, *Construction and Building Materials*, pp. 364-373. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2017.02.143>
15. Seunghwa Y. (2021), “Understanding Covalent Grafting of Nanotubes onto Polymer Nanocomposites: Molecular Dynamics Simulation Study”, 21(8), 2621. <https://doi.org/10.3390/s21082621>
16. Qiang, L., Baidurya, B. (2006), “Fracture resistance of zigzag single walled carbon nanotubes” *Nanotechnology, Institute of Physics* 17, pp. 1323 – 1332. doi: 10.1088/0957-4484/17/5/026
17. Gondlyakh, A. V., Sokolskiy, A. L., Kolosov, A. E., Chemeris, A. O., Shcherbina, V. Y., Antonyuk, S.I. (2020), “Modeling the Mechanisms of Fracture Formation in Nanomodified Polymers”, *IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties*, pp. 02TM06-1-02TM06-7.
18. Gondlyakh A., Kolosov A., Scherbina V., Mamchur O., Yaroslav S. (2021), “Crack Resistance Parameters of Nano-reinforced Rubber Products in Mechanical Engineering”, *Advanced Manufacturing Processes III Selected Papers from the 3rd Grabchenko’s International Conference on Advanced Manufacturing Processes (InterPartner-2021)*, pp 272–281. https://doi.org/10.1007/978-3-030-91327-4_27
19. Sklyut H., Kulak M., Heinimann M., James M., Gondliakh O.V., Pashinskij R. (2008), “Automated finite element based predictions of simultaneous crack growth and delamination growth in multi-layers in advanced metallic hybrid stiffened panels using the Alcoa ASPAN-FP tool”, *Proceedings of the 6th International Conference on Computation of Shell and Spatial Structures IASS-IACM 2008: “Spanning Nano to Mega”*.
20. Sakharov, A.S., Gondlyakh, A.V., Mel'nikov, S.L., Snitko, A.N. (1989), “Numerical modeling of processes of failure of multilayered composite shells”, *Mechanics of Composite Materials*, no 25 (3), pp. 337–343. <https://doi.org/10.1007/BF00614801>
21. S. Sacharov, Altenbach I. Die methode der finiten elemente in der festkörpermechanik / I. Altenbach, U. Gabbert, J. Dankert, H. Köppler, S. Koczyk, A. S. Sacharov, V. N. Kislookij, V. V. Kiričevskij. Leipzig : VEB Fachbuchverlag, 1982. 480 p. <https://www.twirpx.com/file/1798167/>.