

DOI 10.31891/2307-5732-2024-341-5-25
УДК: 678.07:004.94-026.5(048.83)

ЧОЛАК ПРИНА

КПІ імені Ігоря Сікорського
<https://orcid.org/0000-0003-4543-4761>
e-mail: irena_om@ukr.net

ВИЗНАЧЕННЯ МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ МЕТОДАМИ СТРУКТУРНОЇ МЕХАНІКИ

У праці представлено дослідження ефективних механічних властивостей полімерних нанокомпозитів типу поліетилен-ВНТ з різною об'ємною часткою функціоналізованих ВНТ різної довжини методами структурної механіки з використанням методу скінченних елементів. Наведено порівняння ефективних значень модуля пружності та коефіцієнта Пуассона, отриманих за різними методиками осереднення даних скінченно-елементного аналізу з теоретичними залежностями та результатами молекулярно-динамічного моделювання.

Ключові слова: нанокомпозитні матеріали, механічні властивості, структурна механіка, моделювання, аналітичні залежності.

CHOLAK IRYNA

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

DETERMINATION OF MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER COMPOSITE MATERIALS USING STRUCTURAL MECHANICS METHODS

Using the finite element method, a number of experiments were conducted to study the mechanical properties of PE-CNT nanocomposites with an arbitrary arrangement of functionalized CNTs in the polymer matrix depending on the volume fraction and the length of the reinforcing elements. The used properties of nanocomposite's components were obtained by the way of molecular dynamic modeling of pure polyethylene and CNT. It was established that in the case when the CNT length does not exceed the dimensions of a representative element volumes, the evaluation of the effective values of the mechanical properties of PE-CNT nanocomposites with different volume fractions of CNTs using different methods gives convergent results: the difference between at $\alpha=0.69\%$ is 0.1 %, and at $\alpha=2.06\%$ – 0.8 %. For long CNTs that cross the boundaries of representative element volumes, the used methods give a much larger difference between the obtained values: at $\alpha=1.25\%$ it is 9.5 %, and at $\alpha=3.75\%$ – 18.2 %. The theoretical dependences of Voight and Reuss were used for operational forecasting of the effective values of the elastic modulus. It has been determined that the Reuss analytical dependence can be used to quickly predict the elastic modulus of PE-CNT nanocomposites with short CNT reinforcement. A comparison of the obtained values with the results of molecular dynamic modeling of PE-CNT nanocomposites with a CNT volume fraction of $\alpha \leq 2.08\%$ showed that the functionalization of short CNTs in the PE-CNT nanocomposite does not lead to an increase in the elastic modulus that may be related to by a significant decrease in the elastic modulus of functionalized CNTs by more than two times. It was determined that reinforcement with long CNTs contributes to an increase in the elastic modulus by 14.8 % with a volume fraction of CNTs smaller by 0.81 % due to the presence of vacancies that appear in the structure of CNTs during their functionalization and significantly affect the properties of short CNTs than long.

Keywords: nanocomposite, mechanical properties, structural mechanics, simulation, analytical dependencies.

Постановка проблеми

Полімери є одними з найважливіших матеріалів в умовах сучасної науки і технологій, що обумовлюється простотою їх виробництва та обробки, відносній дешевизні, легкості, гнучкості та ряду переваг порівняно з іншими матеріалами. Полімерні матеріали, які не містять домішок, в основному не мають тих властивостей, які б задовольнили зростаючі технологічні потреби промисловості: функціональність та екологічність, що в свою чергу підвищує попит на нові матеріали – полімерні композиційні матеріали (ПКМ), більш досконалі за своєю структурою та властивостями [1]. Полімерні нанокомпозити мають додаткову перевагу в кращій гомогенності фізичних властивостей порівняно з ПКМ, армованих волокном, що сприяє схильності до анізотропних ефектів, викликаних односпрямованим наповненням. Це, зокрема, розширює границі використання нанокомпозитів у процесах адитивних технологій [2].

Наразі значну роль як армуючий матеріал відіграють вуглецеві нанотрубки (ВНТ). ВНТ – алотроп вуглецю так само як і алмаз, графіт, графен, фулерен чи аморфний вуглець. Їх унікальними властивостями є високі значення модуля пружності та міцності на розтяг, гнучкості, електро- та теплопровідності [3]. Однак, можливості використання ВНТ обмежені їх слабкою міжфазною взаємодією, тому їхня функціоналізація є ефективним способом покращення зв'язку з матрицею та рівномірного розподілу в полімері. Основні методи функціоналізації призводять до утворення великої кількості дефектів у ВНТ і, як наслідок, погіршення їхніх фізико-механічних властивостей [4].

Для дослідження фізико-механічних властивостей нанокомпозитних полімерів окрім експериментальних методів широко використовуються методи числового моделювання [5]. Методи числового або комп'ютерного моделювання є потужними інструментами для мінімізації витрати матеріальних ресурсів та тривалості розробки нових матеріалів, зокрема нанокомпозитів. При цьому методи молекулярної динаміки (МД) і структурної механіки, та їх комбінація широко використовуються під час комп'ютерної розробки нових матеріалів. Моделювання процесів у полімерних нанокомпозитах перед їх синтезом за допомогою вказаних методів дає змогу дослідити поведінку матеріалів в наближених до реальних умов експлуатації та визначити доцільність їхнього виробництва.

Аналіз останніх досліджень

Murashima та ін. [6] продемонстрували поєднання методів МД на основі крупнозернистого методу Парінелло-Рахмана (Coarse-Grained Parinello-Rahman method (CG-PR)) з методом скінченних елементів (МСЕ).

Запропонований ієрархічний підхід багатомасштабного моделювання продемонстровано на одновісному розтягу/стисканні та двох видах асиметричної деформації зразків полімерів. Моделі матеріалу складаються з репрезентативних зразків і дрібномасштабних атомних моделей всередині кожної з них.

У роботі [7] Wang та ін. Проаналізовано нелінійні вібрації у композитах за допомогою багатоступеневого підходу знизу-вгору (bottom-up) з використанням трьох підходів: методів МД, мікромеханічного та безсіткового методів. Враховуючи, що фізико-механічні властивості матеріалу можна відстежити на взаємодії атомів/молекул, а потім відобразити на макроскопічній поведінці матеріалу, можна оцінити важливість отриманих результатів.

Для визначення впливу розподілу та швидкості деформації одношарових вуглецевих нанотрубок на деформацію матеріалу використано моделювання методами МД у дослідженні Qian та ін. [4]. Важливість цієї роботи полягає у використанні результатів експериментів для подальших розрахунків та вивчення впливу функціоналізації ВНТ на механічні властивості нанокompозитів.

У роботі [8] сформульовано математичні моделі задач напружено-деформованого стану (НДС) для моделювання випробувань зразків односпрямованих полімерних композитів, отриманих методом пошарового наплавлення (МПН). Розроблено алгоритм розв'язання оберненої задачі НДС для визначення ефективних механічних властивостей композитних виробів, надрукованих за методом МПН, який базується на отриманні осереднених розв'язків задач НДС для гетерогенного ізотропного середовища і використанні закону Гука для гомогенного ортотропного середовища. Проведено числові експерименти з визначення ефективних механічних властивостей зразків композитних полімерних матеріалів. Отримано залежності ефективних механічних властивостей полімерних композитів від об'ємної частки армувального волокна.

Невирішеною частиною проблеми є дослідження механічних властивостей полімерних композиційних матеріалів з довільним розташуванням функціоналізованих армувальних елементів за допомогою багатоступеневого комп'ютерного моделювання.

Формулювання цілей статті

Метою статті є дослідження механічних властивостей нанокompозитів з довільним розташуванням функціоналізованих армувальних елементів у континуальному наближенні методами структурної механіки на основі даних, отриманих шляхом молекулярно-динамічного моделювання.

Виклад основного матеріалу

Математична постановка задачі НДС нанокompозиційних матеріалів, що використана в цьому дослідженні, описана в роботах [8, 9]. Серія числових випробувань для визначення механічних властивостей включає три випробування на розтяг у нормальних напрямках (x , y , z) та три випробування на зсув у тангенціальних напрямках (xy , yz , xz) репрезентативних зразків, що зображено на рис. 1.

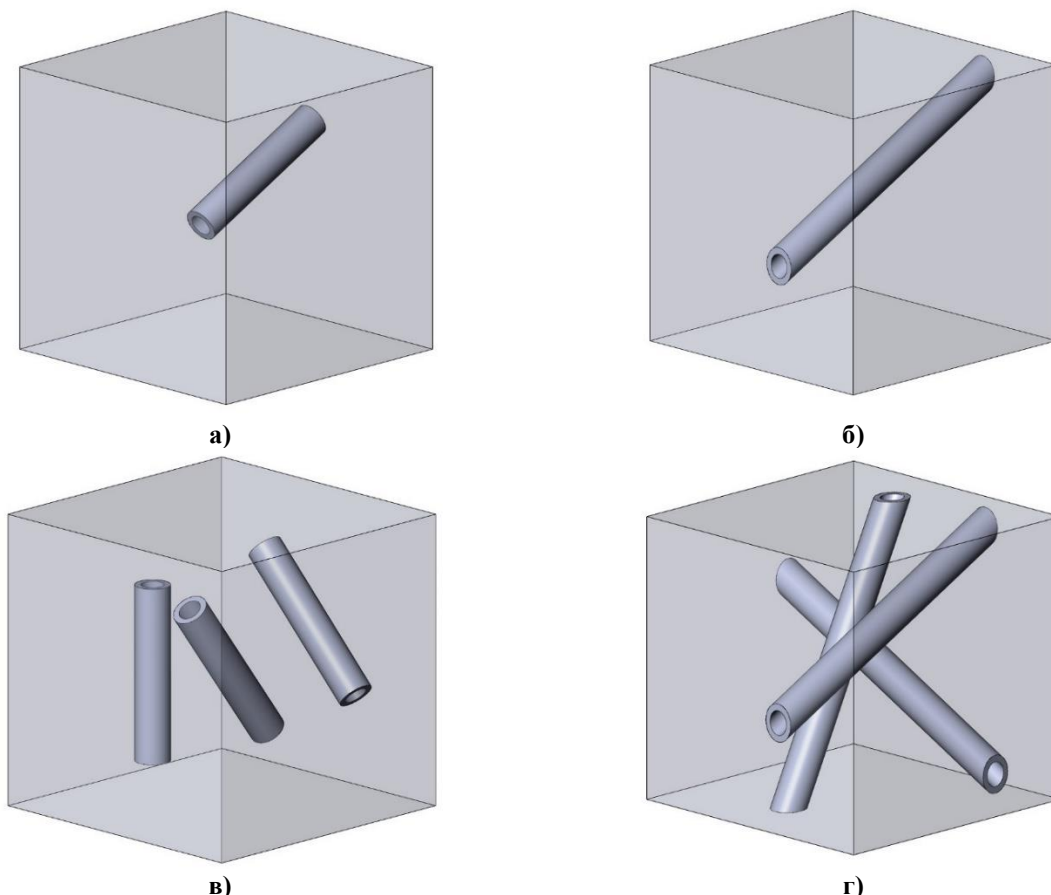


Рис. 1. Геометричні моделі репрезентативних зразків ПЕ-ВНТ для числового моделювання: а) об'ємна частка ВНТ $\alpha=0,69$ %; б) $\alpha=1,25$ %; в) $\alpha=2,06$ %; г) $\alpha=3,75$ %

Властивості компонентів нанокомпозитів ПЕ-ВНТ отримано за допомогою методів молекулярної динаміки на попередньому етапі дослідження, описаному в [10, 11], мають такі значення: матриці (поліетилен (PE)) – $E = 1,081$ ГПа, $\nu = 0,436$ та наповнювача (ВНТ) – $E = 999,46$ ГПа (для функціоналізованих ВНТ $E = 487,7$ ГПа [12]), $\nu = 0,19$. При цьому для переходу на наномасштабний рівень використовувався множник 10^9 . Розмір комірки кожного з репрезентативних зразків, представлених на рис. 1 становить $8,17 \times 8,17 \times 8,17$ нм, а ВНТ – armchair (6, 6), діаметр $0,813$ нм.

Враховуючи те, що при функціоналізації ВНТ модуль пружності може зменшитися вдвічі, але при цьому забезпечується хороший контакт з полімерною матрицею, то для дослідження механічних властивостей композиту ПЕ-ВНТ з довільним розподілом наповнювача в матриці було використано методи структурної механіки з абсолютним контактом між поверхнями двох фаз нанокомпозитного матеріалу. Для цього було застосовано метод скінченних елементів з використанням програмного забезпечення ANSYS Mechanical APDL [13].

Для визначення механічних констант гетерогенних матеріалів за результатами числового моделювання НДС зразків ПЕ-ВНТ (рис. 1) виконується осереднення отриманих тензорів напруження і деформації за об'ємом у кожному з шести числових випробувань [11]:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_i dV, \langle \varepsilon_i \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_i dV, i = \overline{1,6}, \quad (1)$$

де $\langle \rangle$ – середнє значення величини; σ_i, ε_i – компоненти тензорів напруження та деформації, відповідно; V – об'єм репрезентативної комірки.

З осереднених значень σ_i формується матриця жорсткості $c_{ij}, i, j = \overline{1,6}$ для подальшого обчислення ефективних значень механічних властивостей.

Для визначення ефективних механічних властивостей нанокомпозитів ПЕ-ВНТ за даними числового моделювання НДС зразків (рис. 1) використано дві методики: перша побудована на співвідношеннях Clancy і Frankland [14], а друга – на теорії Hill [15].

За методикою [14] для знаходження ефективних значень модуля пружності E та коефіцієнта Пуассона ν спочатку обчислюються коефіцієнти Lamé λ і μ з використанням матриці жорсткості $c_{ij}, i, j = \overline{1,6}$ за формулами:

$$\mu = \frac{4a - 2b + 3c}{33}, \quad (2)$$

$$\lambda = \frac{2a + c - 15\mu}{6}, \quad (3)$$

де $a = c_{11} + c_{22} + c_{33}, b = c_{12} + c_{13} + c_{21} + c_{23} + c_{32}, c = c_{44} + c_{55} + c_{66}$.

Зв'язок між ефективними значеннями технічних пружних констант і коефіцієнтами Lamé λ і μ встановлюється формулами:

$$\begin{cases} E_{ef} = \mu \frac{3\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu}, \\ \nu_{ef} = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}. \end{cases} \quad (4)$$

За теорією Hill [15] спочатку визначаються найбільші і найменші значення об'ємного модулю та модулю зсуву за Voight та Reuss відповідно:

$$\begin{cases} 9K_V = (c_{11} + c_{22} + c_{33}) + 2(c_{12} + c_{23} + c_{31}); \\ 15G_V = (c_{11} + c_{22} + c_{33}) - (c_{12} + c_{23} + c_{31}) + 3(c_{44} + c_{55} + c_{66}); \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} \frac{1}{K_R} = (s_{11} + s_{22} + s_{33}) + 2(s_{12} + s_{23} + s_{31}); \\ \frac{15}{G_R} = 4(s_{11} + s_{22} + s_{33}) - 4(s_{12} + s_{23} + s_{31}) + 3(s_{44} + s_{55} + s_{66}), \end{cases} \quad (6)$$

де K_V, G_V, K_R, G_R – усереднені значення об'ємного модулю та модулю зсуву за Voight та Reuss відповідно. s_{ij} – коефіцієнти матриці піддатливості визначаються співвідношенням:

$$[s] = [c]^{-1}. \quad (7)$$

За теорією Hill найближче до експериментальних значень модулів є середнє арифметичне двох граничних значень модулів [15]:

$$K = \frac{K_R + K_V}{2}, \quad (8)$$

$$G = \frac{G_R + G_V}{2}. \quad (9)$$

З отриманих значень K та G визначаються ефективні значення модуля пружності та коефіцієнта Пуассона з лінійної системи рівнянь вигляду:

$$\begin{cases} E_{ef} = 3K(1 - 2\nu); \\ \nu_{ef} = \frac{E}{2G} - 1. \end{cases} \quad (10)$$

Для порівняння отриманих механічних властивостей ПЕ-ВНТ за формулами (4) і (10) можна скористатися теоретичними залежностями Voight і Reuss. Припускаючи, що матеріал знаходиться під дією сталої деформації та сталого напруження, для визначення граничних значень модуля пружності E можуть бути використані аналітичні співвідношення Voight (11) та Reuss (12) [15]:

$$E_{ef}^V = \sum_{i=1}^n E_i \alpha_i \quad (11)$$

$$E_{ef}^R = \left[\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i}{E_i} \right]^{-1} \quad (12)$$

де E_i – модуль пружності i -го матеріалу нанокompозиту; α_i – об'ємна частка i -го матеріалу у складі нанокompозиту; n – кількість компонент нанокompозиту.

Для оцінки достовірності результатів числового моделювання виконано дослідження сіткової збіжності методом подвійного перерахунку. Встановлено, що за даними числового моделювання похибка визначення модуля пружності не перевищує 0,2 %, а коефіцієнта Пуассона – 0,023 %.

Результати визначення механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ, отриманих за даними числового моделювання НДС та аналітичними залежностями наведено в табл. 1.

Таблиця 1

Механічні властивості нанокompозитів ПЕ-ВНТ залежно від об'ємної частки та довжини ВНТ

Кількість ВНТ/довжина/ α	Clancy, Frankland [14]			Hill [15]			Reuss [8, 9]	Voight [8, 9]
	E_{ef}	G_{ef}	ν_{ef}	E_{ef}	G_{ef}	ν_{ef}	E_{ef}	E_{ef}
1/ 4,92 нм/ 0,69 %	1,112	0,432	0,435	1,113	0,388	0,434	1,077	4,405
3/ 4,92 нм/ 2,06 %	1,182	0,413	0,432	1,172	0,409	0,433	1,092	11,074
1/ 8,17 нм/ 1,25 %	1,387	0,487	0,422	1,254	0,439	0,430	1,083	7,165
3/ 8,17 нм/ 3,75 %	1,965	0,699	0,404	1,607	0,565	0,421	1,112	19,355

Результати порівняння механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ, отриманих за допомогою МСЕ та МД моделювання за температури 293 К наведено на рис. 2.

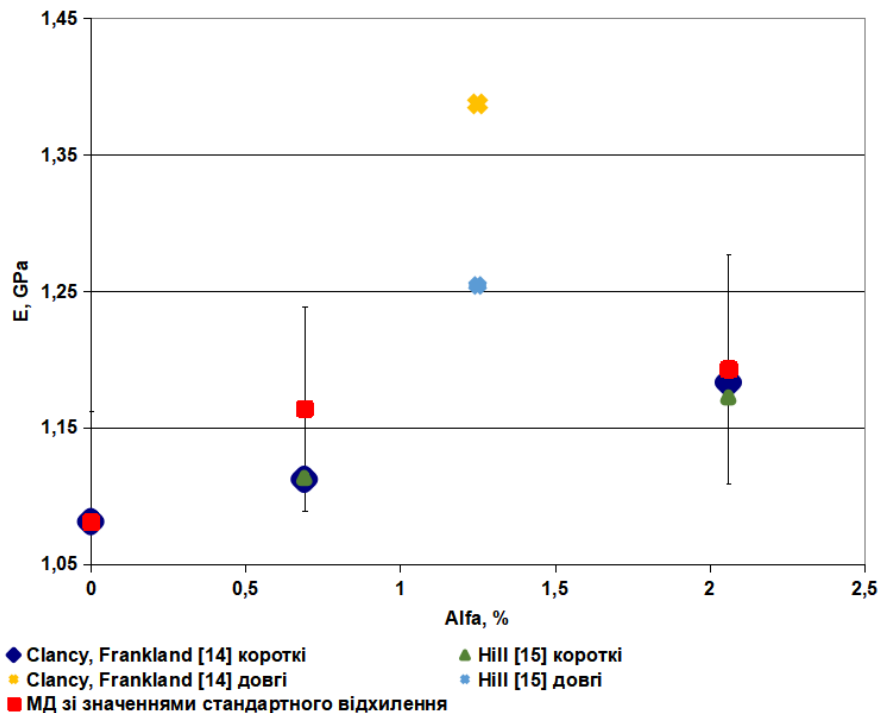


Рис. 2. Порівняння механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ

Аналіз отриманих результатів показує, що:

– у разі коротких ВНТ (рис. 1 а, в), коли ВНТ знаходяться всередині репрезентативних зразків, ефективні значення модуля пружності та коефіцієнта Пуассона нанокompозитів ПЕ-ВНТ, отримані за методиками [14] і [15], практично збігаються між собою (табл. 1). Різниця між E_{ef} при $\alpha=0,69$ % становить 0,1%, а при $\alpha=2,06$ % – 0,8%;

– у випадку довгих ВНТ (рис. 1 б, г), коли ВНТ перетинають границі репрезентативних зразків, ефективні механічні властивості ПЕ-ВНТ суттєво відрізняються між собою. Різниця між значеннями E_{ef} при $\alpha=1,25$ % становить 9,5%, а при $\alpha=3,75$ % – 18,2%;

– аналітичні залежності за Reuss у разі коротких ВНТ (рис. 1 а, в) дають наближені значення модуля пружності до відповідних значень розрахованих за допомогою МСЕ, в той час як за аналітичними залежностями Voight отримано значно завищені значення. Тому, для оперативного визначення модуля пружності ПЕ-ВНТ можна скористатися аналітичною залежністю Reuss для коротких ВНТ;

– функціоналізація ВНТ у нанокompозиті ПЕ-ВНТ не призводить до підвищення модуля пружності (рис. 2), що може бути пов'язано зі значним, більше ніж у два рази, зменшенням модуля пружності функціоналізованих ВНТ.

– використання довгих ВНТ для армування поліетилену значно більше сприяє збільшенню модуля пружності аніж об'ємна частка наповнювача (рис. 2), що пов'язано з наявністю вакансій (дефектів) у кристалічній структурі ВНТ, які при взаємодії з молекулами поліетилену чи іншого полімеру мають значно менший вплив на деформацію довгих ВНТ ніж коротких, а, відповідно і на ефективність їхнього використання як наповнювача в нанокompозитах.

Висновки

За допомогою МСЕ, реалізованого в програмі ANSYS Mechanical APDL виконано дослідження механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ з довільним розташуванням функціоналізованих ВНТ в полімерній матриці. Для оцінки механічних властивостей нанокompозитів типу ПЕ-ВНТ властивості окремих компонентів нанокompозиту отримано шляхом молекулярно-динамічного моделювання. У випадку, коли довжина ВНТ не перевищує розмірів репрезентативного зразка, використані методики оцінки ефективних значень механічних властивостей нанокompозитів ПЕ-ВНТ з різною об'ємною часткою ВНТ дають збіжні результати: різниця між E_{ef} при $\alpha=0,69$ % становить 0,1%, а при $\alpha=2,06$ % – 0,8%. Для довгих ВНТ, які перетинають границі репрезентативних зразків, використані методики дають значно більшу різницю між отриманими значеннями E_{ef} : при $\alpha=1,25$ % становить 9,5%, а при $\alpha=3,75$ % – 18,2%.

Для оперативного прогнозування ефективних значень модуля пружності використано теоретичні залежності Voight та Reuss, які дають граничні значення величини. Проте, у випадку наповнення короткими ВНТ аналітичні залежності за Reuss дають значення модуля пружності близькі до відповідних значень розрахованих за допомогою МСЕ, тоді як за аналітичними залежностями Voight отримано значно завищені значення. Тому, для оперативного визначення модуля пружності ПЕ-ВНТ можна скористатися аналітичною залежністю Reuss для коротких ВНТ.

На підставі порівняння отриманих значень з результатами молекулярно-динамічного моделювання нанокompозитів ПЕ-ВНТ з об'ємною часткою ВНТ $\alpha \leq 2,08$ %, визначено, що функціоналізація коротких ВНТ у нанокompозиті ПЕ-ВНТ не призводить до підвищення модуля пружності, що може бути пов'язано зі значним, більше ніж у два рази, зменшенням модуля пружності функціоналізованих ВНТ.

При порівнянні модуля пружності зразків поліетилену армованого короткими та довгими ВНТ, визначено, що армування довгими ВНТ сприяє збільшенню модуля пружності на 14,8 % (у 1,17 разів) при об'ємній частці ВНТ меншій на 0,81 % через наявність вакансій, які з'являються в структурі ВНТ при їх функціоналізації та значно більше впливають на властивості коротких ВНТ ніж довгих.

В подальшому планується продовжити започатковані дослідження в напрямку практичного застосування нанокompозитів типу ПЕ-ВНТ з використанням отриманих механічних властивостей.

Література

1. Nasreen Taj M. et al. Polymer – silicate nanocomposites: Package material for nanodevices as an EMI shielding. *Materials Today: Proceedings*. 2021. Vol. 46. P. 6017–6021. URL: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.12.1159>.
2. Al Rashid A. et al. Additive manufacturing of polymer nanocomposites: Needs and challenges in materials, processes, and applications. *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. Vol. 14. P. 910–941. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.07.016>
3. Islam K., Saha S., Masud A. K. M. Molecular dynamics simulation of the mechanical properties of CNT-polyoxymethylene composite with a reactive forcefield. *Molecular Simulation*. 2020. Vol. 46, no. 5. P. 380–387. URL: <https://doi.org/10.1080/08927022.2020.1711904>
4. Qian W.-M. et al. Investigation on the effect of functionalization of single-walled carbon nanotubes on the mechanical properties of epoxy glass composites: Experimental and molecular dynamics simulation. *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. Vol. 12. P. 1931–1945. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.03.104>.
5. Aztatzi-Pluma D. et al. Study of the Molecular Interactions between Functionalized Carbon Nanotubes and Chitosan. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2016. Vol. 120, no. 4. P. 2371–2378. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b08136>
6. Murashima T., Urata S., Li S. Coupling finite element method with large scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS) for hierarchical multiscale simulations. *The European Physical Journal B*. 2019. Vol. 92, no. 9. URL: <https://doi.org/10.1140/epjb/e2019-100105-9>

7. Wang J. F. et al. Effect of CNT volume fractions on nonlinear vibrations of PMMA/CNT composite plates: A multiscale simulation. *Thin-Walled Structures*. 2022. Vol. 170. P. 108513. URL: <https://doi.org/10.1016/j.tws.2021.108513>
8. Соловей В. В., Карвацький А. Я., Лазарев Т. В., Мікульонюк І. О., Омельчук І. В. Визначення механічних властивостей 3d-друкованих полімерних виробів методами структурної механіки. Вісник НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського». Серія «Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження». 2021. № 2 (20). С. 16–32. URL: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2021.235853>
9. Морозов А.В. Визначення ефективних пружних характеристик односпрямованого композиційного матеріалу. Вчені записки ТНУ імені В.І. Вернадського. Серія: технічні науки. 2020. Т. 1, № 2. С. 44–51. URL: <https://doi.org/10.32838/2663-5941/2020.2-1/07>
10. Омельчук І. В., Карвацький А. Я. Застосування молекулярно-динамічного моделювання для визначення фізико-хімічних властивостей полімерних та композитних матеріалів на їхній основі. Вісник ВПІ. 2024. № 1. С. 128–137. <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2024-172-1-128-137>
11. Омельчук І., Карвацький А. Визначення фізико-механічних властивостей поліетилену та полімерних нанокомпозитів методами молекулярної динаміки. Вісник Хмельницького національного університету. Серія: Технічні науки. 2024. Т. 335, № 3(1). С. 158–165. URL: <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2024-335-3-23>.
12. Esbati A. H., Irani S. Mechanical properties and fracture analysis of functionalized carbon nanotube embedded by polymer matrix. *Aerospace Science and Technology*. 2016. Vol. 55. P. 120–130. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ast.2016.05.023>
13. Thompson M. and Thompson J. (2017), ANSYS Mechanical APDL for Finite Element Analysis, 1st ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK. Thompson J., Thompson M.. ANSYS Mechanical APDL for Finite Element Analysis. 1st ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2017. 466 p.
14. Clancy T., Frankland S.-J., Hinkley J. Prediction of Material Properties of Nanostructured Polymer Composites Using Atomistic Simulations. 50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference, Palm Springs, California. Reston, Virginia, 2009. URL: <https://doi.org/10.2514/6.2009-2385>.
15. Wang Z. et al. Molecular Dynamics Simulation of the Thermomechanical and Tribological Properties of Graphene-Reinforced Natural Rubber Nanocomposites. *Polymers*. 2022. Vol. 14, no. 23. P. 5056. URL: <https://doi.org/10.3390/polym14235056>

References

1. Nasreen Taj M. et al. Polymer – silicate nanocomposites: Package material for nanodevices as an EMI shielding. *Materials Today: Proceedings*. 2021. Vol. 46. P. 6017–6021. URL: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.12.1159>.
2. Al Rashid A. et al. Additive manufacturing of polymer nanocomposites: Needs and challenges in materials, processes, and applications. *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. Vol. 14. P. 910–941. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.07.016>
3. Islam K., Saha S., Masud A. K. M. Molecular dynamics simulation of the mechanical properties of CNT-polyoxymethylene composite with a reactive forcefield. *Molecular Simulation*. 2020. Vol. 46, no. 5. P. 380–387. URL: <https://doi.org/10.1080/08927022.2020.1711904>
4. Qian W.-M. et al. Investigation on the effect of functionalization of single-walled carbon nanotubes on the mechanical properties of epoxy glass composites: Experimental and molecular dynamics simulation. *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. Vol. 12. P. 1931–1945. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.03.104>.
5. Aztatzi-Pluma D. et al. Study of the Molecular Interactions between Functionalized Carbon Nanotubes and Chitosan. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2016. Vol. 120, no. 4. P. 2371–2378. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b08136>
6. Murashima T., Urata S., Li S. Coupling finite element method with large scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS) for hierarchical multiscale simulations. *The European Physical Journal B*. 2019. Vol. 92, no. 9. URL: <https://doi.org/10.1140/epjb/e2019-100105-9>
7. Wang J. F. et al. Effect of CNT volume fractions on nonlinear vibrations of PMMA/CNT composite plates: A multiscale simulation. *Thin-Walled Structures*. 2022. Vol. 170. P. 108513. URL: <https://doi.org/10.1016/j.tws.2021.108513>
8. Determination of the mechanical properties of 3d-printed polymer products by methods of structural mechanics / V. Solovei et al. *Proceedings of the NTUU “Igor Sikorsky KPI”*. Series: Chemical engineering, ecology and resource saving. 2021. No. 2. P. 16–32. URL: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2021.235853> (date of access: 13.09.2024)
9. Morozov A. V. Determination of effective elastic characteristics of unidirectional composite material. *Scientific notes of Taurida National V.I. Vernadsky University*. Series: Technical Sciences. 2020. Vol. 1, no. 2. P. 44–51. URL: <https://doi.org/10.32838/2663-5941/2020.2-1/07> (date of access: 13.09.2024).
10. Omelchuk I. V., Karvatskii A. Y. Application of Molecular Dynamics Modeling to Determine Physical and Chemical Properties of Polymer and Composite Materials. *Visnyk of Vinnytsia Politechnical Institute*. 2024. Vol. 172, no. 1. P. 128–137. URL: <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2024-172-1-128-137> (date of access: 13.09.2024).
11. Omelchuk I., Karvatskii A. Determination of physical and mechanical properties of polyethylene and polymer nanocomposites using the methods of molecular dynamics. *Herald of Khmelnytskyi National University*. Technical sciences. 2024. Vol. 335, no. 3(1). P. 158–165. URL: <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2024-335-3-23> (date of access: 09.09.2024).
12. Esbati A. H., Irani S. Mechanical properties and fracture analysis of functionalized carbon nanotube embedded by polymer matrix. *Aerospace Science and Technology*. 2016. Vol. 55. P. 120–130. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ast.2016.05.023>
13. Thompson M. and Thompson J. (2017), ANSYS Mechanical APDL for Finite Element Analysis, 1st ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK. Thompson J., Thompson M.. ANSYS Mechanical APDL for Finite Element Analysis. 1st ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2017. 466 p.
14. Clancy T., Frankland S.-J., Hinkley J. Prediction of Material Properties of Nanostructured Polymer Composites Using Atomistic Simulations. 50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference, Palm Springs, California. Reston, Virginia, 2009. URL: <https://doi.org/10.2514/6.2009-2385>.
15. Wang Z. et al. Molecular Dynamics Simulation of the Thermomechanical and Tribological Properties of Graphene-Reinforced Natural Rubber Nanocomposites. *Polymers*. 2022. Vol. 14, no. 23. P. 5056. URL: <https://doi.org/10.3390/polym14235056>