

Устина Ильдусовна Янковская^{1*}, Александр Сергеевич Нарсеев¹, Павел Васильевич Захаров¹

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

*zalaevau@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ, АРМИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

В данной работе приведены результаты моделирования методом молекулярной динамики для оценки механических свойств композитов, армированных углеродными нанотрубками (УНТ). Представлены результаты для различных углов ориентации УНТ. Изучаются два важных фактора, влияющих на процесс одноосной деформации: скорость деформации и температура моделирования (от 300 до 900 К). Результаты показывают, что скорость деформации влияет на предел прочности при растяжении: чем ниже скорость деформации, тем ниже критические значения деформации. Растяжение при температуре 300 К приводит к более высокому пределу прочности по сравнению с моделированием при температуре 700 К.

Ключевые слова: молекулярная динамика, армирование, углеродная нанотрубка, механические свойства, Lammmps.

Ustina I. Yankovskaya, Alexander S. Narseev, Pavel V. Zakharov

RESEARCH OF MECHANICAL AND STRENGTH PROPERTIES OF METAL MATRIX COMPOSITES REINFORCED WITH CARBON NANOTUBES

This paper presents the results of molecular dynamics simulations to evaluate the mechanical properties of composites reinforced with carbon nanotubes (CNTs). Results are presented for various CNT orientation angles. Two important factors influencing the process of uniaxial deformation are studied: the tensile strain rate ($5 \times 10^{-3} \text{ ps}^{-1}$ and $5 \times 10^{-4} \text{ ps}^{-1}$) and the simulation temperature (from 300 to 700 K). The results show that strain rate influences tensile strength: the lower the strain rate, the lower the critical strain values. Tension at 300 K results in higher tensile strength compared to the simulation at 700 K.

Key words: molecular dynamics, reinforcement, carbon nanotube, mechanical properties, Lammmps.

Среди исследовательских работ, посвященных изучению влияния углеродных нанотрубок в качестве армирующего элемента на композиты, в последнее время появляется много исследований композитов с металлической

матрицей [1, 2, 3]. Данные интерметаллиды нашли широкое применение в авиации, кораблестроении, машиностроении и т.д.

Благодаря своим механическим свойствам, таким как высокая прочность, упругость, УНТ позволяют значительно повысить предел прочности и модуль упругости композитов [4, 5]. Авторы [6, 7] достаточно подробно рассмотрели композит Ni/Mg, армированный одностенной УНТ (ОУНТ) и многостенными УНТ (МУНТ), на примере двойной УНТ. Проведенное сравнение показало влияние не только объемной доли углеродных нанотрубок в композите, но и их характеристики.

В данной работе методом молекулярной динамики изучены механические свойства моделей композитов Pt-CNT и Ni₃Al-CNT при различных скоростях деформации и температурах. Так же рассмотрены влияния ориентации УНТ в композите Ni₃Al.

Модели композитов, полученные в AtomsK [8], представлены на рис. 1.

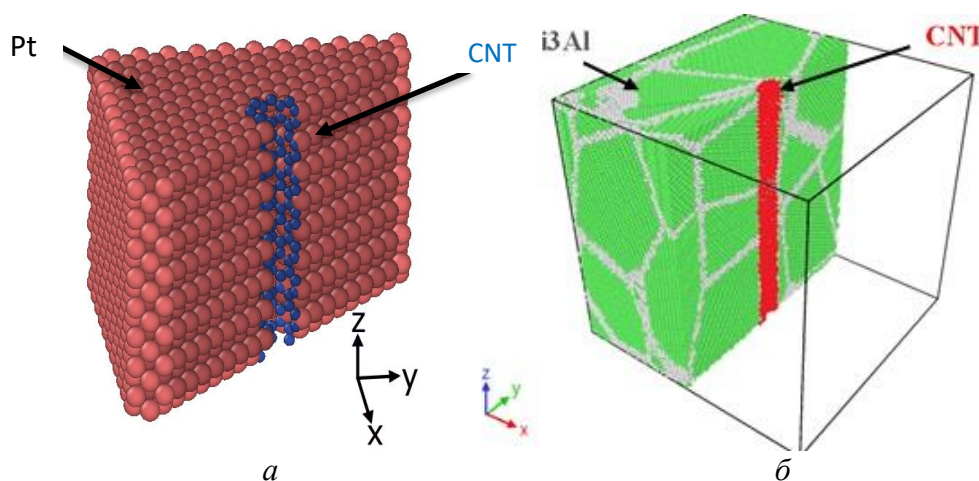


Рис. 1. Модель нанокompозита с металлической матрицей, армированный УНТ: *a* – композит Pt-CNT; *б* – композит Ni₃Al-CNT

Все модели представляли собой куб, в котором вырезано отверстие под определенные диаметры нанотрубок. Расстояние между атомами кристалла и углерода во всех моделях составляло 3 Å. Для всех моделей применялись периодические граничные условия.

Для описания взаимодействия между атомами углерода и платины использовался потенциал MEAM; для Ni₃Al-УНТ составлялась гибридная функция, описывающая взаимодействия между всеми типами атомов в композите. Перед расчетами МД все модели были отрелаксированы в условиях интегрирования постоянного давления и температуры (NPT). После этого система подвергалась одноосной нагрузке равномерно вдоль оси *z* с различными скоростями деформации, температурой и в постоянном объеме. Температуру поддерживали постоянной на уровне 300, 500, 700, 900 К. Шаг моделирования по времени составляет 0,5 фс. Для моделирования использовался программный пакет LAMMPS [9].

На рис. 2 представлены зависимости напряжение-деформация композитов Pt-CNT и Ni₃Al-CNT, армированных УНТ при различных температурах.

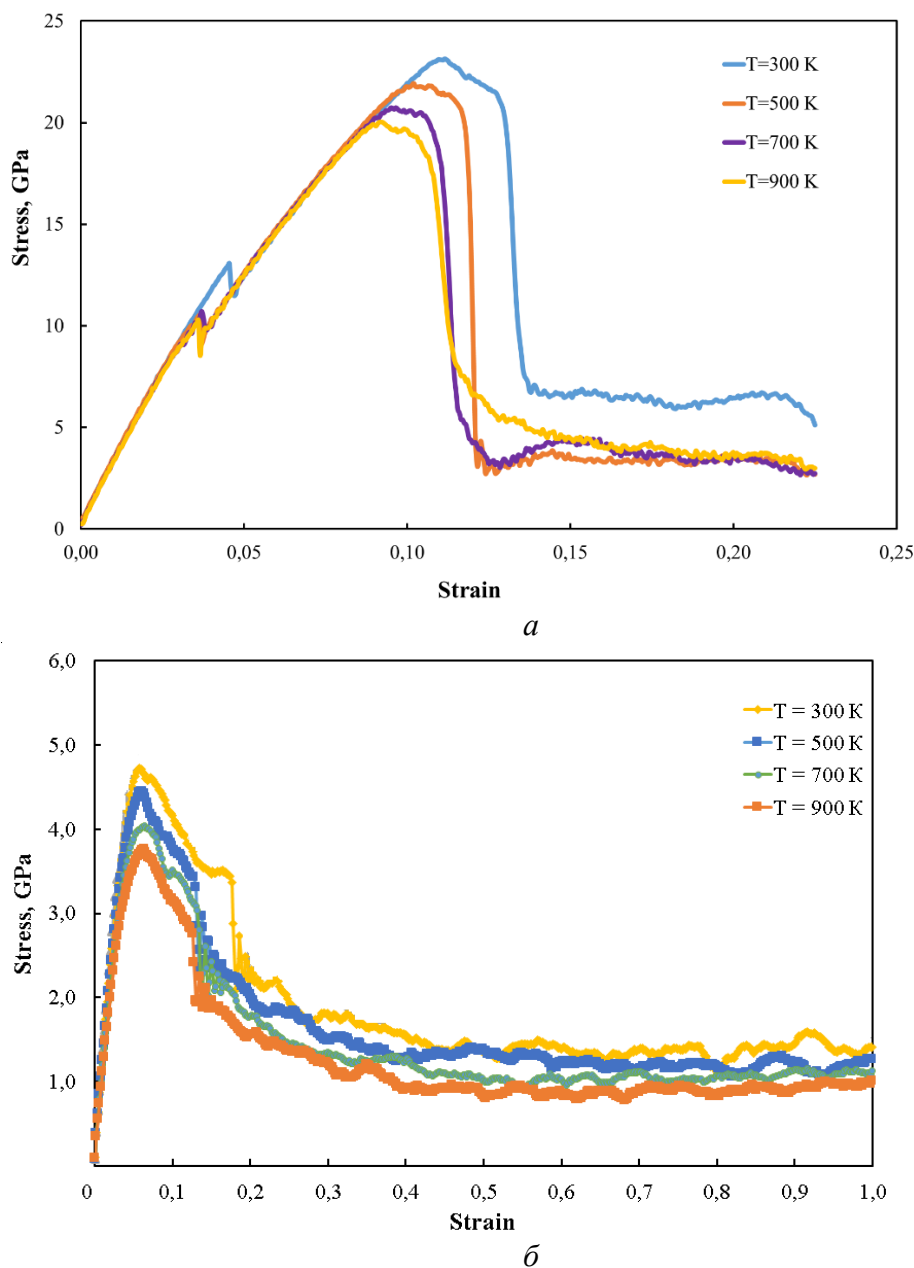


Рис. 2. Зависимость напряжение-деформация для композитов при различных температурах: *a* – Pt-УНТ; *б* – Ni₃Al-УНТ.

Таким образом, в данной работе методом молекулярной динамики проведено обширное моделирование для исследования механического поведения композитов УНТ-Ni₃Al и УНТ-Pt при растягивающей нагрузке и различных температурах, а так же скоростях. Получено, что при внедрении УНТ в композит, модуль Юнга увеличивается более, чем на 60%. Измеренные модули упругости композитов УНТ-Ni₃Al разумно согласуются с расчетными значениями. Предел прочности имеет максимальное значение при

температуре 300 К. Режим деформации в основном определяется прочностью УНТ при растяжении. УНТ играют решающую роль в препятствовании дальнейшему распространению дислокаций и окончательному разрушению при растяжении. Надежные межфазные взаимодействия являются гарантией усиления эффекта УНТ. Установлено, что ориентация УНТ вдоль оси приложения нагрузки дает максимальное улучшение общих механических свойств, как эластичности, так и предела текучести.

Таблица

Механические свойства Ni₃Al-CNT

$\theta, ^\circ$	Предел текучести, ГПа	Предел прочности, ГПа	Модуль Юнга, ГПа
0	15,42	15,87	143,45
20	15,05	15,3	141,52
45	10,1	11	135,24
70	6,9	7,1	123,58
90	3,5	3,8	117,3

В результате показано, что УНТ могут быть потенциальным армирующим материалом при более высокой температуре и высоких скоростях нагрузки при преимущественной ориентации вдоль приложения нагрузки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-2220038/>) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20038. Часть результатов работы была получена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

REFERENCES

1. Tjong S.C. Novel nanoparticle-reinforced metal matrix composites with enhanced mechanical properties // *Advanced Engineering Materials*. 2007. V. 9. Issue 8. P. 639–652. <https://doi.org/10.1002/adem.200700106>
2. Yankovskaya U.I. Mechanical Properties of the Pt-CNT Composite under Uniaxial Deformation: Tension and Compression / U.I. Yankovskaya [et al.] // *Materials*. June 2023. Vol. 16(11). P. 4140. <https://doi.org/10.3390/ma16114140>.
3. Park J. G. Strengthening mechanisms in carbon nanotube-reinforced aluminum composites / J. G. Park, D. H. Keum, Y. H. Lee // *Carbon*. 2015. Vol. 95. P. 690–698. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.08.112>
4. Salvetat J.-P. Mechanical properties of carbon nanotubes / J.-P. Salvetat et al. // *Appl. Phys. A* 1999. V. 69 № 3. P. 255-260. <https://doi.org/10.1007/s003390050999>

5. Ruoff R. S. Mechanical and Thermal Properties of Carbon Nanotubes / R. S. Ruoff, D. C. Lorents // Carbon. 1995. Vol. 33. №. 7. pp. 925-930. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(95\)00021-5](https://doi.org/10.1016/0008-6223(95)00021-5).
6. Tabandeh-Khorshid M. Synthesis, characterization, and properties of graphene reinforced metal-matrix nanocomposites/ M. Tabandeh-Khorshid [et al.] // Composites B. 2020. Vol. 183. P. 107664. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107664>.
7. Zhou X. Molecular dynamics simulation on temperature and strain rate-dependent tensile response and failure behavior of Ni-coated CNT/Mg composites/ X. Zhou // Applied Physics A. 2018. Vol. 124. P. 506. DOI: 10.1007/s00339-018-1918-5
8. Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files // Comput. Phys. Comm. 2015. V. 197. P. 212–219. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>.
9. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics //. J Comput Phys. 1995. V. 117. P. 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.