

Моделирование адгезионных свойств интерфейса

полиэтилен - углеродная нанотрубка

Н.Д. Орехов<sup>1,2</sup>, В.В. Стегайлов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур (ОИВТ РАН)

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Благодаря своим уникальным физическим свойствам углеродные нанотрубки (УНТ) привлекают внимание исследователей в различных отраслях материаловедения. Причиной тому являются в первую очередь их высокая жесткость и прочность. К настоящему времени УНТ зарекомендовали себя в том числе и как необычайно перспективный наполнитель для полимерных нанокомпозитов, однако детальное понимание принципов взаимодействия нановключений с полимерными матрицами на молекулярном уровне пока не сформировано.

В данной работе в рамках методов полноатомной (AA - all-atom) и огрубленной (CG - coarse-grained) молекулярной динамики исследованы свойства полиэтиленовой матрицы, находящейся в контакте с углеродными нановключениями, такими как углеродные нанотрубки и графеновые пластины. На основе полноатомного потенциала AIREBO [1] и аналитических формул DREIDING [2] построена двухуровневая модель описания полиэтиленового композита с углеродными нановключениями. Проведенная подробная верификация этой модели показала хорошее воспроизведение как упругих, так и адгезионных свойств рассмотренных систем. Рассчитанные значения предельного сдвигового напряжения для интерфейса полиэтилен-графен составили  $\sigma_{ISS}=35-50$  МПа, что прекрасно согласуется с литературными данными [3] [4].

Для исследования влияния нановключений на упругие свойства полимерного композита было проведено моделирование процесса деформирования чистого полиэтилена и композита на его основе с добавлением различных типов УНТ. В расчетах показано, что углеродные наночастицы с аспектным отношением, не превышающим нескольких десятков, даже при наличии устойчивого сцепления с полимерной матрицей (высокие значения  $\sigma_{ISS}$ ), не вносят существенных изменений в упругие свойства композита. В то же время использование УНТ с аспектным отношением 70 привело к увеличению модуля упругости

КОМПОЗИТА.

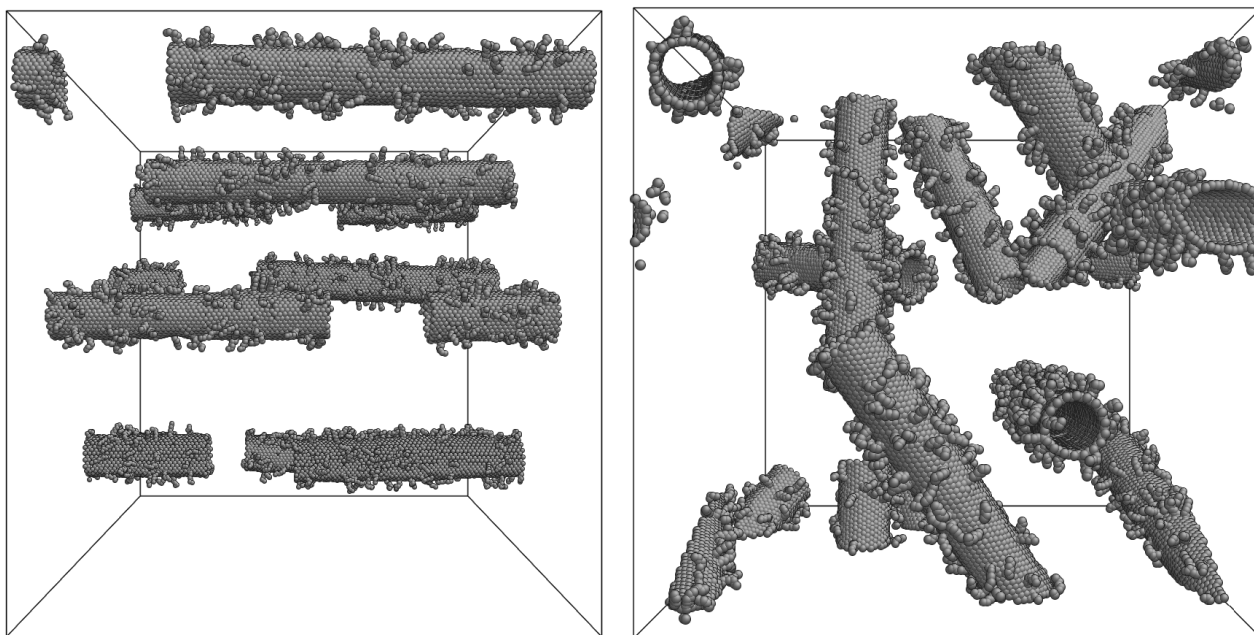


Рис. 1. Пример моделей с упорядоченным и случайным распределением нанотрубок в расчетной ячейке.

#### Литература

- [1] *Stuart S.J., Tutein A. B., Harrison J.A*, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // *The Journal of Chemical Physics* – 2000 – V. 112, N 14 – P. 6472.
- [2] *Mayo S. L., Olafson B. D., Goddard W. A.*, DREIDING: a generic force field for molecular simulations // *The Journal of Physical Chemistry* – 1990 – V. 94 N. 26 – P. 8897–8909.
- [3] *Barber A. H., Cohen S. R., Wagner H. D.*, Measurement of carbon nanotube–polymer interfacial strength // *Applied Physics Letters* – 2003 – V. 82 N. 23 – P. 4140.
- [4] *Ly C., Xue Q., [et al.]*, Effect of Chemisorption on the Interfacial Bonding Characteristics of Graphene–Polymer Composites // *The Journal of Physical Chemistry C* – 2010 – V. 114 N. 14 – P. 6588.