

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

## КРИСТАЛЛОМОРФНЫЙ ДИЗАЙН ЯЧЕИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

© 2021 г. М. Ю. Арсентьев<sup>1, \*</sup>, С. В. Балабанов<sup>1</sup>, М. М. Сычев<sup>1, 2</sup>, Д. С. Долгин<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,  
наб. Макарова, 2, Санкт-Петербург, 199034 Россия*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),  
кафедра теоретических основ материаловедения,  
Московский проспект, 26, Санкт-Петербург, 190013 Россия*

<sup>3</sup>*Ярославский Государственный Технический Университет,  
Московский просп., 88, Ярославль, Ярославская обл., 150023 Россия*

\*e-mail: [ars21031960@gmail.com](mailto:ars21031960@gmail.com)

Поступила в редакцию 23.07.2020 г.

После доработки 31.07.2020 г.

Принята к публикации 06.08.2020 г.

В данной работе предложен новый способ генерации ячеистых материалов с повышенными физико-механическими характеристиками. Методом компьютерного моделирования исследованы механические свойства изделий на основе ABS-полимера с топологиями, прототипами которых являлись изоэлектронные поверхности ряда кристаллических веществ. В качестве примера в данной работе был выбран углерод в кристаллической структуре  $Im\bar{3}m$ , поскольку его изоэлектронная поверхность по форме наиболее близка к известным топологиям трижды периодических поверхностей минимальной энергии. В результате исследования с использованием программы Autodesk Inventor Professional получены распределения механических напряжений и внешний вид деформированных изделий при различных значениях прикладываемого механического напряжения. В результате исследования обнаружены высокие физико-механические характеристики образцов с предложенной геометрией.

**Ключевые слова:** ячеистые структуры, метод конечных элементов, механическое напряжение, механическая деформация, ABS-пластик, трижды периодическая поверхность минимальной энергии

DOI: 10.31857/S0132665120060025

## ВВЕДЕНИЕ

Академиком В.Я. Шевченко предложена идея использования материалов сложной ячеистой структуры для условий экстремального нагружения. Ячеистые структуры – это особый класс материалов, которые способны сочетать ряд перспективных свойств, такие как высокая механическая прочность, энергопоглощающая способность, низкая теплопроводность, звуко- и теплоизолирующие свойства, уникальные акустические характеристики, эти материалы применяют в различных отраслях промышленности [1, 2]. Совсем недавно изготовление таких материалов было крайне затруднено, вследствие ограниченности классических субтрактивных методов производства. Бурное развитие аддитивных технологий способствует созданию и распространению новых типов ячеистых материалов.

Геометрию трижды периодических поверхностей минимальной энергии (ТППМЭ), как правило, можно задать с помощью аналитических уравнений вида, например, для топологии типа “IWP”:

$$3(\cos(x)\cos(y) + \cos(z)) + 4\cos(x)\cos(y)\cos(z), \quad (1)$$

где  $x$ ,  $y$  и  $z$  – координаты,  $t$  – изменяемый параметр.

С помощью уравнений данного вида и используемых параметров можно варьировать геометрию, а также физико-механические свойства данных изделий.

Имеется множество способов задания формы аналогичных поверхностей, среди которых особенно интересными могут быть подходы, используемые в работе [3]. В данной работе был произведен поиск ТППМЭ с использованием поверхности нулевого кулоновского потенциала для различных типов кристаллических веществ.

Цель данной работы – создание новых ТППМЭ-подобных структур на основе построения изоэлектронных плотностей для кристаллических структур углерода с кристаллической структурой  $Im\bar{3}m$ , исследование механических свойств данных ТППМЭ-подобных структур методами компьютерного моделирования: построение распределения механических напряжений и расчет степени деформации при различных значениях прикладываемого напряжения.

## МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В данной работе применен новый метод поиска топологий, которые очень близки к ТППМЭ топологиям. Данный метод основан на построении карт распределения электронной плотности для кристаллических структур.

Для проведения наиболее полного сравнения свойств полученной топологии с уже известными использовали кристаллическую структуру углерода ( $Im\bar{3}m$ ), как наиболее близкую топологию к уже известным топологиям ТППМЭ [4]. Структура углерода ( $Im\bar{3}m$ ) напоминает структуру IWP.

Данные структуры доступны в COD (Crystallography Open Database) [5]. На основе данных структур были созданы образцы размером  $4 \times 4 \times 4$  мм единичные ячейки ( $30 \times 30 \times 30$  мм). Степень заполнения пространства образцов составила  $\phi_{Im\bar{3}m} = 0.35$ .

Построение карт распределения изоэлектронной плотности для данных структур производили путем использования метода “QuickSurf”, доступного в программном пакете VMD [6]. В данном методе расчет карт распределения производится на основе объемной Гауссовой плотности, построенной для атомов или частиц в окрестности каждой точки, принадлежащей кристаллической решетке

$$\rho(\vec{r}; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{e^{-|\vec{r}-\vec{r}_i|^2}}{2\alpha^2}, \quad (2)$$

где  $\rho$  – объемная Гауссова плотность, рассчитываемая в точке  $\vec{r}$  путем суммирования по всем  $N$  атомам. В данном уравнении для каждого атома используется весовой коэффициент  $\alpha$ . Варьированием параметров можно получать новые топологии изоповерхностей аналогичным уравнению (1) образом.

В данной работе использовали различные программные продукты компании Autodesk. Для исправления ошибок в 3D моделях использовали программы Meshmixer и Netfabb. Для компьютерного моделирования испытания образцов на статическое сжатие под действием постоянной силы ( $F = \text{const}$ ) использовали программу Autodesk Inventor Professional [7] Образцы сжимали давлением  $P = 20$  Мпа. Начальные условия для моделирования представлены в табл. 1.

В результате проведенного исследования были получены распределения механических напряжений в образце, изучены особенности деформации предложенных топо-

**Таблица 1.** Начальные условия для моделирования

Параметр	Значение
Средний размер элементов (относительно размера модели)	0.1
Минимальный размер элементов (относительно среднего размера элемента)	0.2
“Грэйдинг” фактор	1.5
Максимальный угол поворота	60°
Материал	ABS пластик
Плотность материала	1060 кг/м <sup>3</sup>
Предел текучести	20 МПа
Предел прочности	29.6 МПа
Модуль Юнга	2.24 ГПа
Коэффициент Пуассона	0.38
Модуль сдвига	812 МПа

логий. В процессе исследования были произведены импортирование ТППМЭ-подобных топологий, построение сетки, выбор параметров симуляции, постановка задачи.

## РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве начальной структуры для генерирования поверхностей был использован углерод в кристаллической структуре *Im $\bar{3}m$*  (рис. 1).

На рис. 2 представлены карты распределения электронной плотности для ячейки  $4 \times 4 \times 4$  мм, полученные с использованием программы VMD и метода “QuickSurf”, доступного в данном программном пакете. Можно отметить несколько свойств данных поверхностей: гладкость, замкнутость, непрерывность, благодаря которым данный материал можно рассматривать в качестве аналога существующих ячеистых материалов, пен и материалов с трижды периодической поверхностью минимальной энергии.

Согласно результатам компьютерного моделирования в программе Autodesk Inventor Professional, при приложении сжимающей нагрузки механические напряжения распределяются в образцах неравномерно (рис. 3). Выявлено, что наибольших значений величина механических напряжений достигает между ячеек, в наиболее узких частях перемычек. Под действием давления образцы достаточно существенно деформировались, но не разрушились. Анализ пластической деформации данных моделей показывает, что наибольшей пластической деформации подвержены участки с наибольшей концентрацией механических напряжений. Стоит отметить, что наружные ячейки для ячейки размером  $4 \times 4 \times 4$  мм подвергаются наибольшим деформациям (рис. 3). Малонагруженные участки имеют большую способность к сохранению формы. В результате воздействия нагрузки величиной 20 Мпа образец деформировался на 1.49 мм.

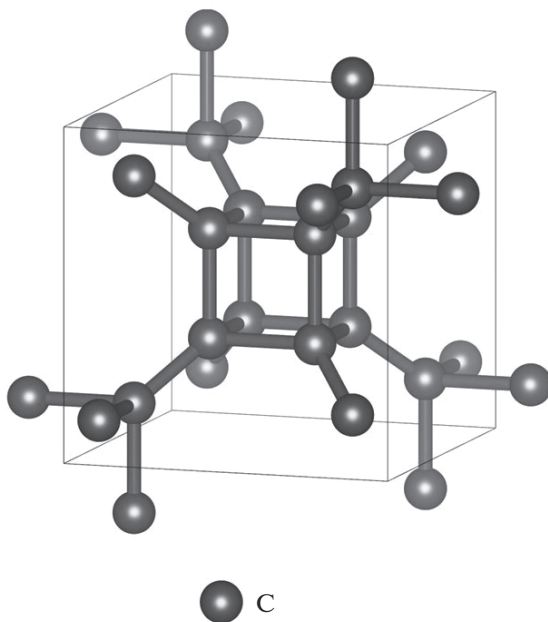


Рис. 1. Кристаллическая структура углерода ( $Im\bar{3}m$ ).

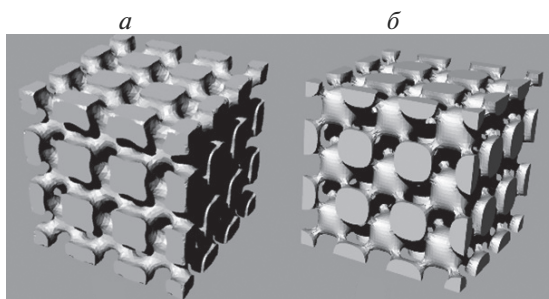


Рис. 2. Рендер образца, полученного с использованием кристаллической структуры углерода ( $Im\bar{3}m$ ) (а). Рендер образца с топологией ТППМЭ (IWP) (б).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате компьютерного моделирования обнаружены перспективные механические свойства для образца с топологией, полученной на основе распределения электронной плотности для углерода в кристаллической структуре  $Im\bar{3}m$ . Под действием давления образцы достаточно существенно деформировались, но не разрушились. Наибольшей пластической деформации подвержены участки с наибольшей концентрацией механических напряжений и наружные ячейки. В результате воздействия нагрузки величиной 20 МПа образец деформировался на 1.5 мм. Наибольших значений величина механических напряжений достигает между ячеек, в наиболее узких частях

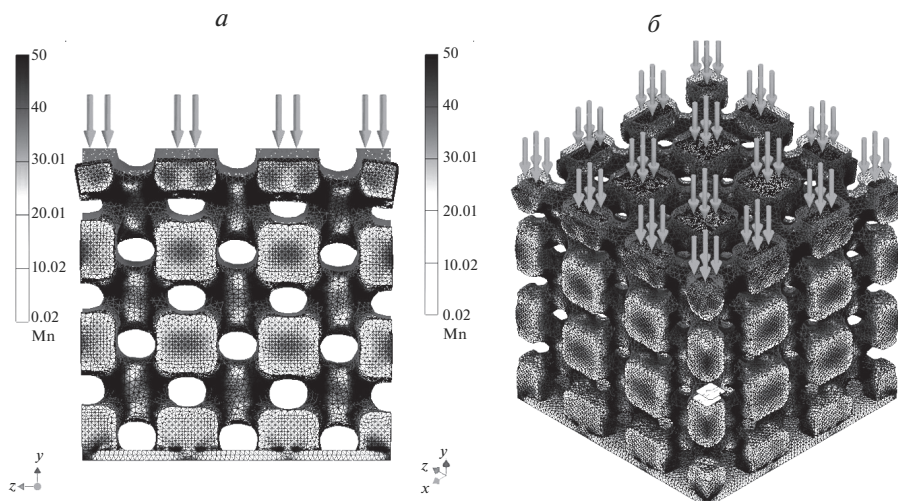


Рис. 3. Внешний вид деформированной структуры и распределение напряжений, полученного с использованием кристаллической структуры углерода ( $Im\bar{3}m$ ).

перемычек. Анализ пластической деформации данных моделей, показывает, что наибольшей пластической деформации подвергаются участки, которые наиболее подвержены концентрации напряжений, а именно, перешейки (наиболее опасные места). Таким образом, предложен новый метод для поиска новых топологий ячеистых материалов с повышенными физико-механическими характеристиками.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10171).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Evans A.G., Hutchinson J.W., Fleck N.A., Ashby M.F., Wadley H.N.G. The topological design of multifunctional cellular metals // Prog. Mater. Sci. 2001. V. 46. P. 309–327.
2. Shevchenko V., Sychov M., Lapshin A., Lebedev L., Gruzdkov A., Glezer A. Polymer Structures with the Topology of Triply Periodic Minimal Surfaces // Glass Physics and Chemistry. 2017. V. 43. P. 608–610.  
<https://doi.org/10.1134/S1087659617060177>
3. Schnering H.G., Nesper R. How Nature Adapts Chemical Structures to Curved Surfaces // Angew Chem. Int. Ed. Engl. 1987. V. 26. P. 1059–1080.
4. Balabanov S.V., Makogon A.I., Sychov M.M., Gravit M.V., Kurakin M.K. Mechanical properties of 3D printed cellular structures with topology of triply periodic minimal surfaces // Materials Today: Proceedings. Materials Today: Proceedings, 2020.
5. Quirós M., Gražulis S., Girdzijauskaitė S., Merkys A., Vaitkus A. Using SMILES strings for the description of chemical connectivity in the Crystallography Open Database // J. Cheminformatics. 2018. 10:23.
6. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD – Visual Molecular Dynamics // J. Molec. Graphics. 1996. V. 14. № 1. P. 33–38.
7. <https://www.autodesk.ru/solutions/autocad-and-inventor>