

DOI 10.31891/2307-5732-2024-335-3-23  
УДК: 678.07:004.94-026.5(048.83)

ОМЕЛЬЧУК ІРИНА

КПІ імені Ігоря Сікорського  
<https://orcid.org/0000-0003-4543-4761>

КАРВАЦЬКИЙ АНТОН

КПІ імені Ігоря Сікорського  
<http://orcid.org/0000-0003-2421-4700>

## ВИЗНАЧЕННЯ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОЛІЕТИЛЕНУ ТА ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

У роботі представлено дослідження фізико-механічних властивостей полімерних наноконпозиційних матеріалів методами молекулярної динаміки, які потрібні для моделювання термо-пружно-пластичного стану виробів в умовах експлуатації в континуальному наближенні.

Ключові слова: наноккомпозит, фізико-механічні властивості, молекулярна динаміка, моделювання.

OMELCHUK IRYNA, KARVATSKII ANTON

National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute"

### DETERMINATION OF PHYSICAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYETHYLENE AND POLYMER NANOCOMPOSITES USING THE METHODS OF MOLECULAR DYNAMICS

Today, molecular dynamics (MD) simulation become an effective method for investigating and predicting the physical and mechanical properties (PMP) of materials at the atomic scale. In this work, initial configurations of molecular systems of pure polyethylene (PE) and carbon nanotube-reinforced nanocomposites (PE-CNT) are created and described by the united atom model and Dreiding force field. Equilibration of the initial configurations of molecular models carried out using NVT and NPT ensembles in LAMMPS. Simulated complex of PMP of PE and PE-CNT includes elastic modulus, Poisson's ratio, bulk modulus, shear modulus, yield strength, mass isobaric heat capacity, and coefficient of linear thermal expansion (CLTE). The results verification of the PE molecular model showed the obtained MD simulation data either coincide with available literature data or are close to them. The results justify the use of the same algorithms to obtain reliable data on the PMP of PE-CNT. Comparing the complex PMP of molecular models of pure PE and PE-CNT, it was established the elastic modulus of PE-CNT  $\alpha=1.4$  % increases by 10.4% at 300 K and by 29.3% at 320 K. The yield strength of PE-CNT  $\alpha=1.4$  % also increases by 33.2 % at a strain rate of  $10^9$  s<sup>-1</sup> and a temperature of 300 K compared to PE. Meanwhile, mass isobaric heat capacity and CLTE decrease with increasing temperature: mass isobaric heat capacity decreases by 1.3 % at 300 K and by 4.4 % at 320 K; CLTE decreases by 20.2 % at 300 K and by 22.6 % at 320 K. Nonlinear two-parameter dependencies of the PMP of PE-CNT obtained in the temperature range (280–320) K and the volume fraction of fillers (0–1.5) %. These results allow to develop of new composite materials without conducting sufficiently complex and time-consuming numerical experiments based on MD simulation. The obtained data on the complex PMP are necessary for modeling the thermo-elastic-plastic state of products made of PE-CNT under operational conditions in a continuum approximation.

Keywords: nanocomposite, physical and mechanical properties, molecular dynamics, simulation.

### Постановка проблеми

Найбільш використовуваним полімером у різноманітних галузях науки та техніки є поліетилен (ПЕ) через його низьку вартість, високу міцність, еластичність та хімічну стійкість. Для розширення спектру застосування ПЕ та поліпшення його фізико-механічних властивостей в полімер можуть вводитися наповнювачі, що суттєво змінюють властивості полімерної матриці [1]. Використання наночастинок як наповнювачів сприяє зміні властивостей на нанорівні. Завдяки більшому зчепленню між наповнювачем і матрицею та унікальним властивостям нанорозмірних наповнювачів, фізико-механічні властивості наноккомпозитів можуть значно покращуватися [2].

Фізико-механічні властивості поліетилену добре досліджені на макроскопічному рівні [3], проте молекулярні механізми, які визначають поведінку матеріалу все ще потребують більш детального вивчення через обмеженість можливостей експериментальних методів. З іншого боку, фізико-механічні властивості полімерних композиційних матеріалів (ПКМ) сильно залежать від ряду факторів, серед яких одним із найважливіших є розподіл наповнювача в полімерній матриці, що для деяких матеріалів важко піддається контролю і ускладнює вивчення властивостей композитів [4]. ПКМ зазвичай розробляють під конкретно поставлені цілі, проте наноексперименти є дорогими і можуть лише оцінити якість виготовленого композиту, але не виявити механізми зміцнення або визначити спосіб оптимізації механічних властивостей [5].

Вирішення цих проблем вимагає використання сучасних методів математичного моделювання та обчислювальної хімії, в тому числі методів молекулярної динаміки (МД), що є потужним інструментом для отримання детальної інформації про властивості молекулярних структур матеріалів, що важливо під час розробки нових матеріалів, зокрема наноккомпозитів, та розуміння їхньої поведінки залежно від умов експлуатації.

### Аналіз останніх джерел

Перспективним наповнювачем для композитів на основі поліетилену є вуглецеві нанотрубки (ВНТ). Окрім підвищення міцності, жорсткості, теплових та електричних властивостей, введення ВНТ в поліетилен може покращити також і слабкі бар'єрні властивості ПЕ, що істотно розширює сферу застосування композиту ПЕ-ВНТ [6]. Дослідження взаємодій між компонентами ПКМ, ПЕ та ВНТ, вказують на потенціал

для створення нових матеріалів зі збалансованими фізико-механічними властивостями [7]. МД моделювання дає змогу отримувати важливі мікроскопічні дані та інформацію про молекулярні взаємодії, а результати можуть бути використані для покращення фізико-механічних властивостей шляхом оптимізації їх складу та структури.

Пластична деформація поліетилену вивчається в [8]. За допомогою методів МД розглянуто вплив швидкості деформації та щільності молекулярної системи в умовах одновісного та двовісного навантаження на механічну поведінку та еволюцію мікроструктури. Показано, що дотичний модуль і границя текучості демонструють сильну залежність від режиму деформації, швидкості деформації та масової щільності.

В [9] досліджено залежність поведінки кривої напруження-деформації від довжини ланцюгів, їхньої кількості, швидкості деформації та температури під час одновісного розтягування. Результати дослідження ґрунтуються на розподілі енергії та показують як властивості матеріалу залежать від внутрішніх механізмів, таких як довжина зв'язку, кут зв'язку, розподіл дігедральних кутів, зміна вільного об'єму та переплетення ланцюгів та їх зміну зі збільшенням деформації.

Працю [10] присвячено дослідженню міжфазної поведінки функціоналізованої вуглецевої нанотрубки поліетиленового нанокомпозиту за різних температур за допомогою МД моделювання з використанням узгодженого силового поля II покоління – PCFF. Для визначення енергії міжфазної взаємодії та міжфазної міцності на зсув нанокомпозиту проведено різні випробування на висмикування ВНТ за різних температур у діапазоні (1–400) К. Показано, що для всіх значень температур і ступенів функціональності хіральність (крісло, зигзаг) вуглецевої нанотрубки має значний вплив на енергію міжфазної взаємодії та міжфазну міцність на зсув нанокомпозиту. Відмічено раптове падіння значення енергії міжфазної взаємодії та міжфазної міцності на зсув нанокомпозиту за температури близької до його температури склування.

Основні результати статті [11] полягають у розкритті детальних механізмів взаємодії між полімерними ланцюгами та графеном методами МД, а саме впливу додавання графену на механічні властивості та стійкість до термічного та механічного зносу ПКМ. Додавання графену значно збільшує модуль пружності, об'ємний модуль та модуль зсуву. Посилена орієнтація молекулярних ланцюгів та упорядкована структура сприяє підвищенню теплопровідності та жорсткості, але стійкість до низьких температур навпаки, зменшується.

У статті [12] шляхом МД моделювання досліджено, що незалежно від температурних умов модуль пружності ПЕ армованого ВНТ типу “armchair” більшої хіральності має більш високе значення. Встановлено, що за температури склування значення модулів пружності полімерної матриці, нанокомпозиту та границі розділу раптово знижуються.

У праці [13] висвітлено вплив витягування ВНТ з полімерної матриці на механічні властивості нанокомпозиту ПЕ-ВНТ. Визначено, що у разі витягування ВНТ з ПЕ матриці на 10 Å і 50 Å спостерігається зниження поздовжнього модуля пружності матеріалу на 14,3 % і 43,8 %, відповідно.

У статті [14] наведено результати МД моделювання властивостей олігомерів полі(етилентерефталату) і, зокрема таких теплофізичних властивостей як масова ізобарна теплоємність та коефіцієнт теплового розширення. Показано, що вказані властивості добре узгоджуються з наявними експериментальними даними.

З аналізу наявних літературних джерел випливає, що наразі недостатньо досліджено вплив нефункціоналізованих нанонаповнювачів з довільним їхнім розміщенням у матриці на комплекс фізико-механічних властивостей ПКМ, потрібних для континуального моделювання термопружного стану в умовах експлуатації.

**Метою роботи є** дослідження фізико-механічних властивостей полімерів та нанокомпозитів на їх основі на прикладі ПЕ армованого ВНТ залежно від температури та об'ємної частки наповнювача. Ці результати дадуть змогу виконувати моделювання термо-пружно-пластичного стану виробів з нанокомпозиту ПЕ-ВНТ в умовах експлуатації в континуальному наближенні.

#### Виклад основного матеріалу

Для створення початкових молекулярних систем застосовано веб-платформу CHARMM-GUI [15, 16, 17], що значно спрощує процес побудови та мінімізує можливість виникнення помилок. На її основі розроблено початкові молекулярні моделі ланцюгів поліетилену різної довжини з додаванням ВНТ “armchair” хіральністю (6, 6), діаметром  $d=8,13$  Å та довжиною  $l=49,24$  Å. Для подальшої компоновки моделей нанокомпозиту використано програмне забезпечення Packmol [18], що дає змогу розміщувати молекули у великі системи заздалегідь визначених форм і розмірів та додавати окремі елементи у визначений об'єм молекулярної моделі і записувати файл координат атомів у форматі \*.pdb. Для конвертації файлів \*.pdb молекулярної системи в файл вихідних даних для моделювання в LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [19] застосовано програму VMD [20] (Visual Molecular Dynamics) та плагін Topotools [21], призначеного для роботи з топологією молекулярних систем, однією з функцій якого є підтримка різних форматів файлів даних.

Для виконання МД моделювання створено три початкові конфігурації молекулярних систем, описаних моделлю об'єднаного атома та силового поля Dreiding [22] (рис. 1). Перша з них – це чистий ПЕ, що складається з 10 ланцюгів по 500 мономерів ( $-C_2H_4-$ ), після врівноваження щільність якої за температури 300 К становила  $\rho=0,878$  г/см<sup>3</sup> (рис.1, а).

Наступні дві молекулярні моделі є моделями полімерного нанокompозиту ПЕ-ВНТ з різною об'ємною часткою ВНТ у полімерній матриці. У цих моделях використано нефункціоналізовані ВНТ з довільним розміщенням у матриці, в яких взаємодія з молекулами матриці відбувається лише завдяки силам ван дер Ваальса. Моделі містять 10 ланцюгів ПЕ (-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-)<sub>1000</sub> з різною об'ємною часткою ВНТ: у першій з них –  $\alpha=0,48\%$  (1 ВНТ), а в другій –  $\alpha=1,4\%$  (3 ВНТ). Щільність за температури 300 К першої моделі нанокompозиту ПЕ-ВНТ становить 0,885 г/см<sup>3</sup> (рис.1, б), а другої – 0,902 г/см<sup>3</sup> (рис.1, в).

Моделювання врівноваження трьох вказаних моделей здійснювалося в LAMMPS за допомогою ізохорно-ізотермічного (NVT) та ізобарно-ізотермічного (NPT) ансамблів на сервері Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2690 0 @ 2.90GHz 16 Core протягом 24 CPU год, що відповідає реальному часу 3 нс. Для досягнення рівноважного стану моделі піддавалися нагріванню до 500 К під ансамблем NVT з кроком інтегрування за часом 0,5 фс та поетапно охолоджувалася до 200 К з кроком 30 К протягом 2,5 нс та урівноважувалися (термолізувалися) за потрібних температур під NPT ансамблем протягом 500 пс. Отримані після врівноваження моделі були використані для розрахунків фізико-механічних властивостей цих матеріалів за допомогою LAMMPS.

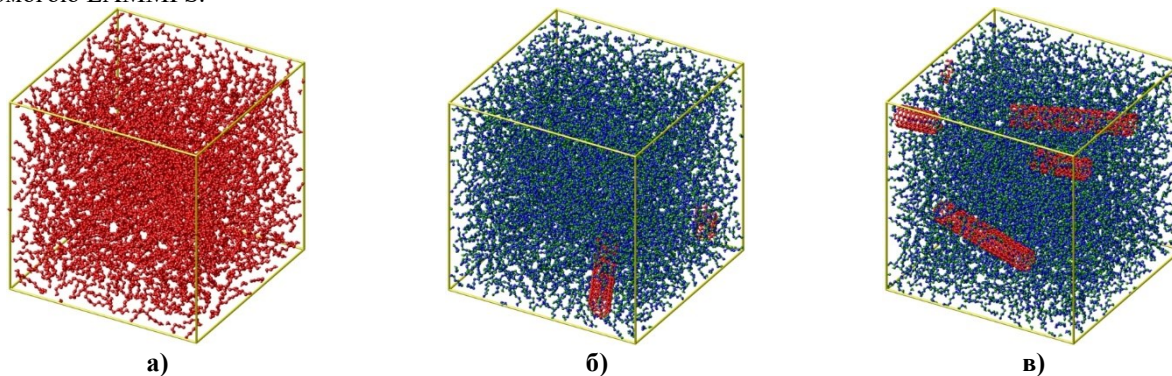


Рис. 1. Термолізовані молекулярні моделі при 300 К: а) – ПЕ ; б) – ПЕ-ВНТ ( $\alpha=0,48\%$ ); в) – ПЕ-ВНТ ( $\alpha=1,4\%$ )

Температурні залежності ефективних механічних властивостей ПЕ, що отримано з використанням модифікованого скрипта LAMMPS (in.elastic) та наведено на рис. 2 (а, б). Температурні залежності теплофізичних властивостей ПЕ, які отримано за методикою аналогічною [9], наведено на рис. 2 (в, г).

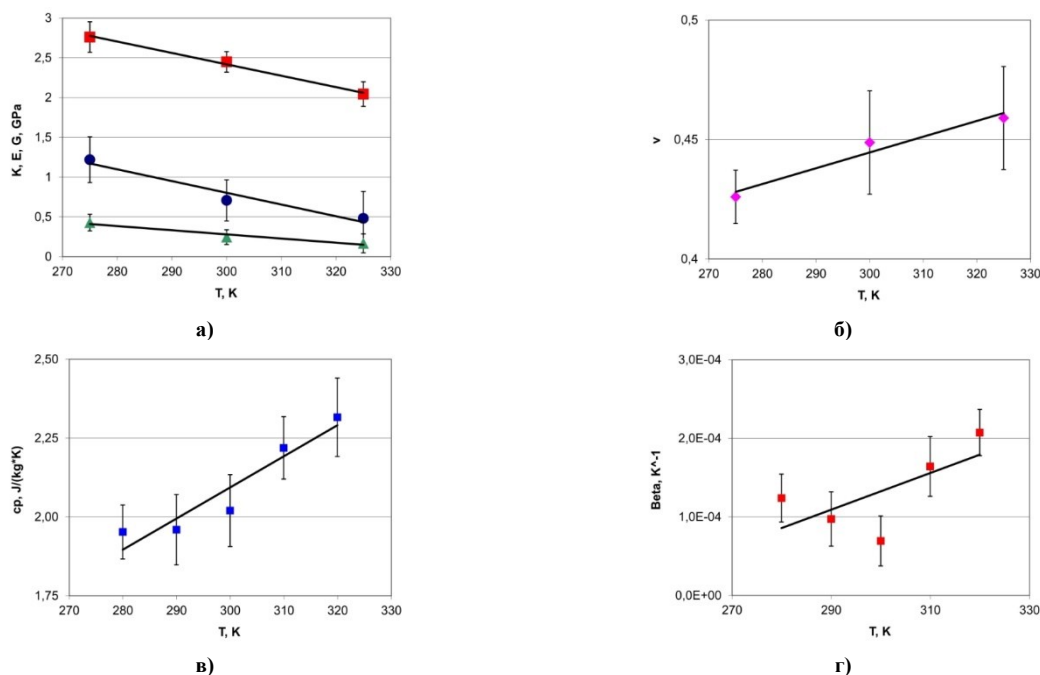


Рис. 2. Температурні залежності фізико-механічних властивостей ПЕ зі значеннями стандартного відхилення: а) – об'ємний модуль (*K*), модуль пружності (*E*), модуль зсуву (*G*); б) – коефіцієнт Пуассона ( $\nu$ ); в) – масова ізобарна теплоємність ( $c_p$ ); г) – коефіцієнт лінійного температурного розширення (КЛТР) ( $\beta$ )

Результати МД моделювання пластичної деформації ПЕ під час одновісного розтягу з побудовою кривих напруження-деформація за різної швидкості деформації ( $10^9-10^{10}$ ) с<sup>-1</sup> наведено на рис. 3.

За даними МД моделювання пластичної деформації визначено границю текучості ( $\sigma_T$ ) ПЕ за різної температури *T* і швидкості деформації  $\nu$ :

- при  $T=275$  К і  $\nu=1 \cdot 10^9$  с<sup>-1</sup> –  $\sigma_T=79$  МПа;
- при  $T=300$  К і  $\nu=1 \cdot 10^9$  с<sup>-1</sup> –  $\sigma_T=51,5$  МПа;

- при  $T=325\text{ K}$  і  $\nu=1\cdot 10^9\text{ c}^{-1}$  –  $\sigma_T=38,7\text{ МПа}$ ;
- при  $T=300\text{ K}$  і  $\nu=1\cdot 10^{10}\text{ c}^{-1}$  –  $\sigma_T=107\text{ МПа}$ .

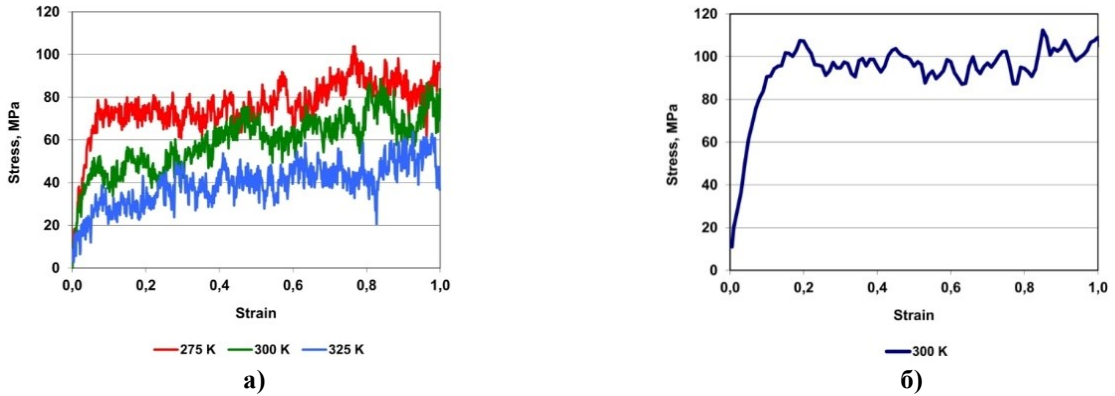


Рис. 3. Криві напруження-деформація ПЕ, підданого одновісному розтягу за різної температури зі швидкістю деформації: а) –  $\nu = 1 \times 10^9\text{ c}^{-1}$ ; б) –  $\nu = 1 \times 10^{10}\text{ c}^{-1}$

Результати порівняння поточних даних випробування на розтяг у вигляді кривих напруження-деформація за різної температури і швидкості деформації  $\nu=10^9\text{ c}^{-1}$  з даними [9] наведено на рис. 4.

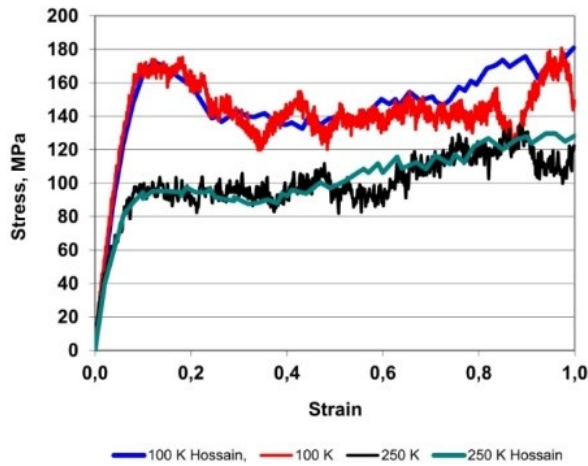


Рис. 4. Порівняння кривих напруження-деформація за швидкості деформації  $10^9\text{ c}^{-1}$  і різної температури поточних даних ПЕ з даними [9]

Таблиця 1

**Порівняння результатів МД моделювання фізико-механічних властивостей ПЕ з літературними даними за температури 293 К**

Властивість	Поточні дані	[23]	[24]	[25]	[23, 26]	[8]	[9]
Модуль пружності, ГПа	0,91	1	0,8	0,158–1,103	0,8–1,1	–	–
Модуль зсуву, ГПа	0,32	0,75	0,37	0,47	–	–	–
Коефіцієнт Пуассона	0,44	–	0,448	0,46	–	–	–
Масова ізобарна теплоємність, Дж/(кг·К)	2,02	–	–	–	1,9	–	–
КЛТР, $1/\text{K}\cdot 10^{-4}$	1,16	–	–	–	1,2–2,30	–	–
Границя текучості, МПа:							
при $\nu=10^9\text{ c}^{-1}$ і $T=100\text{ K}$ ;	172	–	–	–	–	–	173
при $\nu=10^9\text{ c}^{-1}$ і $T=250\text{ K}$ ;	97	–	–	–	–	–	95
при $\nu=10^{10}\text{ c}^{-1}$ і $T=300\text{ K}$ .	107	–	–	–	–	112,6	–

Результати верифікації молекулярної моделі ПЕ показують, що отримані дані МД моделювання або збігаються з літературними даними, або наближені до них, що також підтверджується даними [27]. Це обґрунтовує можливість за тими ж алгоритмами отримання достовірних даних з фізико-механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ.

Температурні залежності ефективних механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ з різною об’ємною часткою наповнювача наведено на рис. 5.

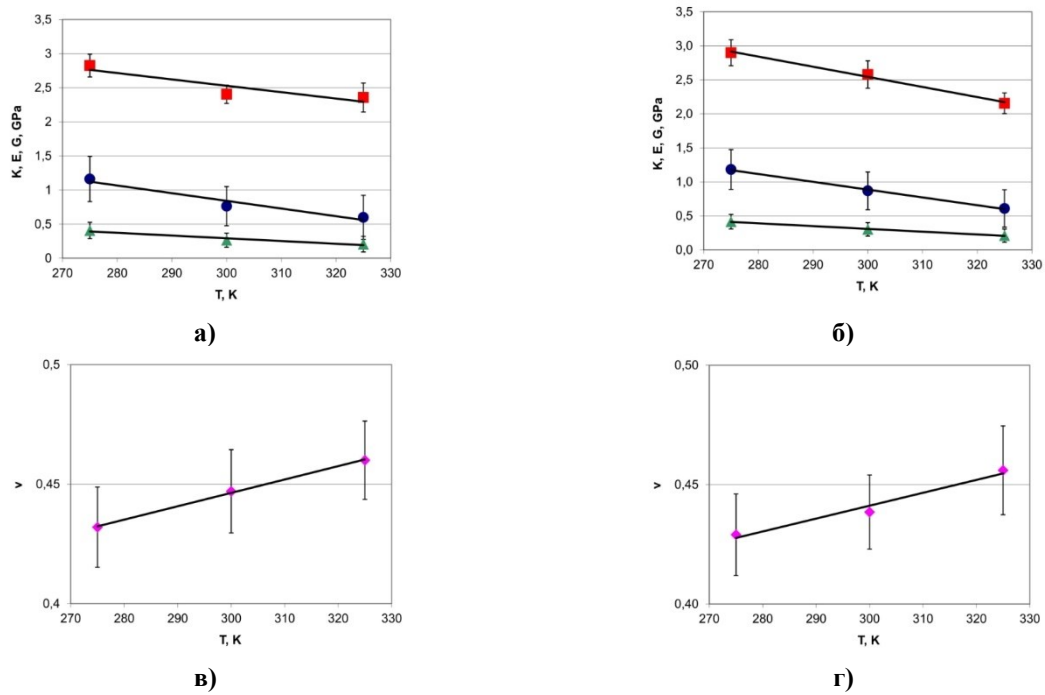


Рис. 5. Температурні залежності ефективних механічних властивостей нанокompозитів (об'ємний модуль, модуль пружності, модуль зсуву, коефіцієнт Пуассона) зі значеннями стандартного відхилення: а, в) – PE-VHT ( $\alpha=0,48\%$ ); б, г) – PE-VHT ( $\alpha=1,4\%$ )

Порівняння фізико-механічних властивостей PE і нанокompозиту PE-VHT ( $\alpha=1,4\%$ ) наведено на рис. 6.

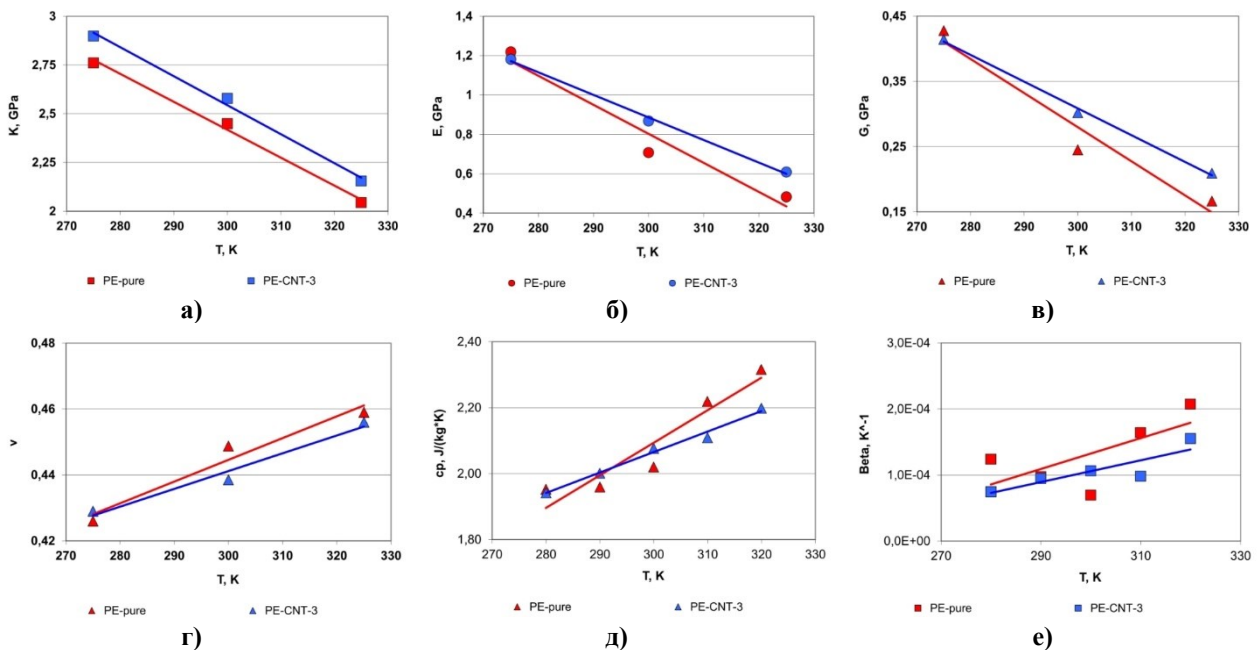


Рис. 6. Порівняння ефективних механічних та теплофізичних властивостей PE і нанокompозиту PE-VHT ( $\alpha=1,4\%$ ): а) – об'ємний модуль; б) – модуль пружності; в) – модуль зсуву; г) – коефіцієнт Пуассона д) – масова ізобарна теплоємність; е) – КЛТР

На графіках порівняння температурних залежностей фізико-механічних властивостей молекулярних моделей чистого PE та нанокompозиту PE-VHT з об'ємною часткою VHT  $\alpha=1,4\%$  (рис. 6) спостерігається ріст значень механічних властивостей композиту PE-VHT порівняно з чистим PE. Так, наприклад, модуль пружності PE-VHT  $\alpha=1,4\%$  порівняно з PE з ростом температури збільшується (рис. 6, б) на 10,4 % при 300 K та на 29,3 % при 320 K. Границя текучості PE-VHT  $\alpha=1,4\%$  порівняно з PE також підвищується на 33,2 % за швидкості деформації  $10^9\text{ c}^{-1}$  і температури 300 K. При цьому масова ізобарна теплоємність ( $c_p$ ) і КЛТР ( $\beta$ ), навпаки, зменшується з ростом температури (рис. 6, д, е):  $c_p$  – на 1,3 % при 300 K та на 4,4 % при 320 K;  $\beta$  – на 20,2 % при 300 K та на 22,6 % при 320 K.

Порівняння числових значень комплексу досліджених фізико-механічних властивостей усіх трьох досліджених молекулярних моделей за кімнатних температур, отриманих за допомогою МД моделювання, наведено в табл. 2.

Таблиця 2

## Порівняння властивостей ПЕ і нанокompозитів ПЕ-ВНТ за температури 293 К

Матеріал (поточні дані)	$K$ , ГПа	$E$ , ГПа	$G$ , ГПа	$\nu$	$\sigma_t$ , МПа за $\nu = 1 \times 10^9 \text{c}^{-1}$	$c_p$ , Дж/(кг·К)	$\beta \cdot 10^{-4}$ , К <sup>-1</sup>
ПЕ $\rho = 0,878 \text{ г/см}^3$	2,518 $\pm 0,13$	0,906 $\pm 0,26$	0,316 $\pm 0,09$	0,439 $\pm 0,022$	49,6	2,02 $\pm 0,111$	1,16 $\pm 0,03$
ПЕ-ВНТ $\alpha = 0,48 \%$ $\rho = 0,893 \text{ г/см}^3$	2,593 $\pm 0,13$	0,92 $\pm 0,29$	0,32 $\pm 0,11$	0,442 $\pm 0,016$	55,1	2,01 $\pm 0,069$	0,91 $\pm 0,02$
ПЕ-ВНТ $\alpha = 1,4 \%$ $\rho = 0,906 \text{ г/см}^3$	2,648 $\pm 0,2$	0,966 $\pm 0,28$	0,337 $\pm 0,1$	0,437 $\pm 0,016$	66,1	2,02 $\pm 0,054$	0,91 $\pm 0,02$

У програмі Mathcad з використанням даних наведених на рис. 6 отримано функціональні нелінійні двопараметричні залежності фізико-механічних властивостей ПЕ-ВНТ від температури та об'ємної частки наповнювача вигляду

$$F(T, \alpha) = \sum_{i=1}^5 k_i T^{n_i} \alpha^{m_i}, \quad (1)$$

де  $T$  – абсолютна температура, К;  $\alpha$  – об'ємна частка ВНТ, %;  $k_i, n_i, m_i$  – коефіцієнти (табл. 3).

Таблиця 3

## Числові значення коефіцієнтів формули (1)

$i$	$E$ , ГПа			$\nu$			$c_p$ , Дж/(кг·К)			$\beta$ , К <sup>-1</sup>		
	$k_i$	$n_i$	$m_i$	$k_i$	$n_i$	$m_i$	$k_i$	$n_i$	$m_i$	$k_i$	$n_i$	$m_i$
1	0,002	1	1	$-7,718 \cdot 10^{-5}$	1	1	$-2,153 \cdot 10^{-3}$	1	1	$-5,073 \cdot 10^{-7}$	1	1
2	-0,0225	0	2	$-6,615 \cdot 10^{-3}$	0	2	0,0874	0	2	$3,795 \cdot 10^{-5}$	0	2
3	-0,5090	0	1	0,2998	0	1	0,5035	0	1	$7,992 \cdot 10^{-5}$	0	1
4	4,9237	0	0	0,2541	0	0	-0,4634	0	0	$-5,811 \cdot 10^{-4}$	0	0
5	-0,0137	1	0	$6,350 \cdot 10^{-4}$	1	0	$8,524 \cdot 10^{-3}$	1	0	$2,379 \cdot 10^{-6}$	1	0

Графіки двопараметричних залежностей фізико-механічних властивостей ПЕ-ВНТ від температури та об'ємної частки наповнювача наведено на рис. 7.

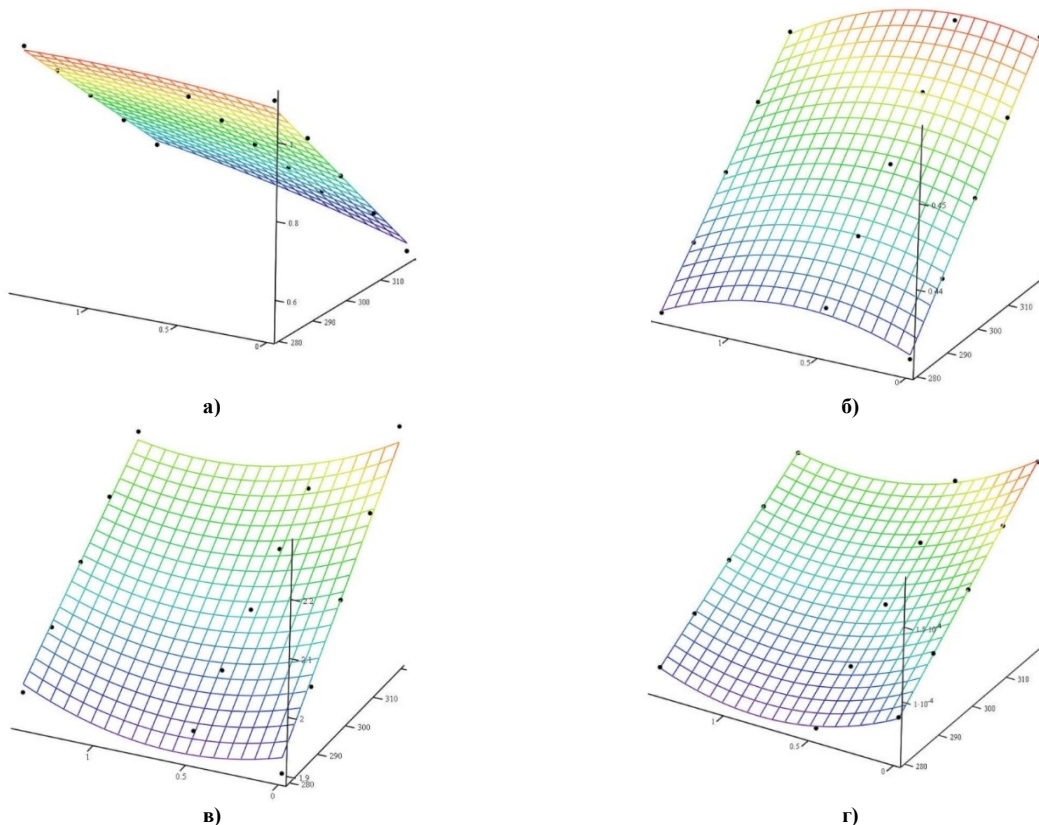


Рис. 7. Двопараметричні нелінійні залежності фізико-механічних властивостей ПЕ-ВНТ від температури та об'ємної частки наповнювача: а) – модуль пружності; б) – коефіцієнт Пуассона; в) – масова ізобарна теплоємність; г) – КЛТР

Отримані залежності (1) потрібні для оперативного прогнозування фізико-механічних властивостей ПЕ-ВНТ у діапазоні зміни температур (280–320) К та об'ємної частки наповнювачів (0–1,5) %, що дає змогу під час розробки нових композиційних матеріалів не виконувати достатньо складні й тривалі числові експерименти на базі МД моделювання.

### Висновки

У програмі LAMMPS здійснено моделювання врівноваження вказаних початкових конфігурацій молекулярних моделей за допомогою ізохорно-ізотермічного та ізобарно-ізотермічного ансамблів у продовж 3 нс з кроком інтегрування за часом 0,5 фс. У результаті отримано три врівноважені молекулярні структури з такими параметрами: перша – чистий ПЕ, що складається з 10 ланцюгів  $(-C_2H_4-)_{500}$  щільністю 0,878 г/см<sup>3</sup> за температури 300 К; друга і третя – це наноккомпозит ПЕ-ВНТ з матрицею з 10 ланцюгів  $(-C_2H_4-)_{1000}$  та з об'ємною часткою ВНТ 0,48 % і 1,4 % щільністю 0,885 г/см<sup>3</sup> і 0,902 г/см<sup>3</sup> за температури 300 К, відповідно.

З використанням програми LAMMPS проведено молекулярно-динамічне моделювання комплексу фізико-механічних властивостей полімеру ПЕ та наноккомпозитів ПЕ-ВНТ, що включають: модуль пружності, коефіцієнт Пуассона, об'ємний модуль, модуль зсуву, границю текучості, масову ізобарну теплоємність та КЛТР. Результати верифікації молекулярної моделі ПЕ показали, що отримані дані МД моделювання або збігаються з наявними літературними даними, або наближені до них. Це обґрунтовує можливість за тими ж алгоритмами отримання достовірних даних з фізико-механічних властивостей наноккомпозитів ПЕ-ВНТ.

За результатами порівняння комплексу фізико-механічних властивостей молекулярних моделей чистого ПЕ та наноккомпозиту ПЕ-ВНТ встановлено, що модуль пружності ПЕ-ВНТ  $\alpha=1,4$  % порівняно з ПЕ з ростом температури збільшується на 10,4 % при 300 К та на 29,3 % при 320 К. Границя текучості ПЕ-ВНТ  $\alpha=1,4$  % порівняно з ПЕ також підвищується на 33,2 % за швидкості деформації  $10^9$  с<sup>-1</sup> і температури 300 К. При цьому масова ізобарна теплоємність і КЛТР навпаки зменшується з ростом температури:  $c_p$  – на 1,3 % при 300 К та на 4,4 % при 320 К; КЛТР – на 20,2 % при 300 К та на 22,6 % при 320 К.

Отримано нелінійні двопараметричні залежності фізико-механічних властивостей ПЕ-ВНТ у діапазоні зміни температур (280–320) К та об'ємної частки наповнювачів (0–1,5) %, що дає змогу під час розробки нових композиційних матеріалів не виконувати достатньо складні й тривалі числові експерименти на базі МД моделювання.

Одержані дані з комплексу фізико-механічних властивостей дадуть змогу виконувати моделювання термо-пружно-пластичного стану виробів з наноккомпозиту ПЕ-ВНТ в умовах експлуатації в континуальному наближенні.

### Література

1. Wasim Ullah Khan Recent advances in nitride-filled polyethylene nanocomposites. *Advanced Composites and Hybrid Materials*. 2023. Vol. 6, no. 6. <https://doi.org/10.1007/s42114-023-00802-5>
2. / Sumaiya Akhlaq List of contributors. *Resource Recovery in Industrial Waste Waters*. [S. l.], 2023. P. xxi–xxx. <https://doi.org/10.1016/b978-0-323-95327-6.00038-5>
3. P. M. Visakh, María José Martínez Morlanes Polyethylene-Based Blends, Composites and Nanocomposites: State-of-the-Art, New Challenges and Opportunities. *Polyethylene-Based Blends, Composites and Nanocomposites*. Hoboken, NJ, USA, 2015. P. 1–19. <https://doi.org/10.1002/9781118831328.ch1>
4. Liu J., L. Zhang Computational simulation in elastomer nanocomposites. *Progress in Rubber Nanocomposites*. [S. l.], 2017. P. 523–555. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-100409-8.00015-2>
5. Zeshuai Yuan Interfacial properties of carboxylic acid functionalized CNT/polyethylene composites: A molecular dynamics simulation study. *Applied Surface Science*. 2015. Vol. 351. P. 1043–1052. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.06.039>.
6. Sunil Kumar Chaudhary, Kalyan Kumar Singh Influence of multi-walled carbon nanotubes on mechanical characteristics of glass fiber reinforced polymer composites: An experimental and analytical approach. *SPE Polymers*. 2024. <https://doi.org/10.1002/pls2.10131>
7. Zepeng Wang Molecular Dynamics Simulation of the Thermomechanical and Tribological Properties of Graphene-Reinforced Natural Rubber Nanocomposites. *Polymers*. 2022. Vol. 14, no. 23. P. 5056. <https://doi.org/10.3390/polym14235056>
8. Yi Zhang Molecular dynamics simulation of plastic deformation in polyethylene under uniaxial and biaxial tension. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part L: Journal of Materials: Design and Applications*. 2021. Vol. 236, no. 2. P. 389–403. <https://doi.org/10.1177/14644207211045821>
9. Hossain D. Molecular dynamics simulations of deformation mechanisms of amorphous polyethylene. *Polymer*. – 2010. – Vol. 51, no. 25. P. 6071–6083. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2010.10.009>.
10. Singh A., Dinesh Kumar Temperature effects on the interfacial behavior of functionalized carbon nanotube–polyethylene nanocomposite using molecular dynamics simulation. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanomaterials, Nanoengineering and Nanosystems*. 2018. Vol. 233, no. 1. P. 3–15. <https://doi.org/10.1177/2397791418817852>

11. Zepeng Wang Molecular Dynamics Simulation of the Thermomechanical and Tribological Properties of Graphene-Reinforced Natural Rubber Nanocomposites. *Polymers*. 2022. Vol. 14, no. 23. P. 5056. <https://doi.org/10.3390/polym14235056>
12. Singh A., Dinesh Kumar Effect of temperature on elastic properties of CNT-polyethylene nanocomposite and its interface using MD simulations. *Journal of Molecular Modeling*. 2018. Vol. 24, no. 7. <https://doi.org/10.1007/s00894-018-3716-6>
13. Raj Chawla, Sumit Sharma Molecular dynamics simulation of carbon nanotube pull-out from polyethylene matrix. *Composites Science and Technology*. 2017. Vol. 144. P. 169–177. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2017.03.029>
14. Molecular Dynamics Simulation of Poly(ethylene terephthalate) Oligomers [Electronic resource] / Qifei Wang [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2010. Vol. 114, no. 2. P. 786–795. <https://doi.org/10.1021/jp909762j>
15. Yeol Kyo Choi CHARMM-GUI Polymer Builder for Modeling and Simulation of Synthetic Polymers. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2021. Vol. 17, no. 4. P. 2431–2443. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00169>
16. Yeol Kyo Choi CHARMM-GUI Nanomaterial Modeler for Modeling and Simulation of Nanomaterial Systems. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2021. Vol. 18, no. 1. P. 479–493. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00996>
17. Nathan R. Kern CHARMM-GUI multicomponent assembler for modeling and simulation of complex multicomponent systems. *Biophysical Journal*. 2022. Vol. 121, no. 3. P. 529a. <https://doi.org/10.1016/j.bpj.2021.11.2789>
18. Martínez L. PACKMOL: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations. *Journal of Computational Chemistry*. 2009. Vol. 30, no. 13. P. 2157–2164. <https://doi.org/10.1002/jcc.21224>
19. / Aidan P. Thompson LAMMPS - A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*. 2021. P. 108171. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
20. William Humphrey, Andrew Dalke, Klaus Schulten VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*. 1996. Vol. 14, no. 1. P. 33–38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)
21. Axel Kohlmeyer & Josh Vermaas, (2022). TopoTools: Release 1.9 <https://doi.org/10.5281/zenodo.598373>.
22. Stephen L. Mayo, Barry D. Olafson, William A. Goddard DREIDING: a generic force field for molecular simulations. *The Journal of Physical Chemistry*. 1990. Vol. 94, no. 26. P. 8897–8909. <https://doi.org/10.1021/j100389a010>
23. High density Polyethen | Designerdata [Electronic resource] // Welcome to DesignerData | Designerdata. <https://designerdata.nl/materials/plastics/thermo-plastics/high-density-polyethen>
24. Polymer Properties Database. <https://polymerdatabase.com/home.html>.
25. Engineeringtoolbox E. The Engineering ToolBox. <https://www.engineeringtoolbox.com/>
26. Thermoplastics - Sheets and Blocks | Röchling EN. Röchling | Röchling EN. <https://www.roechling.com/industrial/products/thermoplastics-semi-finished-products/sheets-and-blocks> (date of access: 17.04.2024). – Title from screen.
27. Omelchuk I. V., Karvatskii A. Ya. Application of Molecular Dynamics Modeling to Determine Physical and Chemical Properties of Polymer and Composite Materials. *Visnyk of Vinnytsia Polytechnical Institute*, Issue 1, p. 128–137, 2024.