

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОМПОЗИТОВ «(НАНО)МЕТАЛЛ-ГРАФЕН» МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Б.Н. Семенов<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург 195251, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 198504, Россия

<sup>3</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Россия

\*e-mail: semenov@bs1892.spb.edu

**Аннотация.** Для оценки влияния графеновых включений на деформационные характеристики нанокомпозита «металл-графен» проведен конечно-элементный анализ деформирования представительного объема с последующей гомогенизацией механических свойств и исследована зависимость эффективных модулей и пластического течения от концентрации графеновых включений. Показано, что влияние включений на упругие модули и предел пластичности нанокомпозита не является значимым. Исследовано влияние графеновых включений на прочность и трещиностойкость нанокомпозита «(нано)металл-графен». Результаты конечно-элементного моделирования свидетельствуют о том, что в нанокомпозите наблюдается снижение концентрации напряжений в окрестности конца трещины при его приближении к графеновому включению.

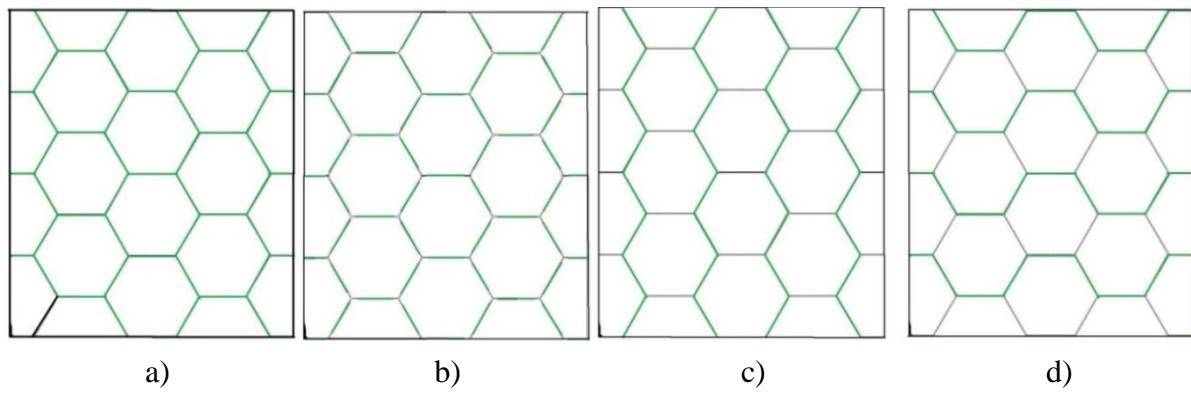
## 1. Введение

Благодаря своим уникальным механическим свойствам, таким как высокий модуль Юнга (1 ТПа), предел прочности (130 ГПа), высокая степень деформируемости (более 20 %) [1, 2], и высокой удельной площади поверхности графен очень перспективен для использования в качестве армирующего элемента в различных композиционных материалах; см., например, [3-8]. Наряду с монослойным графеном графеновые листы, состоящие из нескольких слоев графена, обладают сходными свойствами. Однако использование графеновых листов в качестве наполнителя в металломатричных композитах до недавнего времени было сопряжено с серьезными технологическими проблемами. В последние годы удалось найти решение этих проблем и получить металломатричные нанокомпозиты, упрочненные графеновыми включениями, расположенные преимущественно на границах зерен металлической матрицы [4-8]. Было отмечено, что композиты системы «металл-графен» имеют высокую прочность и твердость. В частности, у алюминиевых композитов при армировании графеновыми листами с массовой долей 0.3 % предел прочности увеличился на 69 % [5].

Целью настоящей работы является компьютерное моделирование в среде пакета ANSYS деформирования и разрушения композита «металл-графен», определение его эффективных механических параметров и объяснение повышения прочности с позиций механики деформируемого твердого тела.

## 2. Моделирование эффективных свойств композита «металл-графен»

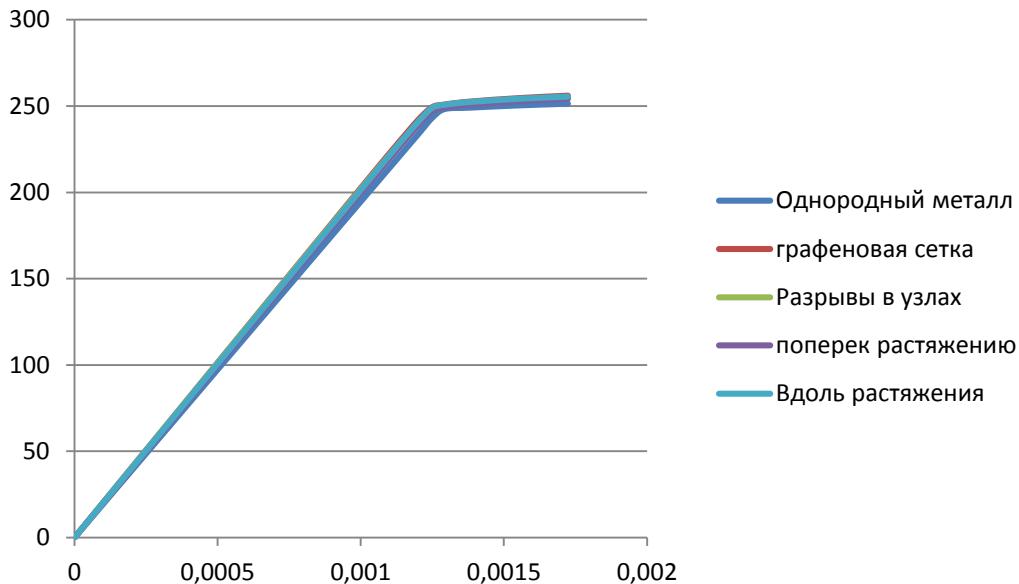
Композит «металл-графен» состоит из поликристаллической металлической матрицы и графеновых прослоек, расположенных в границах зерен металлической матрицы. Проведем оценку эффективных механических свойств композита «металл-графен» при помощи компьютерного моделирования деформирования представительного объема металло-композита для различного расположения графеновых прослоек в границах зерен. На Рис. 1 представлены структуры композита с различным расположение графеновых прослоек: а) графеновые листы образуют непрерывную ячеистую структуру, в ячейки которой помещены зерна металла, б) графеновые листы, расположены на границах зерен с разрывами в узлах ячеек, с) графеновые листы расположены на границах зерен, образуя непрерывные структуры вдоль линии растяжения, д) графеновые листы расположены на границах зерен, образуя непрерывные структуры поперек линии растяжения. В расчетной модели был выбран характерный размер одной ячейки 1.73 мкм, а толщина графеновых листов 10 нм. Представительный объем, для которого производились расчеты, с учетом симметрии области имел размеры 3 мкм x 3.48 мкм. Представительный объем растягивался в вертикальном направлении и строилась зависимость относительного удлинения от приложенной силы. Были выбраны следующие механические свойства металлической матрицы: модуль Юнга  $E = 200$  ГПа, коэффициент Пуассона  $\nu = 0.3$ , предел текучести  $\sigma_T = 250$  МПа. Для графена - модуль Юнга  $E = 1000$  ГПа, коэффициент Пуассона  $\nu = 0.345$ . В расчетной модели предполагалось, что металлическая матрица подчиняется закону идеального упруго-пластического деформирования без упрочнения.



**Рис. 1.** Различные варианты армирования представительного объема графеновыми листами: а) непрерывная сетка графеновых листов по границам зерен, б) графеновые листы по границам зерен, разомкнутые в узлах сетки, в) графеновые листы расположены по границам зерен вдоль направления растяжения, г) графеновые листы расположены по границам зерен поперек направления растяжения.

На Рис. 2 представлены полученные по результатам компьютерного моделирования кривые напряжение – деформация для представительных объемов с различными вариантами армирования этого объема графеновыми листами.

Полученные эффективные параметры (модуль Юнга, предел текучести) для всех рассмотренных структур композита «металл-графен» незначительно отличаются от соответствующих параметров металлической матрицы. Наличие в нанокомпозите графеновых включений с высоким упругим модулем приводит к деформационному упрочнению материала, что объясняется упругим деформированием графена вплоть до разрушения в широком диапазоне деформаций.



**Рис. 2.** Кривые деформирования (напряжение - относительное удлинение) для структур a), b), c) и d) Рис. 1.

### 3. Прочностные свойства композита «металл-графен»

Многочисленные эксперименты [3-8] свидетельствуют, что композиты системы «металл-графен» характеризуются прочностными свойствами, значительно превышающими свойства металлической матрицы. Причин этого повышения прочностных свойств несколько.

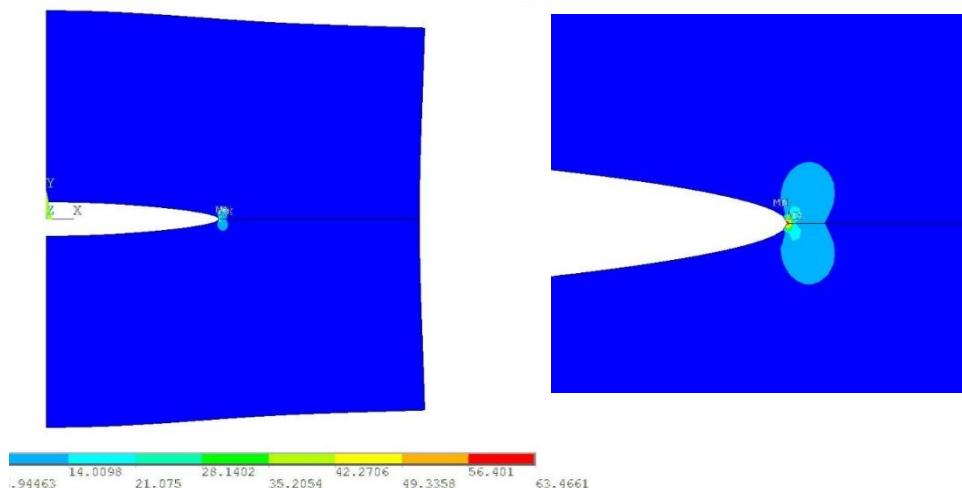
Во-первых, графен обладает чрезвычайно высокими прочностными и адгезионными свойствами. Поэтому для разрушения графенового листа и/или вырывания его из металлической матрицы требуются значительные усилия. Во-вторых, графен является высокомодульным материалом с высокой степенью деформируемости, поэтому он служит препятствием для возникшей в металлической матрице трещины.

Для оценки прочностных свойств композита «металл-графен» исследуем влияние графенового листа на концентрацию напряжений в окрестности зародившейся в металлической матрице трещины. Проведем сравнение напряженного состояния в окрестности трещины в металлической матрице с армирующим графеновым элементом, расположенным вблизи кончика трещины, с напряженным состоянием в окрестности трещины в однородном металлическом материале.

В качестве расчетной модели рассмотрим прямоугольную область 400 нм x 200 нм с центральной трещиной, расположенной посередине образца вдоль оси  $x$ , длина трещины 190 нм. Прямоугольник растягивается равномерно распределенными по границам области  $y = \pm 100$  нм усилиями  $p$ . Задача решается методом конечных элементов при помощи пакета ANSYS.

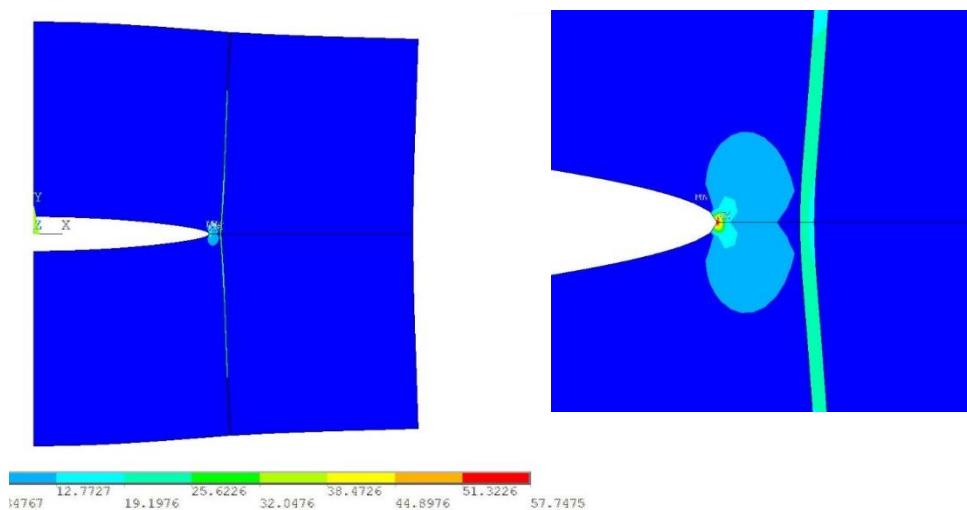
В окрестности конца трещины введена точка концентрации с примыкающими к ней специальными элементами, радиус которых равен 0.5 нм. Рассматриваются 3 задачи: 1) прямоугольник из материала металлической матрицы, 2) прямоугольник из материала металлической матрицы с армирующим элементом в виде 2-х узких вертикальных прямоугольных областей шириной 1 нм, расположенных на расстоянии 5 нм от вершин трещины, 3) армирующие элементы в виде прямоугольников расположены под углом 60° к трещине на расстоянии 5 нм от ее вершины. Армирующий элемент имеет механические свойства графена, а материал металлической матрицы – железа. В силу симметрии задачи относительно оси ординат рассматривается только правая половина расчетной

На Рис. 3 приведено распределение максимальных растягивающих напряжений, отнесенных к приложенным усилиям, для однородного материала. В этом случае максимальные растягивающие напряжения, усредненные на элементе, примыкающем к вершине трещины, и отнесенные к приложенной нагрузке, равны  $S_{1max}/p = 63.47$ , а коэффициент интенсивности напряжений  $K_I$ , отнесенный к приложенной нагрузке, равен  $K_I/p = 32.53 \text{ нм}^{-1/2}$ .



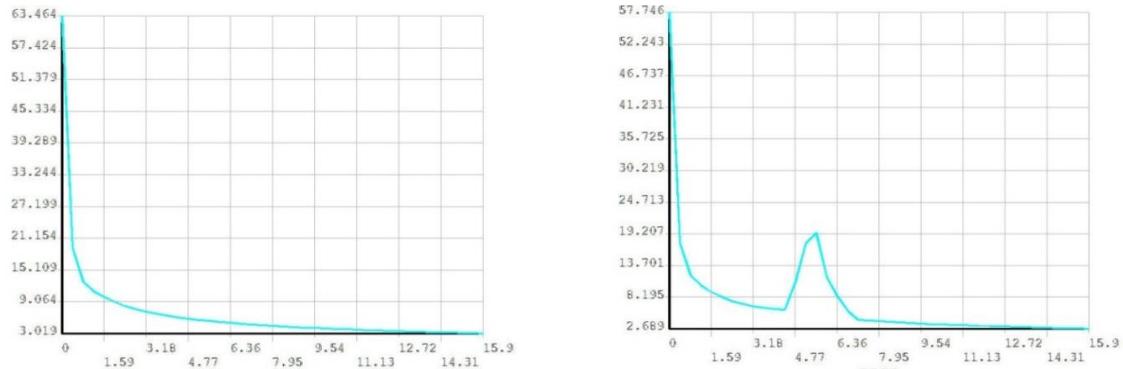
**Рис. 3.** Распределение максимальных растягивающих напряжений  $S_1$ , отнесенных к нагрузке  $p$ , в окрестности трещины в однородном металле.

В случае армирования вертикальной графеновой вставкой максимальные растягивающие напряжения, усредненные на элементе, примыкающем к вершине трещины, и отнесенные к приложенной нагрузке, равны  $S_{1max}/p = 57.74$ , а коэффициент интенсивности напряжений  $K_I$ , отнесенный к нагрузке, равен  $K_I/p = 29.57 \text{ нм}^{-1/2}$  (Рис. 4).



**Рис. 4.** Распределение максимальных растягивающих напряжений  $S_1$ , отнесенных к нагрузке  $p$ , в окрестности трещины в металле, армированном графеновыми листами толщиной 1 нм.

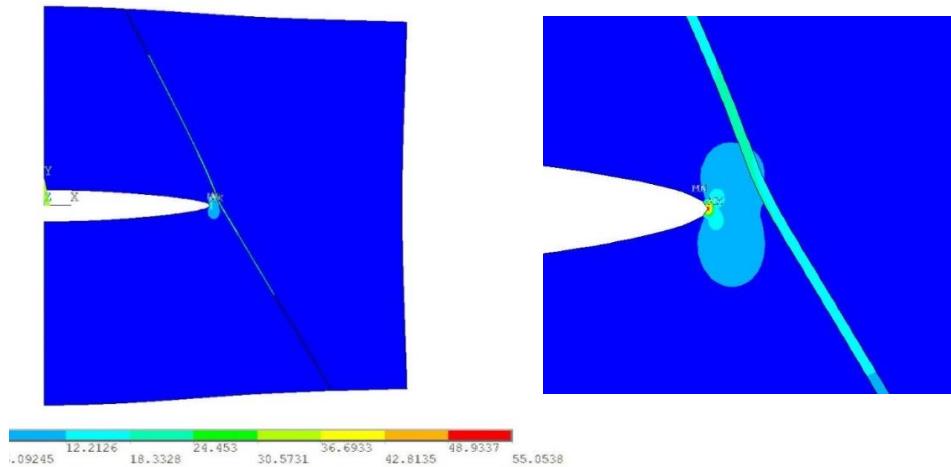
На Рис. 5а и Рис. 5б приведено распределение максимальных растягивающих напряжений на продолжении трещины в случае однородного материала металлической матрицы и в при армирующем графеном элементе.



**Рис. 5.** Распределение максимальных растягивающих напряжений  $S_1$ , отнесенных к нагрузке  $p$ , на продолжении трещины, а) в однородном металле, б) в металле, армированном графеновыми листами толщиной 1 нм.

На Рис. 6. приведено распределение максимальных растягивающих напряжений в случае армирующего графенового элемента, расположенного под углом  $60^\circ$  к трещине. Максимальные растягивающие напряжения, усредненные на элементе, примыкающем к вершине трещины, и отнесенные к приложенной нагрузке в этом случае равны  $S_{1max}/p = 71.0$ , а коэффициент интенсивности напряжений  $K_I$ , отнесенный к нагрузке, равен  $K_I/p = 30.28 \text{ нм}^{-1/2}$ ,  $K_{II}/p = 0.8 \text{ нм}^{-1/2}$ .

Таким образом, наличие армирующего элемента снижает концентрацию напряжений в окрестности конца трещины, и приводит к повышению прочности композита «металл-графен».



**Рис. 6.** Распределение максимальных растягивающих напряжений  $S_1$ , отнесенных к нагрузке  $p$ , в окрестности трещины, расположенной под углом в  $60^\circ$  к графеновому листу толщиной 1 нм.

#### 4. Заключение

Разработаны конечно-элементные модели процессов деформации и разрушения в образцах высокопрочных нанокомпозитов «металл-графен» и «нанометалл-графен». В частности, для оценки влияния графеновых включений на деформационные характеристики нанокомпозита «металл-графен» проведен конечно-элементный анализ

*Моделирование механических характеристик нанокомпозитов «(нано)металл-графен»...* 91  
деформирования представительного объема с последующей гомогенизацией механических свойств. Для представительного объема построены кривые деформирования (сила - относительное удлинение), на основании которых исследована зависимость эффективных модулей и пластического течения от концентрации графеновых включений. Показано, что влияние включений на упругие модули и предел пластичности нанокомпозита типа «металл-графен» невелико. При объемной концентрации до 2 % увеличение упругого модуля не превышает 4 %, предела пластичности - 1,5 %. Наличие в нанокомпозите графеновых включений с высоким упругим модулем приводит к деформационному упрочнению материала, что объясняется упругим деформированием графеновых включений вплоть до разрушения в широком диапазоне деформаций.

Исследовано влияние геометрии ансамбля включений на эффективные свойства металлокомпозита при одинаковой их концентрации. Рассмотрены следующие случаи: а) непрерывная сетка графеновых листов по границам зерен, б) графеновые листы по границам зерен, разомкнутые в узлах сетки, с) графеновые листы расположены по границам зерен вдоль направления растяжения, д) графеновые листы расположены по границам зерен поперек направления растяжения. В первом случае влияние графеновых включений на эффективные свойства нанокомпозита проявляется сильнее чем в других.

Для оценки трещиностойкости нанокомпозита «(нано)металл-графен» построена компьютерная модель распространения трещины в таком композите. Было исследовано поле напряжений в окрестности вершины трещины в однородном металлическом материале с эффективными модулями и в нанокомпозите с трещиной, вершина которой находится вблизи графенового включения. Результаты конечно-элементного моделирования свидетельствуют о том, что, во-первых, в нанокомпозите имеет место снижение концентрации напряжений в окрестности конца трещины при его приближении к графеновому включению и, во-вторых, изменение направления площадки наибольших растягивающих напряжений, что приведет к искривлению траектории роста трещины, и, следовательно, к повышению трещиностойкости (из-за соответствующего увеличения необходимой для роста трещины энергии). Отметим также, что графеновые листы на границах зерен металлической матрицы нанокомпозита «металл-графен» стабилизируют наноразмерную структуру, препятствуя рекристаллизации.

*Данное исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-29-00199).*

## **Литература**

- [1] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone // *Science* **321(5887)** (2008) 385.
- [2] I.A. Ovid'ko // *Reviews on Advanced Materials Science* **34** (2013) 1.
- [3] Youbin Kim, Jinsup Lee, Min Sun Yeom, Jae Won Shin, Hyungjun Kim, Yi Cui, Jeffrey W. Kysar, James Hone, Yousung Jung, Seokwoo Jeon & Seung Min Han // *Nature Communications* **4** (2013) 2114.
- [4] S.F. Bartolucci, J. Paras, M.A. Rafiee, J. Rafiee, S. Lee, D. Kapoor, N. Koratkar // *Journal of Materials Science and Engineering A* **528** (2011) 7933.
- [5] J. Wang, Z. Li, G. Fan, H. Pan, Z. Chen, D. Zhang // *Scripta Materialia* **66** (2012) 594.
- [6] T.S. Koltsova, L.I. Nasibulina, I.V. Anoshkin, V.V. Mishin, E.I. Kauppinen, O.V. Tolochko, A.G. Nasibulin // *Journal of Materials Science and Engineering B* **2** (2012) 240.
- [7] L.-Y. Chen, H. Konishi, A. Fehrenbacher, C. Ma, G.-Q. Hu, H. Choi, H.-F. Hu, F.E. Pfefferkorn, X.-C. Li // *Scripta Materialia* **67** (2012) 29.
- [8] I.A. Ovid'ko // *Reviews on Advanced Materials Science* **38** (2014) 190.

## FINITE-ELEMENT MODELS OF MECHANICAL CHARACTERISTICS OF «(NANO)METAL-GRAPHENE» NANOCOMPOSITES

B.N. Semenov<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>2</sup>St. Petersburg State University, St. Petersburg, 199034, Russia

<sup>3</sup>Institute for Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,

St. Petersburg, 199178, Russia

e-mail: semenov@bs1892.spb.edu

**Abstract.** To evaluate the effect of graphene inclusions on deformation characteristics of nanocomposite "metal-graphene" the finite element analysis of representative volume deformation followed by homogenization of the mechanical properties deformation is performed and the dependence of effective modules and plastic flow on the concentration of graphene inclusions is studied. It is shown that the influence of inclusions on the modulus of elasticity and plasticity limit of the nanocomposite is not significant. Graphene inclusions effect on strength and fracture toughness of the composite "(nano) metal-graphene". The results of finite-element simulations indicate that in the nanocomposite a decrease in stress concentration in vicinity of the crack tip is observed when approaching the crack tip to the graphene inclusion enable.

### References

- [1] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone // *Science* **321**(5887) (2008) 385.
- [2] I.A. Ovid'ko // *Reviews on Advanced Materials Science* **34** (2013) 1.
- [3] Youbin Kim, Jinsup Lee, Min Sun Yeom, Jae Won Shin, Hyungjun Kim, Yi Cui, Jeffrey W. Kysar, James Hone, Yousung Jung, Seokwoo Jeon & Seung Min Han // *Nature Communications* **4** (2013) 2114.
- [4] S.F. Bartolucci, J. Paras, M.A. Rafiee, J. Rafiee, S. Lee, D. Kapoor, N. Koratkar // *Journal of Materials Science and Engineering A* **528** (2011) 7933.
- [5] J. Wang, Z. Li, G. Fan, H. Pan, Z. Chen, D. Zhang // *Scripta Materialia* **66** (2012) 594.
- [6] T.S. Koltsova, L.I. Nasibulina, I.V. Anoshkin, V.V. Mishin, E.I. Kauppinen, O.V. Tolochko, A.G. Nasibulin // *Journal of Materials Science and Engineering B* **2** (2012) 240.
- [7] L.-Y. Chen, H. Konishi, A. Fehrenbacher, C. Ma, G.-Q. Hu, H. Choi, H.-F. Hu, F.E. Pfefferkorn, X.-C. Li // *Scripta Materialia* **67** (2012) 29.
- [8] I.A. Ovid'ko // *Reviews on Advanced Materials Science* **38** (2014) 190.