

УДК 691.175.2

Разработка физико-математической модели наномодифицированного композита

В.А. Нелюб, А. Папич

МГТУ им. Н.Э. Баумана

Development of the nanomodified composite material physico-mathematical model

V.A. Nelyub, A. Papich

Bauman Moscow State Technical University

Улучшение эксплуатационных свойств полимерных композиционных материалов — актуальная задача, которую можно решить путем модификации наноразмерными частицами. Рассмотрены различные технологии наномодификации полимерных композиционных материалов. Для исследования их эффективности на примере углепластика, модифицированного наночастицами графена, разработана математическая модель, позволяющая определять механические и теплофизические свойства материала расчетным методом. Математическая модель является многоуровневой, так как материал последовательно рассматривают на микро-, мезо- и макроуровнях. В качестве целевого свойства материала при его модификации выбран коэффициент теплопроводности. Расчеты проведены методом конечных элементов с помощью специализированного пакета прикладных программ. Установлено, что при модификации материала графеном теплопроводность композитной пластины в поперечном направлении увеличивается. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными.

EDN: OKETZP, <https://elibrary/oketzp>

Ключевые слова: наномодифицированный композит, полимерный композиционный материал, графен, технологии наномодификации, коэффициент теплопроводности

Improving performance properties of the polymer composite materials is a pressing problem that could be solved through modification with the nanoscale particles. The paper considers various technologies for nanomodification of the polymer composite materials. It provides a developed mathematical model making it possible to determine the material mechanical and thermal properties by computation to study their efficiency using an example of the carbon fiber reinforced plastic modified with the graphene nanoparticles. The mathematical model is multi-level, as the material is sequentially considered at the micro-, meso-, and macro-levels. Thermal conductivity is selected as the material target property during modification. Computation is performed using the finite element method and a specialized software package. The paper shows that modifying the material with graphene increases the composite plate thermal conductivity in the transverse direction. The results obtained are consistent with the experimental data.

EDN: OKETZP, <https://elibrary/oketzp>

Keywords: nanomodified composite, polymer composite material, graphene, nanomodification technologies, thermal conductivity coefficient

Широта использования полимерных композиционных материалов (ПКМ) в различных областях, в том числе в изделиях аэрокосмической техники, делает этот класс материалов одним из приоритетных направлений развития материалов [1, 2].

Конструкции, эксплуатируемые в условиях космического пространства, испытывают воздействие перепада температуры от -150 до $+150$ °С [3, 4]. Нагрев аппарата до высокой температуры приводит к деградации свойств связующего в ПКМ и, как следствие, к снижению прочностных характеристик всего материала. Кроме того, напряжения, вызванные термоциклированием, повышают вероятность растрескивания материала и снижают его долговечность. В целях предотвращения негативного воздействия указанных факторов поставлена задача разработки высокотеплопроводных ПКМ.

Одним из способов повышения эксплуатационных свойств ПКМ, в том числе теплопроводности, является введение в состав материала наноразмерных модификаторов (далее наномодификаторы): углеродных нанотрубок, металлических порошков, графена и др. [5–7].

Помимо типа наномодификаторы различаются по технологии введения модифицирующих добавок в состав композита. Наиболее распространенная технология — ультразвуковое диспергирование модифицирующих частиц в объеме связующего [8]. Однако в композитах, армированных длинными волокнами, наномодификатор можно нанести на поверхность армирующего компонента — ткани или ленты [9]. При этом значительная часть уже существующих работ по моделированию свойств наномодифицированных композитов посвящена материалам, в которых наномодификатор равномерно распределен по объему связующего [10].

Цель статьи — разработка компьютерной модели модифицированного материала для определения его теплофизических свойств.

Для достижения поставленной цели необходимо определить структуру модели, выбрать математический метод определения свойств материала с использованием этой модели, определить теплофизические свойства модифицированного материала и сравнить свойства модифицированного и исходного материалов.

Материалы и методы. Объектом исследования являлся углепластик на основе двунаправленной углеродной ткани и эпоксидного связующего. Принято, что наномодифицирующие частицы нанесены на поверхность ткани, а сам композит изготовлен методом вакуумной инфузии.

В качестве примера выбраны следующие компоненты ПКМ: наполнитель — карбонизированное углеволокно; связующее — эпоксидная смола ЭД-20 и отвердитель ПО-300; наномодификатор — наноразмерный графен. Свойства материалов, использованные для расчета, приведены в табл. 1 [11–13].

Свойства композита определены методом конечных элементов с использованием программно-вычислительного комплекса.

Результаты и их обсуждение. Так как частицы наномодификатора нанесены на поверхность армирующего компонента, в дальнейшем в конечном композите присутствуют три фазы: наполнитель, связующее без наномодификатора и пограничный слой связующего на поверхности наполнителя, содержащий модифицирующие наночастицы.

В основе разработанной модели лежит многоуровневый подход к моделированию материала. На микроуровне рассмотрено связующее, содержащее модифицирующие наночастицы, на мезоуровне — ткань на основе карбонизированного углеволокна и связующего, содержащего частицы наномодификатора, а на макро-

Таблица 1

Свойства материалов

| Материал | Плотность, г/см ³ | Теплопроводность, Вт/(м·К) | Удельная теплоемкость, кДж/(кг·К) |
|--|------------------------------|----------------------------|-----------------------------------|
| Карбонизированное углеволокно | 1,5 | 10,00 | 0,66 |
| Эпоксидная смола ЭД-20 с отвердителем ПО-300 | 1,9 | 0,25 | 1,34 |
| Графен | 2,2 | 2500,00 | 1,50 |

уровне — пакет углепластика, который состоит из слоев ткани, представленной на мезоуровне, и расположенных между ними слоев связующего без частиц наномодификатора.

При моделировании модифицированного материала на микроуровне рассмотрена объемная концентрация наномодификатора в связующем. Диаметр частицы графена принят равным 5 мкм. Свойства модифицированного материала в зависимости от концентрации наномодификатора приведены в табл. 2. Здесь и далее объемная концентрация наномодификатора, равная нулю, указывает на его отсутствие в материале.

Как следует из табл. 2, теплопроводность модифицированного связующего возрастает с увеличением объемной концентрации наномодификатора. Однако в случае чрезмерного количества наночастиц в матрице она перестанет выполнять свои функции как связующее в композите. Поэтому в дальнейшем объемная концентрация наномодификатора на микроуровне ограничена уровнем 10 %.

На мезоуровне в целях сравнения рассмотрены ткани двух типов плетения: plain и twill. Объемное содержание волокна в ткани — 0,325.

Таблица 2

Свойства материала на микроуровне

| Объемная концентрация модификатора, % | Теплопроводность, Вт/(м·К) | Удельная теплоемкость, кДж/(кг·К) |
|---------------------------------------|----------------------------|-----------------------------------|
| 0 | 0,250 | 1,340 |
| 1 | 0,265 | 1,344 |
| 5 | 0,301 | 1,351 |
| 10 | 0,365 | 1,361 |
| 15 | 0,400 | 1,368 |

Таблица 3

Свойства материала на мезоуровне

| Тип плетения | Концентрация наномодификатора, % | Теплопроводность, Вт/(м·К), вдоль осей материала | | | Удельная теплоемкость, кДж/(кг·К) |
|--------------|----------------------------------|--|------|------|-----------------------------------|
| | | X | Y | Z | |
| Plain | 0 | 4,08 | 4,08 | 0,63 | 1,04 |
| | 10 | 4,26 | 4,26 | 0,87 | 1,06 |
| Twill | 0 | 3,90 | 3,90 | 0,63 | 1,04 |
| | 10 | 4,11 | 4,11 | 0,89 | 1,06 |

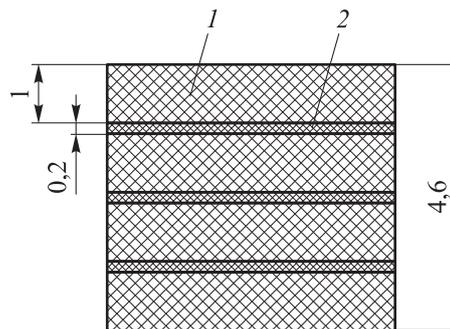


Рис. 1. Схема пакета углепластика:
1 — ткань; 2 — связующее

Связующее содержало в себе частицы наномодификатора с объемной концентрацией 10 %. Результаты расчета теплофизических свойств материала приведены в табл. 3. Оси X и Y лежат в плоскости ткани, ось Z перпендикулярна поверхности ткани.

Из табл. 3 следует, что тип плетения не оказывает значительного влияния на конечный результат. Теплопроводность ткани в своей плоскости при добавлении наномодификатора изменяется незначительно и определяется теплопроводностью волокна. Однако теплопроводность в поперечном направлении при добавлении графена увеличивается.

На макроуровне для определения коэффициента теплопроводности материала в поперечном направлении решена задача о распределении температур при тепловом нагружении композитной пластины. Схема пакета углепластика приведена на рис. 1.

Рассмотрена композитная пластина квадратной формы с длиной стороны 200 мм. Боковые грани пластины теплоизолированы. На верхней грани задано излучение в атмосферу, на нижней — тепловой поток мощностью $Q = 300$ Вт, равномерно распределенный по всей поверхности грани. Исследованы две пластины: первая не содержала наномодификатора, у второй армирующая ткань обладала свойствами, определенными на мезоуровне.

Распределение температуры по толщине пластины при отсутствии и наличии графена показано на рис. 2, а и б. Видно, что при добавлении наномодификатора максимальная температура конструкции снижается.

Коэффициент теплопроводности в этом случае определяли путем решения задачи о теплопроводности тонкой стенки исходя из результатов, приведенных на рис. 2. При отсутствии наномодификатора коэффициент теплопро-

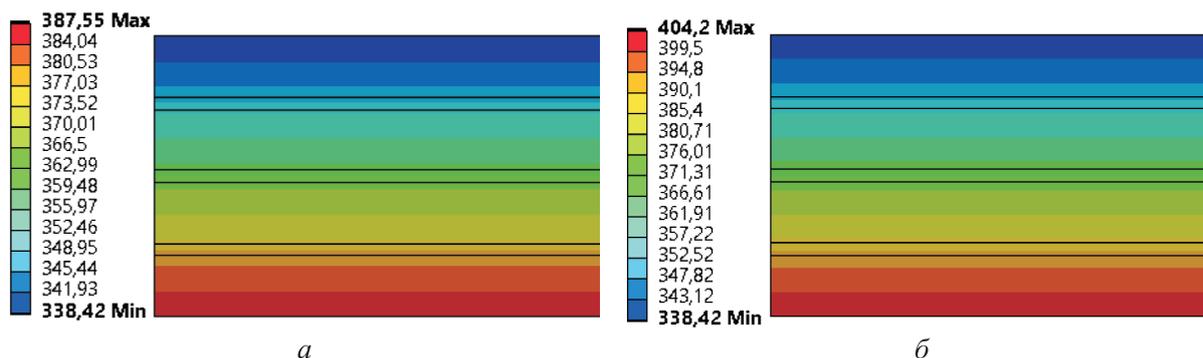


Рис. 2. Распределение температуры, К, по толщине пластины при отсутствии (а) и наличии (б) графена

водности пластины составил 0,524 Вт/(м·К), а при его наличии — 0,702 Вт/(м·К).

Таким образом, модификация углепластика графеном приводит к увеличению теплопроводности материала в поперечном направлении. Полученный результат согласуется с экспериментальными данными [14, 15].

Выводы

1. Разработана математическая модель наномодифицированного композиционного материала, в котором частицы наномодификатора нанесены на поверхность армирующего компо-

нента. Эта модель является многоуровневой, так как материал последовательно рассматривают на микро-, мезо- и макроуровнях.

2. На примере углепластика, модифицированного графеном, проведен расчет теплофизических свойств наномодифицированного материала. Установлено, что при добавлении графена теплопроводность композита в поперечном направлении увеличивается на 33,9 %.

3. В дальнейшем для подтверждения полученных результатов запланировано экспериментальное исследование теплофизических свойств углепластиков, модифицированных наночастицами графена.

Литература

- [1] Каблов Е.Н. Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года. *Авиационные материалы и технологии*, 2012, № 5. URL: https://journal.viam.ru/ru/system/files/uploads/pdf/2012/2012_S_1_1.pdf
- [2] Дориомедов М.С. Российский и мировой рынок полимерных композитов (обзор). *Труды ВИАМ*, 2020, № 6–7, с. 29–37, doi: <https://dx.doi.org/10.18577/2307-6046-2020-0-67-29-37>
- [3] Pernigoni L., Grande A.M. Advantages and challenges of novel materials for future space applications. *Front. Space Technol.*, 2023, vol. 4, doi: <https://doi.org/10.3389/frspt.2023.1253419>
- [4] Николаева Е.А., Тимофеев А.Н., Михайловский К.В. Высокотеплопроводный углепластик на основе углеродного волокна из пека и дисперсно-наполненной матрицы ЭНФБ. *Информационно-технологический вестник*, 2018, № 2, с. 130–137.
- [5] Малков И.В., Макухин А.Г., Сыровой Г.В. Механизм модификации наночастицами полимерных композитов на основе эпоксидной матрицы. *Вестник ТГТУ*, 2016, т. 22, № 1, с. 98–107, doi: <https://doi.org/10.17277/vestnik.2016.01.pp.098-107>
- [6] Ткачук А.И., Куршев Е.В., Лонский С.Л. и др. Модификация эпоксидных связующих многостенными углеродными нанотрубками. *Труды ВИАМ*, 2023, № 2, с. 63–76. EDN: LFQGTX
- [7] Рустамова Е.Г., Губин С.П. Композиты графен–полиэтилен высокого давления и их свойства. *РЭНСИТ*, 2021, т. 13, № 3, с. 369–376, doi: <https://doi.org/10.17725/rensit.2021.13.369>
- [8] Кондрашов С.В., Шашкеев К.А., Попков О.В. и др. Перспективные технологии получения функциональных материалов конструкционного назначения на основе нанокompозитов с УНТ (обзор). *Труды ВИАМ*, 2016, № 3, doi: <https://doi.org/10.18577/2307-6046-2016-0-3-7-7>

- [9] Урванов С.А., Казённов С.В., Жукова Е.А. и др. Армированные композиционные материалы с применением эластомерной матрицы на основе модифицированного углеродными нанотрубками углеродного волокна. *Известия высших учебных заведений. Сер. Химия и химическая технология*, 2015, т. 58, № 5, с. 73–77.
- [10] Ташкинов М.А., Добрыднева А.Д., Матвеев В.П. и др. Моделирование эффективных электропроводящих свойств полимерных нанокомпозитов со случайным расположением частиц оксида графена. *Вестник ПНИПУ. Механика*, 2021, № 2, с. 167–180, doi: <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2021.2.15>
- [11] Конкин А.А., ред. *Термо-, жаростойкие и негорючие волокна*. Москва, Химия, 1978. 424 с.
- [12] Чэнь Я., Мараховский П.С., Малышева Г.В. Определение теплофизических свойств эпоксидных материалов в процессе их отверждения. *Труды ВИАМ*, 2018, № 9, с. 119–123, doi: <https://doi.org/10.18577/2307-6046-2018-0-9-119-123>
- [13] Elsaid K., Abdelkareem M.A., Maghrabie H.M. et al. Thermophysical properties of graphene-based nanofluids. *Int. J. Thermofluids*, 2021, vol. 10, art. 100073, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijft.2021.100073>
- [14] Ackermann A.C., Demleitner M., Guhathakurta J. et al. Mechanical, thermal, and electrical properties of amine- and non-functionalized reduced graphene oxide/epoxy carbon fiber-reinforced polymers. *Polym. Compos.*, 2023, vol. 44, no. 8, pp. 4937–4954, doi: <https://doi.org/10.1002/pc.27461>
- [15] Gao Z., Zhu J., Rajabpour S. et al. Graphene reinforced carbon fibers. *Sci. Adv.*, 2020, vol. 6, no. 17, art. eaaz4191, doi: <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz4191>

References

- [1] Kablov E.N. Strategical areas of developing materials and their processing technologies for the period up to 2030. *Aviatsionnye materialy i tekhnologii* [Aviation Materials and Technologies], 2012, no. 5. URL: https://journal.viam.ru/ru/system/files/uploads/pdf/2012/2012_S_1_1.pdf (in Russ.).
- [2] Doriomedov M.S. Russian and world market of polymer composites (review). *Trudy VIAM* [Proceedings of VIAM], 2020, no. 6–7, pp. 29–37, doi: <https://dx.doi.org/10.18577/2307-6046-2020-0-67-29-37> (in Russ.).
- [3] Pernigoni L., Grande A.M. Advantages and challenges of novel materials for future space applications. *Front. Space Technol.*, 2023, vol. 4, doi: <https://doi.org/10.3389/frspt.2023.1253419>
- [4] Nikolaeva E.A., Timofeev A.N., Mikhaylovskiy K.V. High thermal conductivity carbon fiber reinforced polymer based on a carbon fiber from pitch and dispersed-filled ENPB matrix. *Informatsionno-tekhnologicheskij vestnik*, 2018, no. 2, pp. 130–137. (In Russ.).
- [5] Malkov I.V., Makukhin A.G., Syrovoy G.V. Mechanism of modification of polymer composite nanoparticles. *Vestnik TGTU* [Transactions of the TSTU], 2016, vol. 22, no. 1, pp. 98–107, doi: <https://doi.org/10.17277/vestnik.2016.01.pp.098-107> (in Russ.).
- [6] Tkachuk A.I., Kurshev E.V., Lonskiy S.L. et al. Modification of epoxy binders with multi-walled carbon nanotubes. *Trudy VIAM* [Proceedings of VIAM], 2023, no. 2, pp. 63–76. EDN: LFGQTX (In Russ.).
- [7] Rustamova E.G., Gubin S.P. Graphene-polyethylene high pressure composites and their properties. *RENSIT*, 2021, vol. 13, no. 3, pp. 369–376, doi: <https://doi.org/10.17725/rensit.2021.13.369> (in Russ.).
- [8] Kondrashov S.V., Shashkeev K.A., Popkov O.V. et al. Prospective producing methods for functional structural materials based on CNT-filled nanocomposites (review). *Trudy VIAM* [Proceedings of VIAM], 2016, no. 3, doi: <https://doi.org/10.18577/2307-6046-2016-0-3-7-7> (in Russ.).
- [9] Urvanov S.A., Kazennov S.V., Zhukova E.A. et al. Reinforced composite materials using elastomeric matrix based on carbon nanotube-modified carbon fiber. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Ser. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya* [CHEMTECH], 2015, vol. 58, no. 5, pp. 73–77. (In Russ.).
- [10] Tashkinov M.A., Dobrydnova A.D., Matveenko V.P. et al. Modeling the effective conductive properties of polymer nanocomposites with a random arrangement of graphene oxide par-

- ticles. *Vestnik PNIU. Mekhanika* [PNRPU Mechanics Bulletin], 2021, no. 2, pp. 167–180, doi: <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2021.2.15> (in Russ.).
- [11] Konkin A.A., ed. *Termo-, zharostoykie i negoryuchie volokna* [Heat, heat and non-combustible fibers]. Moscow, Khimiya Publ., 1978. 424 p. (In Russ.).
- [12] Chen Ya., Marakhovskiy P.S., Malysheva G.V. Determination of thermophysical properties of epoxy materials during their curing. *Trudy VIAM* [Proceedings of VIAM], 2018, no. 9, pp. 119–123, doi: <https://doi.org/10.18577/2307-6046-2018-0-9-119-123> (in Russ.).
- [13] Elsaid K., Abdelkareem M.A., Maghrabie H.M. et al. Thermophysical properties of graphene-based nanofluids. *Int. J. Thermofluids*, 2021, vol. 10, art. 100073, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijft.2021.100073>
- [14] Ackermann A.C., Demleitner M., Guhathakurta J. et al. Mechanical, thermal, and electrical properties of amine- and non-functionalized reduced graphene oxide/epoxy carbon fiber-reinforced polymers. *Polym. Compos.*, 2023, vol. 44, no. 8, pp. 4937–4954, doi: <https://doi.org/10.1002/pc.27461>
- [15] Gao Z., Zhu J., Rajabpour S. et al. Graphene reinforced carbon fibers. *Sci. Adv.*, 2020, vol. 6, no. 17, art. eaaz4191, doi: <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz4191>

Статья поступила в редакцию 15.12.2024

Информация об авторах

НЕЛЮБ Владимир Александрович — доктор технических наук, доцент кафедры «Технологии ракетно-космического машиностроения». МГТУ им. Н.Э. Баумана (105005, Москва, Российская Федерация, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, e-mail: Vladimir_Nelub.mail@emtc.ru).

ПАПИЧ Александр — аспирант кафедры «Технологии ракетно-космического машиностроения». МГТУ им. Н.Э. Баумана (105005, Москва, Российская Федерация, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, e-mail: papicha@student.bmstu.ru).

Information about the authors

NELYUB Vladimir Alexandrovich — Doctor of Science, Associate Professor, Department of Technology of Rocket-Space Engineering. Bauman Moscow State Technical University (105005, Moscow, Russian Federation, 2nd Bauman-skaya St., Bldg. 5, Block 1, e-mail: Vladimir_Nelub.mail@emtc.ru).

PAPICH Alexander — Postgraduate, Department of Technology of Rocket-Space Engineering. Bauman Moscow State Technical University (105005, Moscow, Russian Federation, 2nd Baumanskaya St., Bldg. 5, Block 1, e-mail: papicha@student.bmstu.ru).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Нелюб В.А., Папич А. Разработка физико-математической модели наномодифицированного композита. *Известия высших учебных заведений. Машиностроение*, 2025, № 10, с. 29–34.

Please cite this article in English as:

Nelyub V.A., Papich A. Development of the nanomodified composite material physico-mathematical model. *BMSTU Journal of Mechanical Engineering*, 2025, no. 10, pp. 29–34.