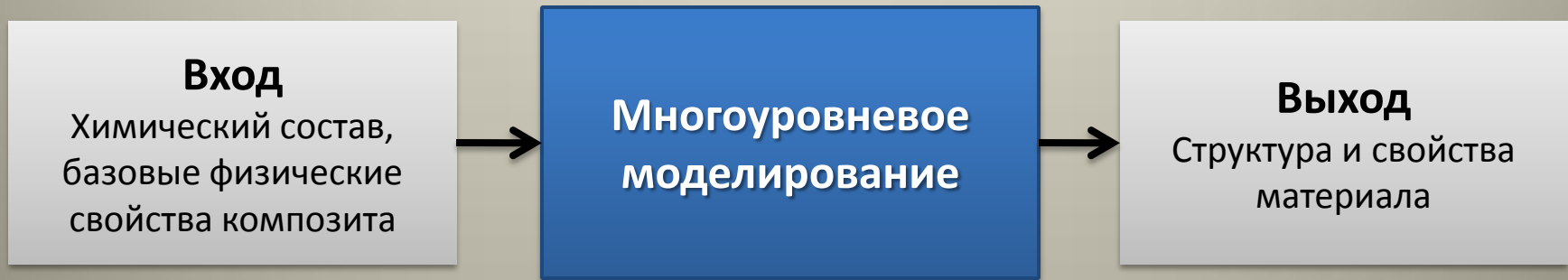


Комплекс для компьютерного
моделирования физико-
химических свойств органических
матричных нанокompозитов

МГУ имени М.В. Ломоносова

Комплекс программ

Применение комплекса позволяет прогнозировать свойства и оптимизировать условия производства промышленно важных нанокompозитных материалов за счет выбора оптимальных функционализации и диспергирования наночастиц наполнителей.



Комплекс позволят предсказывать следующие свойства нанокompозитов:

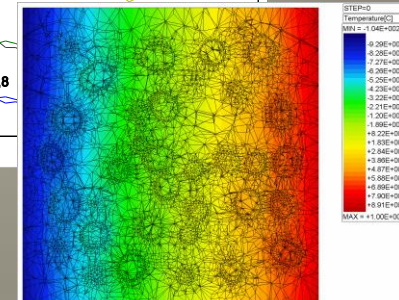
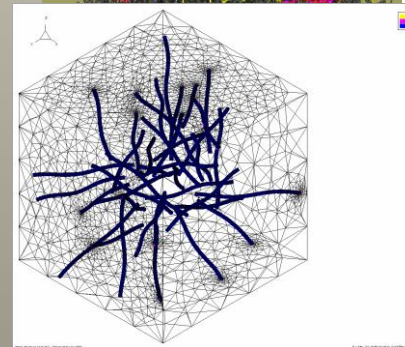
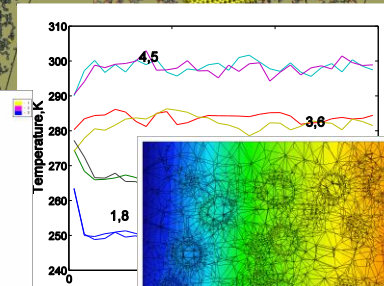
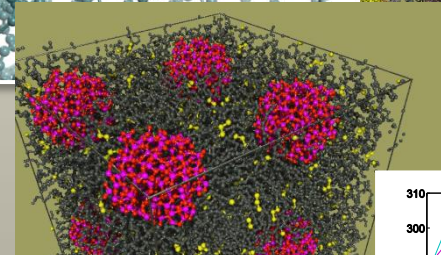
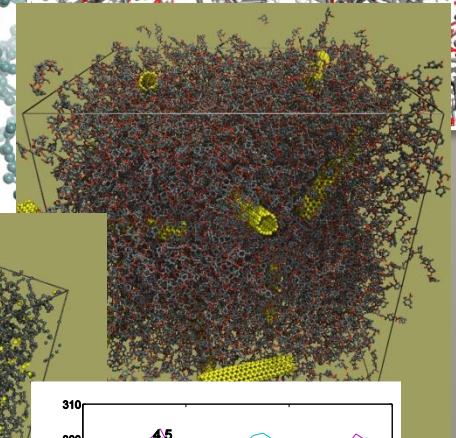
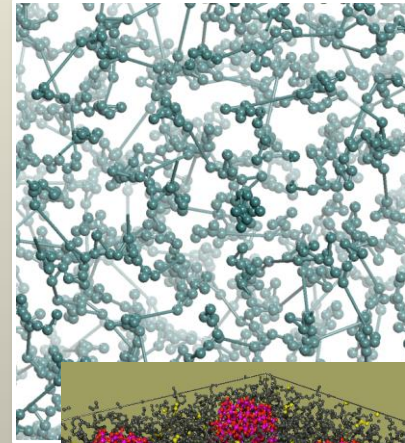
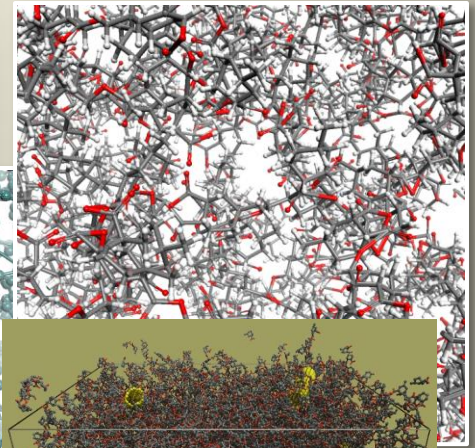
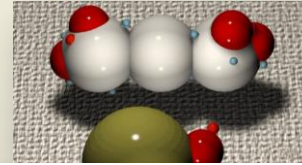
- Структурные
- Механические
- Оптические
- Электрические
- Теплофизические
- Диффузионные

Состав Комплекса

Модули расчетов

- Микроскопический уровень
- Мезоскопический уровень
- Макроскопический уровень

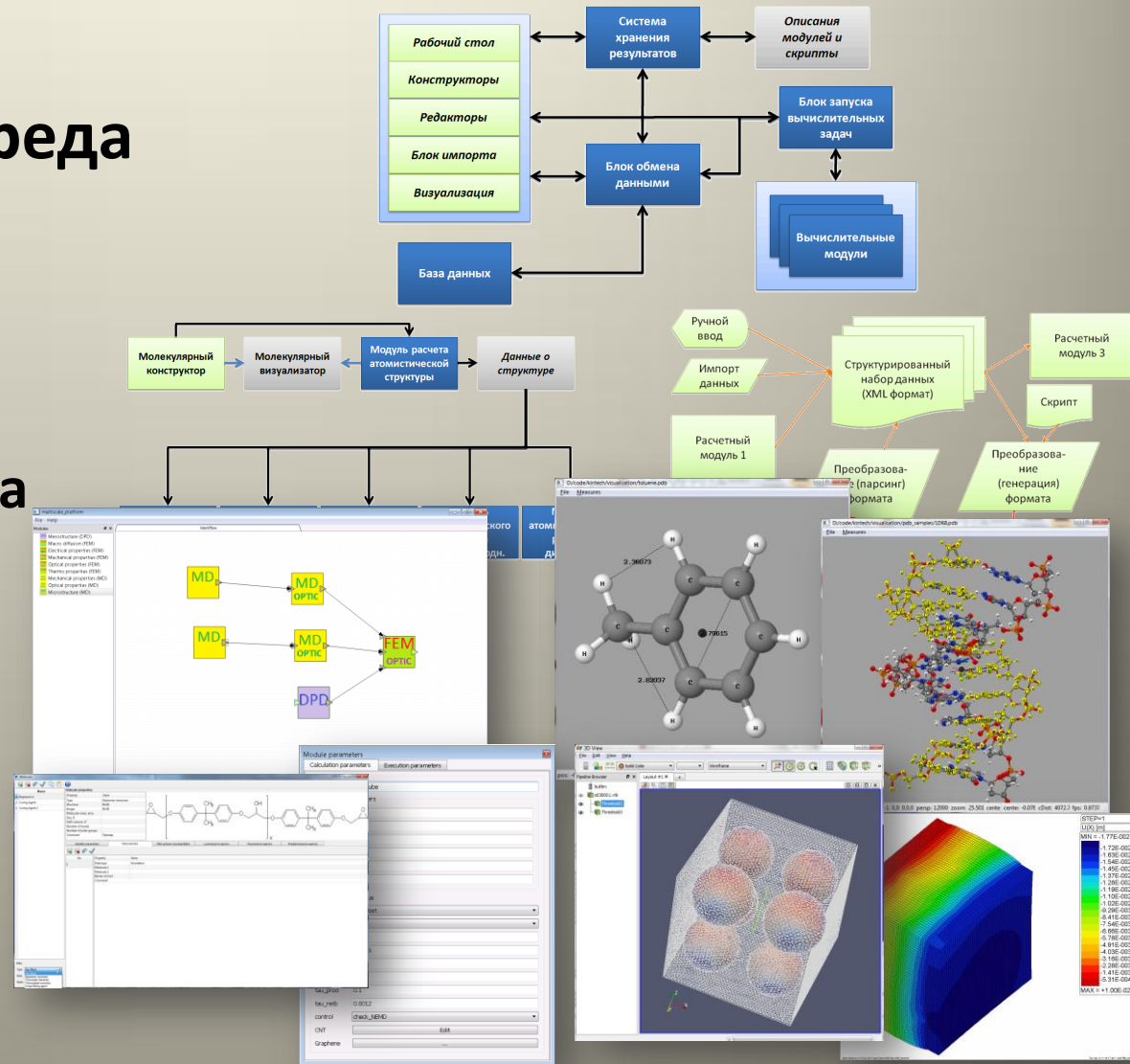
- Квантовая химия (DFT)
- Мол. динамика
- DPD
- Метод перколяций
- FDTD
- МСС (МКЭ+МСЭ)



Состав Комплекса

Интегрированная среда

- Серверная часть
- Расчетные модули
- База данных
- Клиентская оболочка
- Конструкторы
- Визуализаторы
- Скрипты импорта и экспорта



Пример расчетов, проведенных с использованием Комплекса:

Схема работы для расчета механических свойств

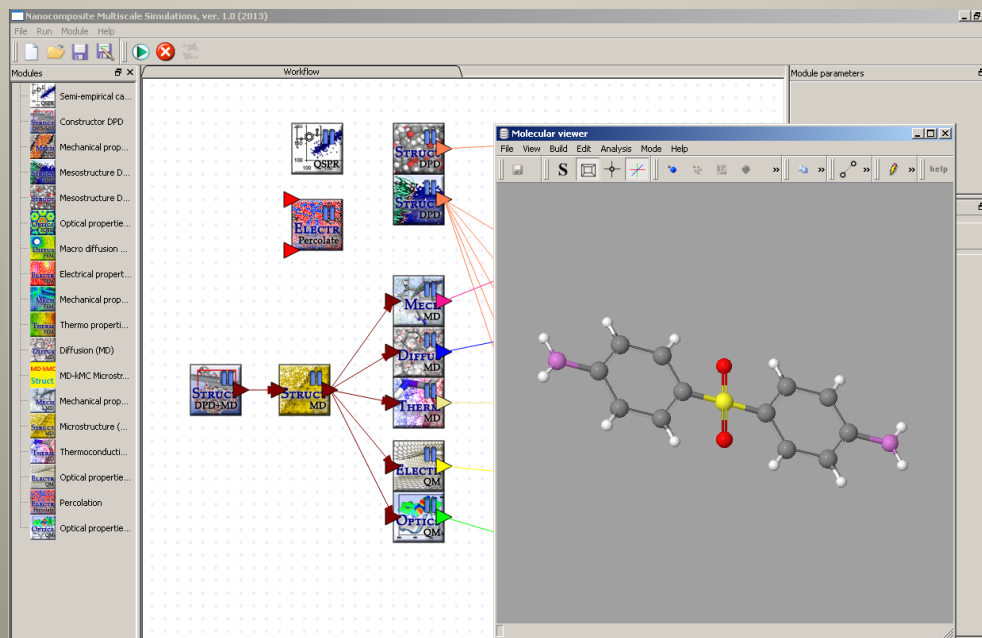


Схема работы для расчета механических свойств

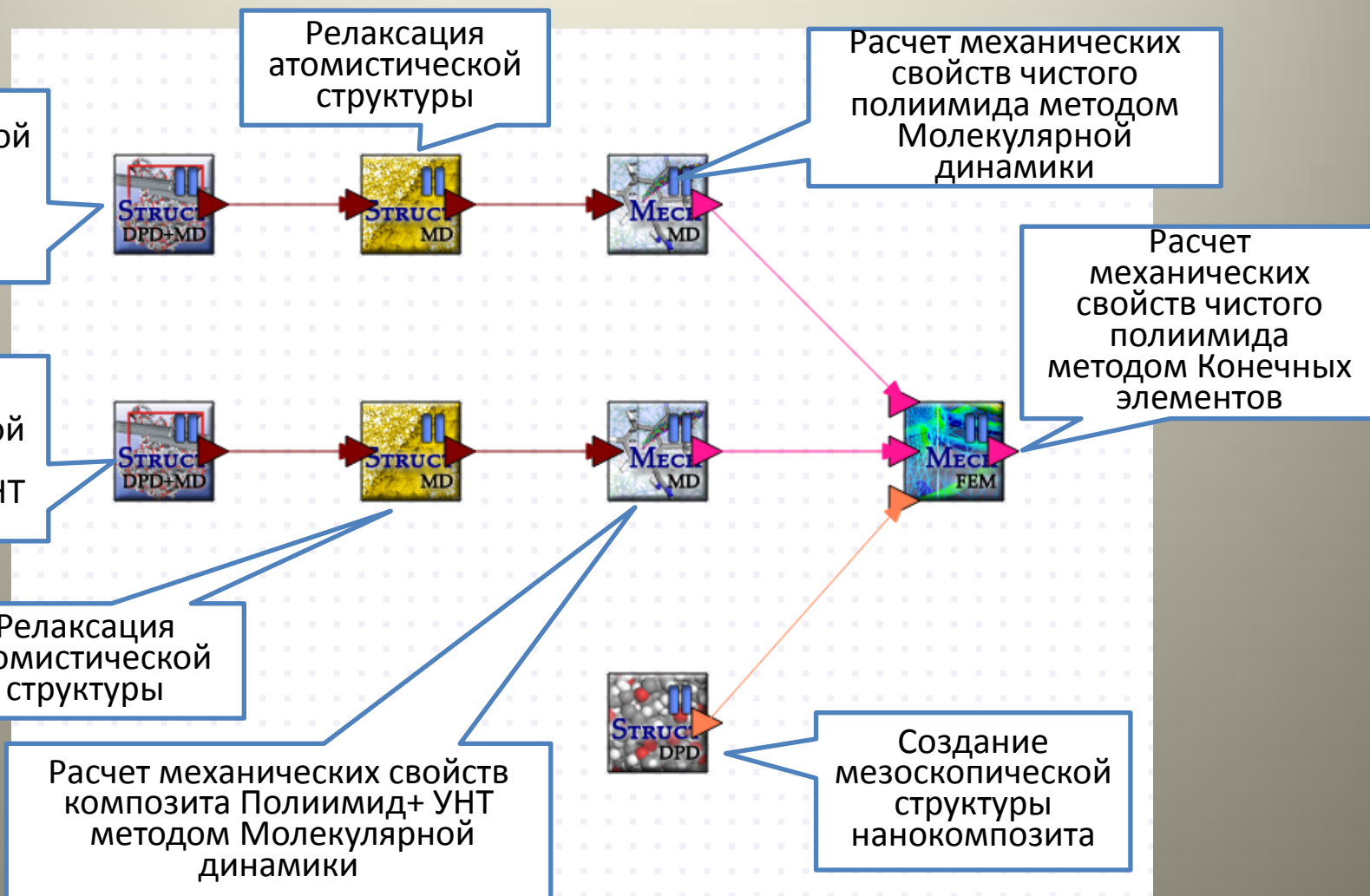


Схема работы для расчета механических свойств

Шаг 1.

Создание огрубленной структуры методом диссипативной динамики частиц,

Обратное восстановление структуры,

Релаксация структуры методом Молекулярной динамики



Создание аморфной структуры Полиимид+ УНТ

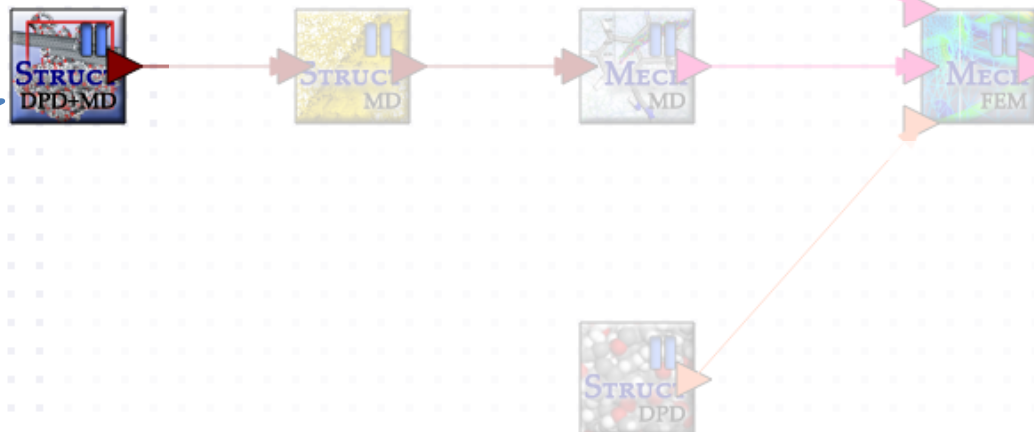


Схема работы для расчета механических свойств



Создание огрубленной структуры (ДДЧ) + Обратное восстановление + релаксация

➔ Полиимид: R-ВАРВ (из базы данных)

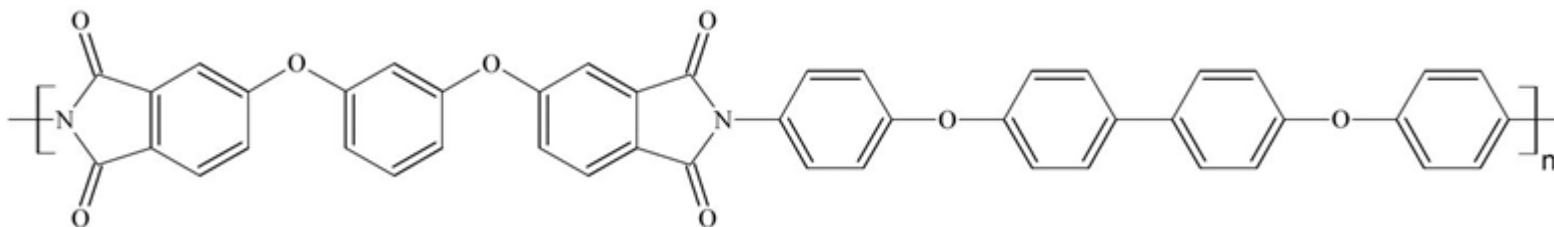
Степень полимеризации: 8

Наполнитель: УНТ (из базы данных)

Объемная доля: 5%

$T = 300 \text{ K}$, $P = 1 \text{ atm}$

```
project_name      pi_swcnt
species molecule  BABP8      0.78
species particle  SWCNTn     0.22 40.0
system_density    0.85
cg_level          2.0
box_size          60.00 60.00 60.00
time_step         0.01
relaxation_time_1 50000
reaction_time     0000
reaction_frequency 500
relaxation_time_2 10000
output_frequency  1000
dpd_parameters    1 1 25.0 0.0000
dpd_parameters    2 2 25.0 0.1000
dpd_parameters    1 2 125.0 0.0000
xyzb_movie        0
```

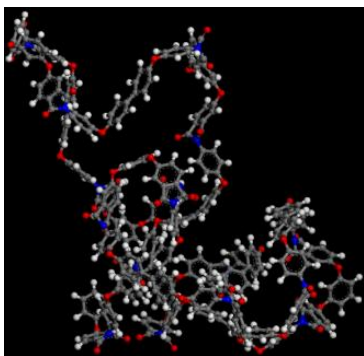


Полиимид R-ВАРВ

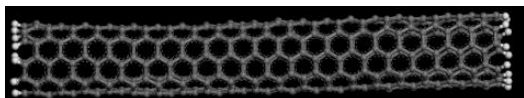
Схема работы для расчета механических свойств



Создание огрубленной структуры (ДДЧ) +
Обратное восстановление + релаксация



R-BAPB



УНТ

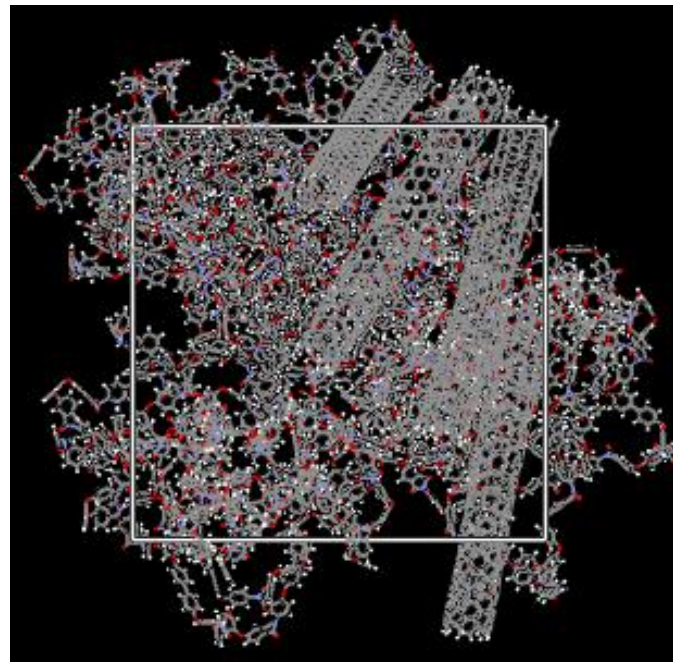


Схема работы для расчета механических свойств

Шаг2.

Полная релаксация системы методом Молекулярной динамики

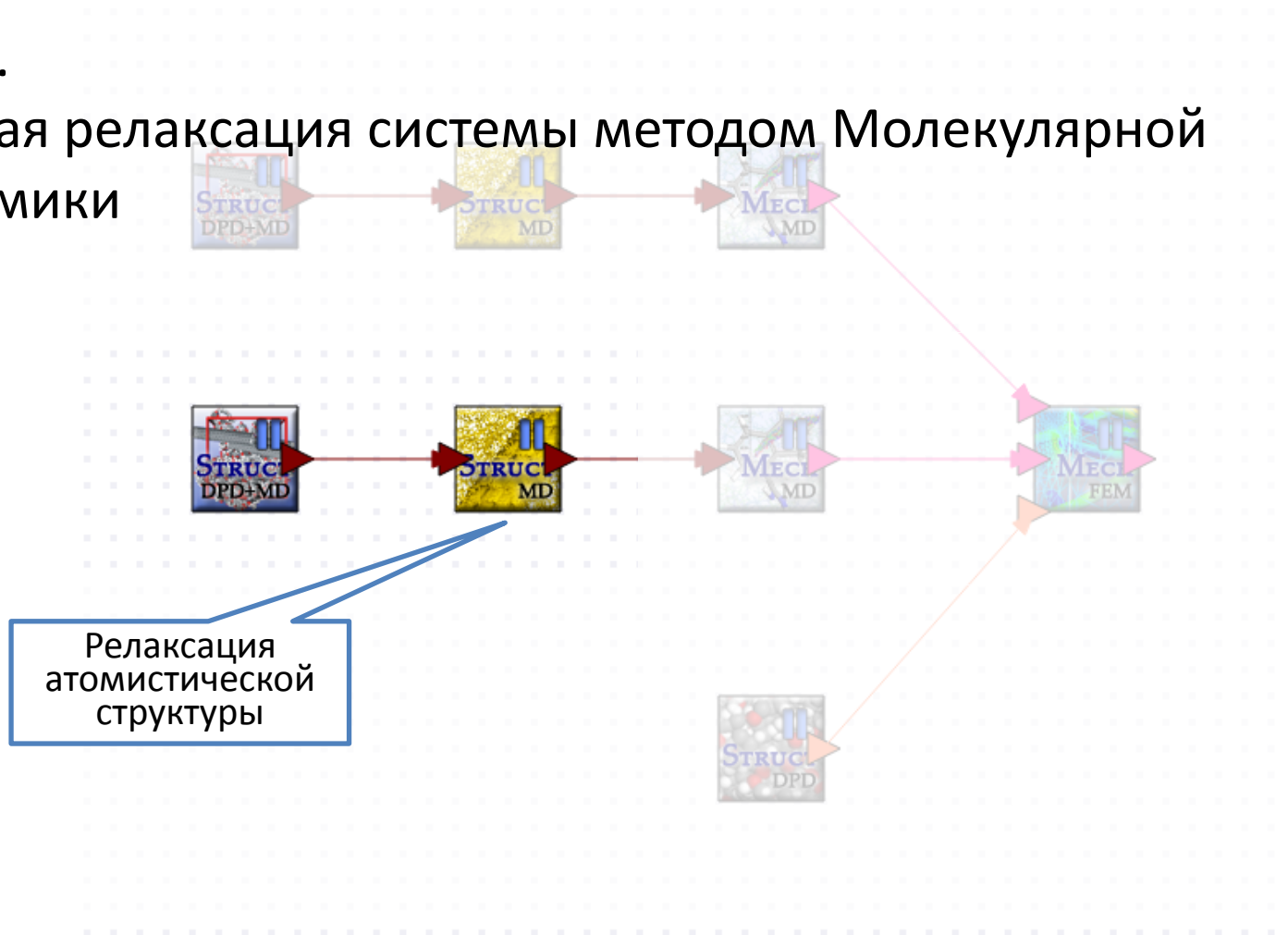


Схема работы для расчета механических свойств



Полная релаксация методом МД

Вход: Атомистическая структура сгенерированная на первом шаге

Стадия 1: Релаксация с малым шагом по времени (0.05 фс), длина 50 фс

Стадия 2: Релаксация с малым шагом по времени (0.5 фс), длина 128 пс

Рассчитанная плотность : 1.32 г/см^3

Соответствует известным экспериментальным данным

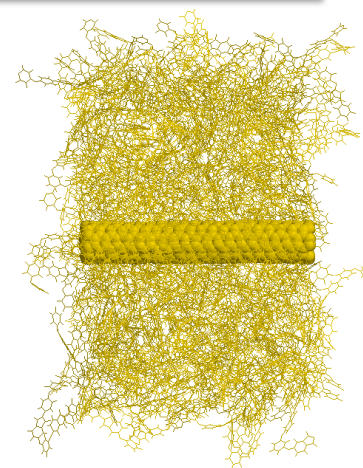
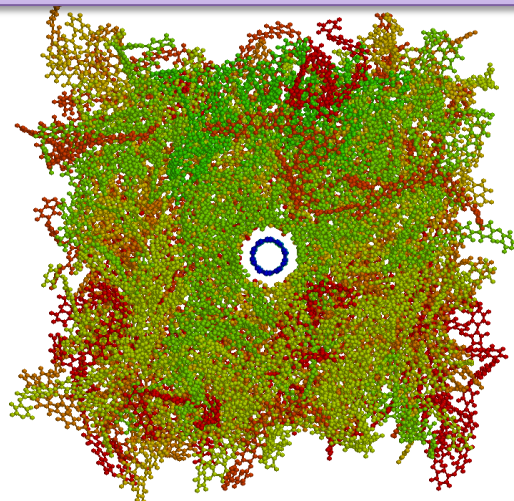
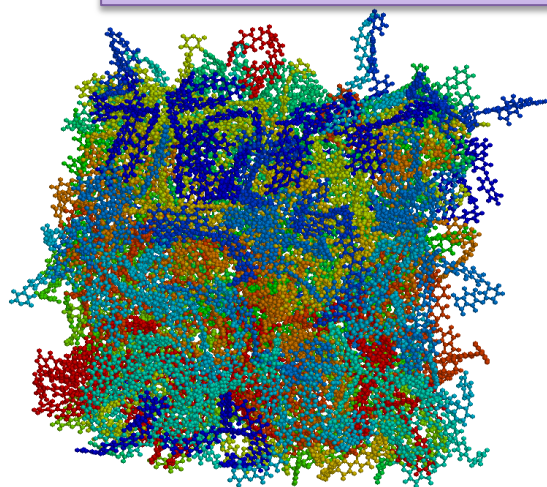
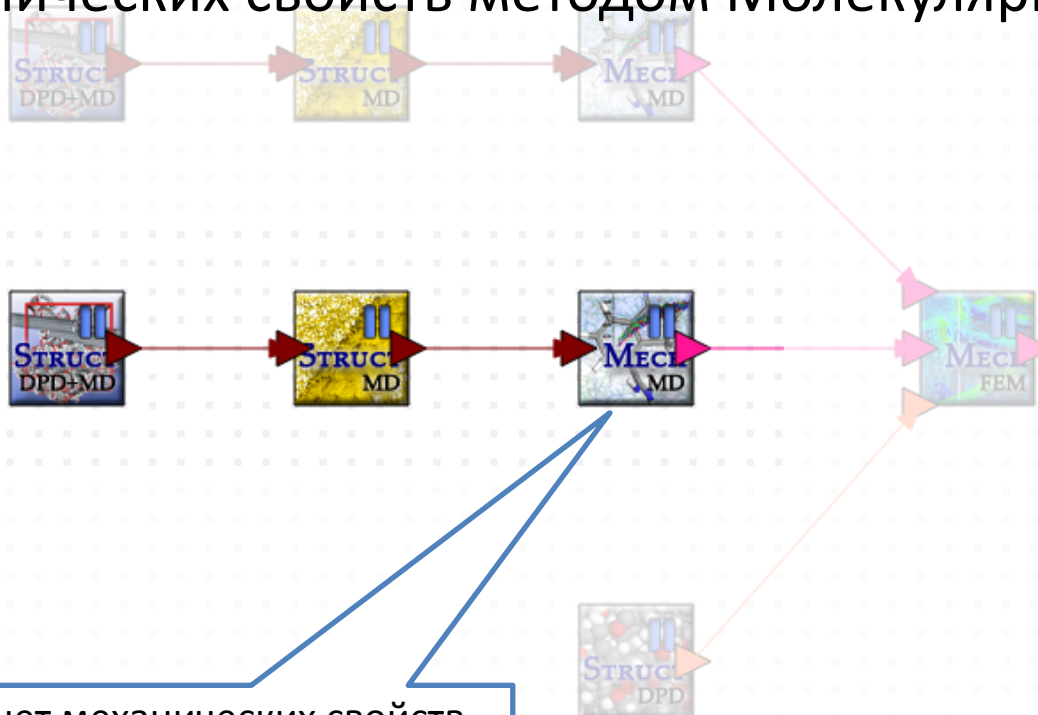


Схема работы для расчета механических свойств

Шаг 3.

Расчет механических свойств методом Молекулярной динамики



Расчет механических свойств композита Полиимид+ УНТ методом Молекулярной динамики

Схема работы для расчета механических свойств

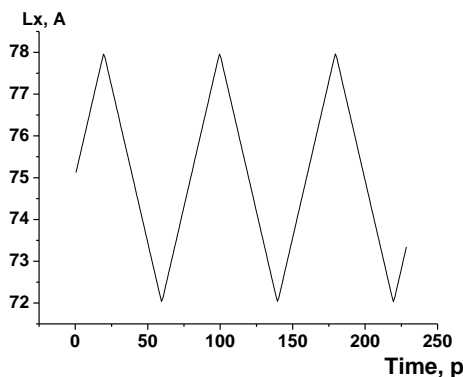


Расчет механических свойств методом МД

Вход: Уравновешанная структура с шага 2

Стадия 1: Моделирование 6 типов деформаций

Стадия 2: Вычисление механических характеристик (36 компонент тензора модуля упругости)



Периодическая деформация:
Одноосное растяжение (X, Y, Z)
Одноосное сжатие (X, Y, Z)

4.17E+00	1.29E+00	2.50E+00	4.70E-02	2.06E-02	-4.70E-04
1.28E+00	4.01E+00	2.50E+00	1.20E-02	2.50E-02	-1.08E-02
2.50E+00	2.50E+00	1.70E+01	-1.20E-02	2.80E-02	3.70E-03
4.60E-02	1.20E-02	-1.10E-02	6.80E-01	1.90E-03	-1.90E-03
2.10E-02	2.50E-02	2.80E-02	1.90E-03	7.00E-01	-1.90E-04
-4.70E-04	-1.10E-02	3.80E-03	-1.90E-03	-1.90E-04	6.50E-01

Амплитуда 15%

Чистая матрица: $E = 2.7$ ГПа

С УНТ: $E_{\text{normal}} = 3.6$ ГПа

$E_{\text{along}} = 14.1$ ГПа

Схема работы для расчета механических свойств

Шаг 4.

Создание мезоскопической структуры композита методом ДДЧ



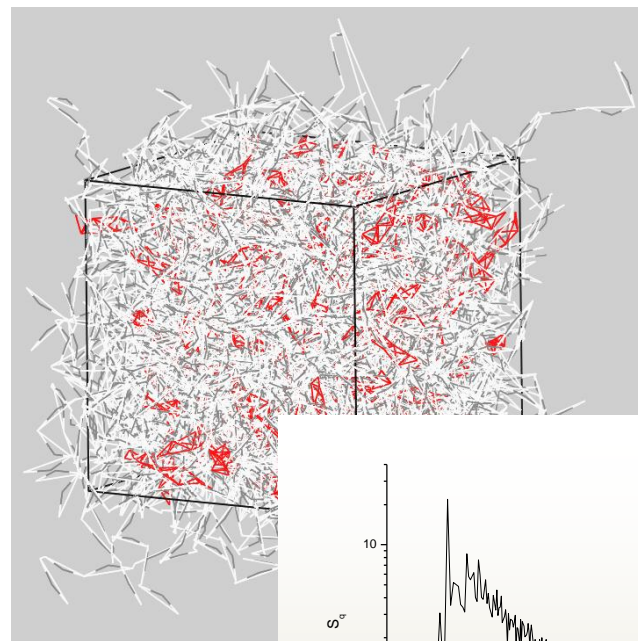
Создание мезоскопической структуры нанокompозита

Схема работы для расчета механических свойств



Создание мезоскопической структуры композита методом ДДЧ

- ➔ 53544 CG частиц,
26x26x26 размер структурной
ячейки ДДЧ



```
project_name      test3
species molecule  monre 0.82
species particle  SWNT2 0.18
system_density    1.1
cg_level          3.0
box_size          200.0 200.0 200.0
time_step         0.01
relaxation_time_1 5000
reaction_time     150000
relaxation_time_2 5000
output_frequency  1000
dpd_parameters    1 1 150.0 1.00
dpd_parameters    2 2 150.0 0.0000
dpd_parameters    1 2 150.0 0.0
```

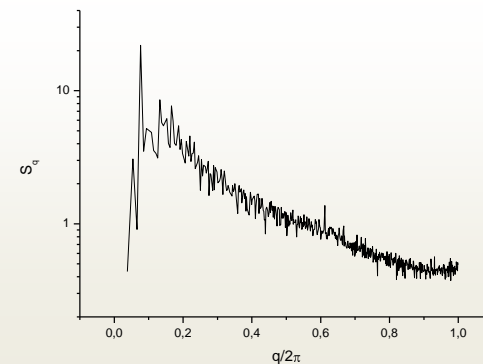
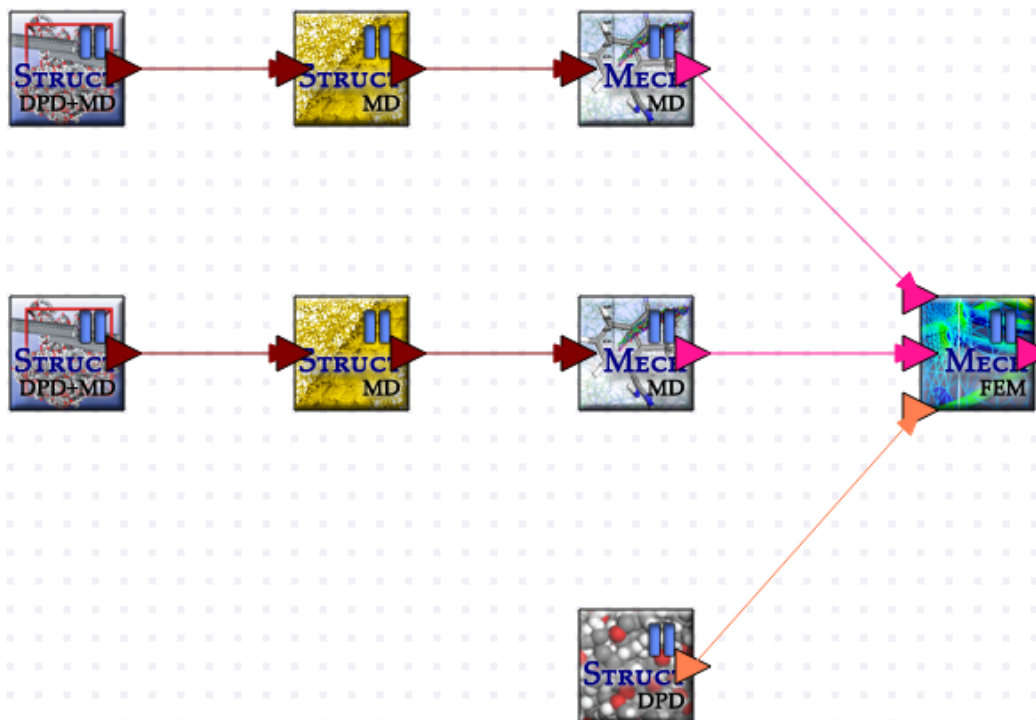


Схема работы для расчета механических свойств

Шаг 5.

Расчет механических свойств композита методом Конечных элементов



Расчет механических свойств методом конечных элементов

Схема работы для расчета механических свойств

Расчет механических свойств композита методом Конечных элементов



➤ Вход: Механические свойства из вычислений методом молекулярной динамики (тензор модуля упругости 6×6 для чистой матрицы и матрицы наполненной УНТ)

➤ Вход: Структура из ДДЧ

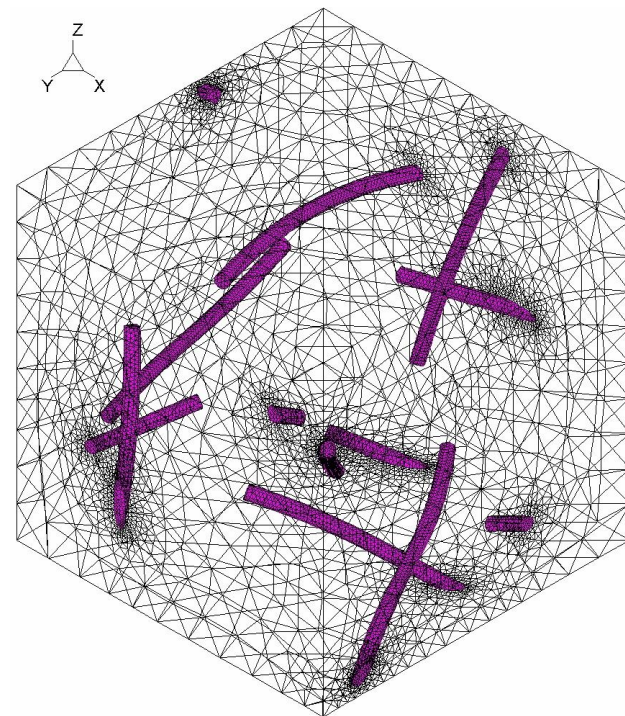


Схема работы для расчета механических свойств

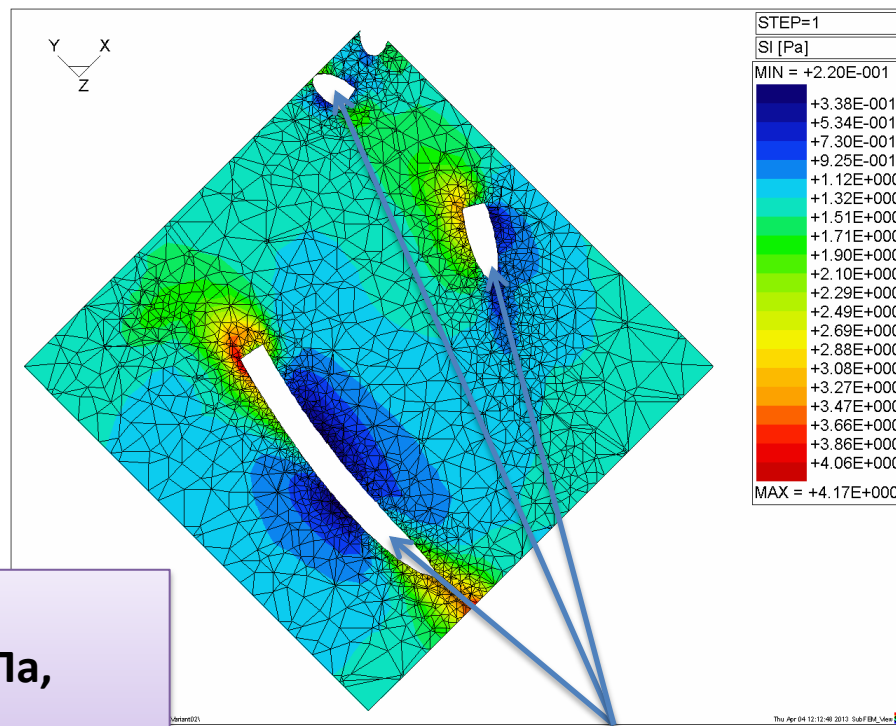
методом Конечных элементов

Расчет механических свойств композита методом Конечных элементов

- Пространственное распределение интенсивности деформаций при одноосном сжатии вдоль оси X
- Полученный бхб тензор модуля упругости

6.65E+09	4.62E+09	4.59E+09	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
4.62E+09	6.87E+09	4.60E+09	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
4.59E+09	4.60E+09	6.65E+09	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.09E+09	0.00E+00	0.00E+00
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.06E+09	0.00E+00
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.05E+09

Средняя величина модуля Юнга
(в приближении квази-эластичности): 2.92 ГПа,
Коэффициент усиления
(по отношению к матрице без наполнителя): 1.05



нанотрубки