
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ С ТОПОЛОГИЕЙ ТППМЭ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2021 г. М. Ю. Арсентьев^{1, *}, Е. И. Сысоев¹, С. В. Балабанов¹

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

**e-mail: ars21031960@gmail.com*

Поступила в редакцию 12.04.2021 г.

После доработки 04.06.2021 г.

Принята к публикации 07.06.2021 г.

В данной работе проведено исследование физико-механических свойств изделий с геометрией ТППМЭ методом компьютерного моделирования. Расчеты производились методом FEM (гиперупругого вязкопластического разрушения с конечной деформацией), для типичных образцов материала полиамида-12, полученного селективным лазерным спеканием (SLS, Selective Laser Sintering). В результате исследования с использованием программы Comsol Multiphysics получены распределения механических напряжений и внешний вид деформированных изделий при различных значениях прикладываемого механического напряжения, а также деформационные кривые. Показана сходимость расчетов от размера сетки исследуемой модели. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными. В результате исследования обнаружены высокие физико-механические характеристики образцов с предложенной геометрией.

Ключевые слова: трижды периодическая поверхность минимальной энергии, ячеистые структуры, метод конечных элементов, механическое напряжение, полиамид-12

DOI: 10.31857/S0132665121050048

ВВЕДЕНИЕ

Еще с давних времен, на протяжении многих веков открывались и исследовались вдохновленные природой математические поверхности, основанные на тригонометрических выражениях [1–14]. Долгое время область математики и моделирования ограничивалось практическое использование данных форм из-за ограничений, связанных с экономической эффективностью и практической реализуемости [15, 16]. В то же время, легкие и упорядоченные ячеистые структуры являются потенциальными кандидатами в качестве материалов с высочайшими удельными характеристиками, такими как превосходные энергопоглощающие характеристики, высокая жесткость и прочность, легкий вес и превосходные тепло- и звукоизоляционные свойства. Благодаря своим многочисленным свойствам, таким как способности изменять их удельную пористость, плотность, прочность и пластичность, на сегодняшний день ячеистые структуры находят широкое применение во многих областях, в частности как биомедицинские имплантаты [17], энергопоглощающие материалы [18].

Традиционные методы получения материалов с ячеистой структурой включают в себя метод инъекции газа [19], темплатный метод [20, 21], метод консолидации тканых проволочных сеток [22] и др. Однако данные методы ограничивают технологиче-

ское изготовление материалов, позволяя создавать только неоднородные стохастические пены или трехмерные проволочные каркасы. Недавние достижения в технологии аддитивного производства (additive manufacturing, AM) способны устранить вышеупомянутые ограничения и позволяют получать сотовые материалы со сложной топологией [23, 24]. Среди процессов аддитивного производства можно выделить два ключевых процесса, основанных на плавлении и сплавлении/спекания порошков вместе: селективное лазерное плавление (Selective laser melting, SLM) и селективное лазерное спекание (Selective laser sintering, SLS). Такой подход позволяет изготавливать металлические, керамические компоненты с исключительно высокой плотностью и сложной геометрией [25–29].

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе использовались метод конечных элементов (Comsol) совместно с программой (модулем) polyUmod, основанном на модели FEN. FEN – это универсальная конститутивная модель, которая, как было показано ранее, наилучшим образом позволяет описывать механические свойства термопластичного материала, используемого для 3D-печати [30–33]. Модель FEN считается наиболее сложной и совершенной и дает наиболее точное соответствие для материалов, используемых в 3D печати.

В модели FEN приложенный градиент деформации \mathbf{F} действует на несколько (до 4) макромолекулярных сетей и раскладывается на упругую \mathbf{F}_i^e вязкопластическую \mathbf{F}_i^{vp} оставляющие:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_i^e \mathbf{F}_i^{vp}. \quad (1)$$

Структура модели FEN может быть представлена в виде четырех параллельных сетей, как показана на рис. 1.

Модель состоит из трех параметров: напряжения, текучести и разрушения. Функция плотности энергии деформации для i -ой сети имеет следующий вид:

$$\Psi_i = f_{i\mu} \left[f_{i\epsilon P} f_{iM} \Psi_{yi} + \frac{k}{2} (J_i^e - 1)^2 \right], \quad i \in [1, 4], \quad (2)$$

$$J_i^e = \det[\mathbf{F}_i^e], \quad (3)$$

$$I_{li}^{e*} = \text{tr} \left[\left(J_i^e \right)^{\frac{2}{3}} \mathbf{F}_i^e \mathbf{F}_i^{eT} \right], \quad (4)$$

$$I_{2i}^{e*} = \frac{1}{2} \left(\text{tr} \left[\left(J_i^e \right)^{\frac{2}{3}} \mathbf{F}_i^e \mathbf{F}_i^{eT} \right]^2 - \text{tr} \left[\left(J_i^e \right)^{\frac{2}{3}} \mathbf{F}_i^e \mathbf{F}_i^{eT} \right]^2 \right), \quad (5)$$

где $f_{i\mu}$ – коэффициент модуля сдвига; $f_{i\epsilon P}$ – коэффициент эволюции вязкопластического течения; f_{iM} – коэффициент разрушения по Маллинзу. Если образец вначале деформируется, а затем освобождается от нагрузки, то для вторичной деформации требуется меньшее напряжение. Этот эффект (эффект Маллинза) количественно выражается гистерезисной энергией.

Далее, в формуле (5) k – модуль объемной упругости; Ψ_{yi} – плотность энергии деформации, заданный моделью Йо с одним членом Муни–Ривлина I_{2i}^{e*} , таким, что

$$\Psi_{yi} = C_{10} (I_{li}^{e*} - 3) + C_{20} (I_{li}^{e*} - 3) + C_{30} (I_{li}^{e*} - 3) + C_{01} (I_{2i}^{e*} - 3), \quad (6)$$

где C_{10} , C_{20} , C_{30} и C_{01} параметры материала, МПа.

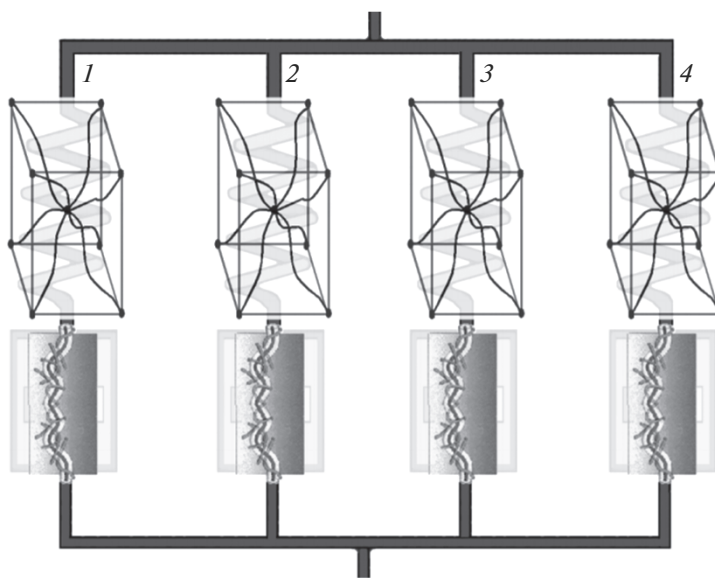


Рис. 1. Реологическое представление модели FEN.

Модель гиперупругого материала Йо – это феноменологическая модель деформации почти несжимаемых нелинейно-упругих материалов, таких как резина. Модель основана на наблюдении Рональда Ривлина о том, что упругие свойства резины можно описать с помощью функции плотности энергии деформации.

Общее напряжение вычисляется по формуле:

$$\sigma = \sum_{i=1}^4 \sigma_i = \sum_{i=1}^4 (J_i^e)^{-1} (\mathbf{F}_i^e)^{-1} \frac{\partial \Psi_i}{\partial \mathbf{F}_i^e} (\mathbf{F}_i^e)^{-T}. \quad (7)$$

Скорость вязкопластической части градиента деформации для i -ой сети определяется как:

$$\dot{\mathbf{F}}_i^{vp} = \dot{\gamma}_i^{vp} (\mathbf{F}_i^e)^{-1} \frac{S_i}{\tau_i} \mathbf{F}, \quad (8)$$

где $S_i = \sigma_i - \text{tr}(\sigma_i)/3$ девиаторное напряжение, МПа; $\tau_i = \sqrt{3S_i : S_i/2}$ напряжение по Мизесу, МПа; $\dot{\gamma}_i^{vp}$ скорость вязкопластической деформации, определяемая следующим законом:

$$\dot{\gamma}_i^{vp} = \dot{\gamma}_0 (\bar{\lambda}_i^{vp} - 1) \left\langle \left\langle \frac{\tau_i}{g_p g_{ei1} g_{ei2} \tau_i} - \tau_0 \right\rangle \right\rangle^{m_i}, \quad (9)$$

где $\dot{\gamma}_0$ – эталонная скорость деформации; $\bar{\lambda}_i^{vp} = \sqrt{\text{tr}[\mathbf{b}_i^{vp}]/3}$ – вязкопластическое растяжение с $\mathbf{b}_i^{vp} = \mathbf{F}_i^{vp} \mathbf{F}_i^{vp T}$; τ_0 – начальный предел текучести; $g_p = \langle 1 + \text{tr}(\sigma)/3p_0 \rangle$ – фактор зависимости от давления, где p_0 параметр материала; $\langle \rangle$ – скобки Маколея;

Таблица 1. Число элементов в полигональной сетке, использовавшихся для моделирования ТППМЭ решетки (Примитив-Р).

Порядковый номер кривой	Число элементов	Расчетный предел прочности, МПа
1	6244	0.97
2	7996	3.16
3	10414	3.64

g_{ei1} и g_{ei2} – сопротивление вязкопластическому потоку, определяемое следующим уравнением:

$$\dot{g}_{ei1} = \frac{1}{D_{e1}}(g_{ss1} - g_{ei1})\dot{\gamma}_i^{vp}; \quad \dot{g}_{ei2} = \frac{1}{D_{e2}}(g_{ss2} - g_{ei2})\dot{\gamma}_i^{vp}, \quad (10)$$

где $g_{ei1} = g_{ei2} = 1$ при $t = 0$; g_{ss1} , g_{ss2} , D_{e1} и D_{e2} – параметры материала. Коэффициент эволюции вязкопластического течения в формуле (2) определяется как:

$$\dot{f}_{iEP} = \frac{1}{C_\epsilon}(f_{ss} - f_{iEP})\dot{\gamma}_i^{vp}, \quad (11)$$

где f_{ss} и C_ϵ параметры материала, при которых $f_{iEP} = 1$ при $t = 0$. Этот фактор полезен для некоторых полимеров, эффективная жесткость которых немного снижается из-за накопления вязкопластической деформации.

Повреждения, в виде снижения жесткости и прочности, учитываются в модели через фактор разрушения Маллинза f_{iM} в формуле (2), описываемый как:

$$f_{iM} = 1 - \frac{1}{r} \operatorname{erf} \left[\frac{U_{i,dev}^{\max} - U_{i,dev}}{\hat{U} + \beta U_{i,dev}^{\max}} \right], \quad (12)$$

где erf – функция ошибок; $U_{i,dev}$ – девiatorная часть плотности энергии деформации; $U_{i,dev}^{\max} = \max[U_{i,dev}, U_{i,dev}^{\max}]$ при нагрузке, и $U_{i,dev}^{\max}/U_{i,dev} = -\alpha$ при нагрузке, где $r \geq 1$; \hat{U} , α и β параметры материала.

В работе использовались образцы размером $2 \times 2 \times 2$ ячейки (рис. 2). Используемый в расчетной модели материал – полиамид-12 (SLS 3D Печать). Коэффициент заполнения объема составлял 20%, скорость деформации – 0.004 с^{-1} .

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 2 представлен вид ТППМЭ решетки размером $2 \times 2 \times 2$, а на рис. 3 – соответствующий вид кривой деформация–напряжение, на котором виден максимум. В соответствии с ГОСТ 4651-2014 (ISO 604:2002, MOD), за прочность образцов принимали пик (максимум) на деформационной кривой, который соответствует переходу образца в область пластической деформации. Каждая кривая представляет собой график зависимости нагрузки от деформации. Кривые имеют ярко выраженные экстремумы (пики), каждый из которых соответствует разрушению одного из слоев ячеек, лежащих в плоскости, перпендикулярной оси нагружения. В таблице представлен расчетный предел прочности.

Результаты расчета кривых напряжение–деформация (рис. 3) для модели ТППМЭ решетки (Примитив-Р) с использованием полигональных сеток с различным числом элементов, в сравнении с экспериментальными данными, показывают, что модель, содержащая 10414 элементов, удовлетворительно описывает свойства изучаемого объекта.

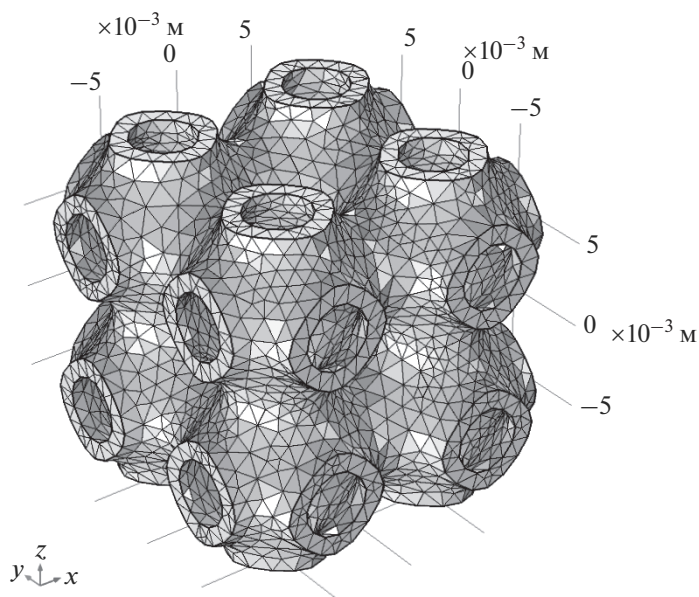


Рис. 2. Внешний вид ТППМЭ решетки (Примитив-Р) размером $2 \times 2 \times 2$.

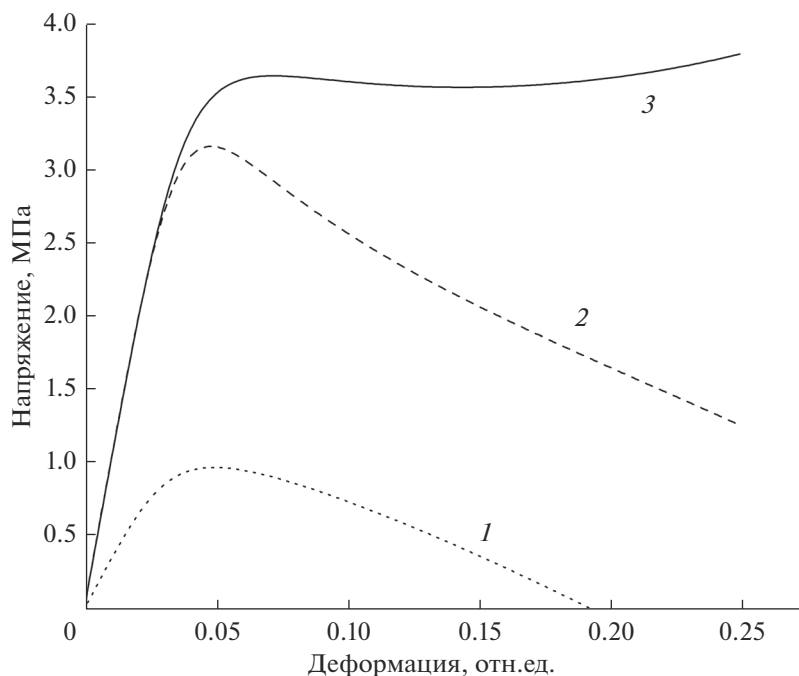


Рис. 3. Зависимость рассчитанной кривой напряжение–деформация от числа элементов в полигональной сетке для модели ТППМЭ решетки (Примитив-Р) размером $2 \times 2 \times 2$ (материал – полиамид 12). Порядковый номер кривой соответствует числу элементов из таблицы 1.

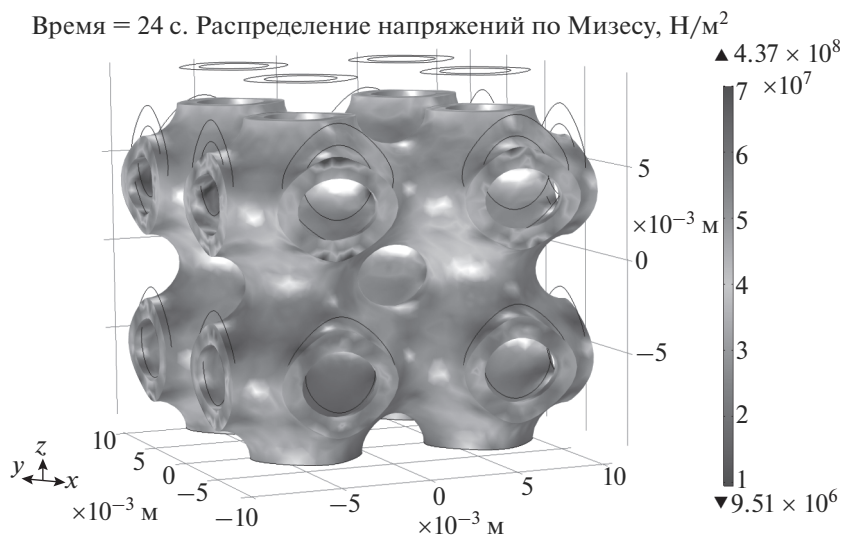


Рис. 4. Распределение напряжений для ТППМЭ решетки (Примитив-Р) размером $2 \times 2 \times 2$.

При относительно высоком выбранном нами для исследований коэффициенте заполнения объема (20%), как правило, не наблюдается сложный характер деформации (вращения, изгибы, вызванные деформацией соседних ячеек), как показано в данном исследовании (рис. 4) и в работах [33, 34]. Кроме того, наблюдаются достаточно высокая концентрация напряжений на определенных участках образца, а также высокая неравномерность распределения напряжений. Наши исследования (рис. 4) и исследования авторов [33, 34] подтверждают данный факт. Как обнаружили авторы расчетными и экспериментальными методами Montazerian и др. [36] и Abou-Ali и др. [33] вращения и изгибы наблюдаются при более низких коэффициентах заполнения объема. Из рис. 4 видно, что верхний слой ячеек подвергается большей деформации, чем нижний, что также согласуется с наличием пика для кривой 3 на рис. 2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Произведено компьютерное моделирование испытания на сжатие. В результате теоретического исследования были получены деформационные кривые для объектов с ТППМЭ геометрией, с различным числом элементов в полигональной сетке. Используемый в расчетной модели материал – полиамид-12 (SLS 3D Печать). Были проведены исследования распределения механических напряжений, особенности деформаций (проверка на наличие изгибов и вращений ячеек) на примере образца из полиамида-12. Выявлено, что при деформации образца напряжения распределяются неравномерно. В результате компьютерного моделирования обнаружены перспективные механические свойства для изделий с топологией ТППМЭ.

Исследование механических свойств конструкций и разработка топологий выполнены за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10171). Разработка методики моделирования механических свойств выполнена в рамках Госзадания ИХС РАН (номер государственной регистрации темы АААА-А19-119022290092-5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bieri-Gross B., Nesper R.* Topological modeling of reconstructive phase transitions through periodic surfaces: Tin dioxide I - A calcium chloride to palladium fluoride type transition // *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie.* 2015. V. 641. P. 1503–1509.
2. *Makogon A.I., Shevchenko V.Ya., Sychoy M.M.* Modeling of reaction-diffusion processes of synthesis of materials with regular (periodic) microstructure // *Open Ceramics.* 2021. in press.
3. *Bieri-Gross B., Nesper R.* Topological modeling of reconstructive phase periodic hyperbolic surfaces: The β -quartz to keatite type transition // *Zeitschrift Fur Kristallographie.* 2011. V. 226. P. 670–677.
4. *Шевченко В.Я.* Топологические формы будущего структурной химии новых веществ и материалов // *Труды Кольского научного центра РАН.* 2018. Т. 9. № 2–1. С. 109–114.
5. *Zürn A., Shnering H.G.* Topological analysis of mesoporous solids and their ordered pore structures by periodic nodal surfaces, PNS // *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie.* 2008. V. 634. P. 2761–2764.
6. *Leoni S., Nesper R.* Elucidation of simple pathways for reconstructive phase transitions using periodic equi-surfaces (PES) descriptors. II. The strontium disilicide transition // *Solid State Sciences.* 2003. V. 5. P. 95–107.
7. *Nesper R., Leoni S.* On tilings and patterns on hyperbolic surfaces and their relation to structural chemistry // *Chemphyschem.* 2001. V. 2. P. 413–422.
8. *Шевченко В.Я., Ковальчук М.В., Орыщенко А.С., Перевислов С.Н.* Новые химические технологии на основе реакционно-диффузионных процессов тьюринга // *Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах.* 2021. Т. 496. № 1. С. 25–29.
9. *Shevchenko V.Ya.* What is a chemical substance and how it is formed? // *Structural Chemistry.* 2012. V. 23. № 4. P. 1089–1101.
10. *von Shnering H.G., Nesper R.* How nature adapts chemical structures to curved surfaces // *Angeordnete Chemie International Edition.* 1987. V. 26. № 11. P. 1059–1200.
11. *Andersson S., Hyde S.T., Larsson K., Lidin S.* Minimal surfaces and structures: from inorganic and metal crystals to cell membranes and biopolymers // *Chemical Reviews.* 1988. v. 88. № 1. P. 221–242.
12. *Andersson S., Hyde S.T., von Shnering H.G.* The intrinsic curvature of solids // *Zeitschrift für Kristallographie.* 1984. V. 168. № 1–4. P. 1–17.
13. *von Shnering H.G., Nesper R.* Nodal surfaces of Fourier series: Fundamental invariants of structured matter // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter.* 1991. V. 83. P. 407–412.
14. *Mackay A.L.* Crystallographic surfaces // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences.* 1993. v. 442. № 1914. P. 47–59.
15. *Schwarz H.A.* *Gesammelte Mathematische Abhandlungen,* Springer, Berlin. 1933. P. 1843–1921.
16. *Han L., Che S.* An Overview of Materials with Triply Periodic Minimal Surfaces and Related Geometry: From Biological Structures to Self-Assembled Systems // *Adv. Mater.* 2018. V. 30. № 17. P. 0935–9648.
17. *Thomsen P., Malmström J., Emanuelsson L., René M., Snis A.* Electron beam-melted, free-form-fabricated titanium alloy implants: Material surface characterization and early bone response in rabbits // *J. Biomed. Mater. Res. B Appl. Biomater.* 2009. V. 90. № 1. P. 35–44.
18. *Tancogne-Dejean T., Spierings A.B., Mohr D.* Additively-manufactured metallic micro-lattice materials for high specific energy absorption under static and dynamic loading // *Acta Materialia.* 2016. V. 116. P. 14–28.
19. *Leitlmeier D., Degischer H.P., Flankl H.J.,* Development of a foaming process for particulate reinforced aluminum melts // *Advanced Engineering Materials.* 2002. V. 4. № 10. P. 735–740.
20. *Wang Z., Jiao X., Feng P., Wang X., Liu Z., Akhtar F.* Highly porous open cellular TiAl-based intermetallics fabricated by thermal explosion with space holder process // *Intermetallics.* 2016. V. 68. P. 95–100.
21. *Korner C., Singer R.F.* Processing of metal foams—Challenges and opportunities // *Advanced Engineering Materials.* 2000. V. 2. № 4. P. 159–165.
22. *Ducheyne, P., Martens M.* Orderly oriented wire meshes as porous coatings on orthopaedic implants I: Morphology // *Clinical Materials.* 1986. V. 1. № 1. P. 59–67.
23. *Tancogne-Dejean T., Spierings A.B., Mohr D.* Additively-manufactured metallic micro-lattice materials for high specific energy absorption under static and dynamic loading // *Acta Materialia.* 2016. V. 116. P. 14–28.
24. *Yang L., Harrysson O., West H., Cormier D.* Compressive properties of Ti–6Al–4V auxetic mesh structures made by electron beam melting // *Acta Materialia.* 2012. V. 60. № 8. P. 3370–3379.
25. *Van Bael S., Chai Y.C., Truscello S., Moesen M., Kerckhofs G., Van Oosterwyck H., Kruth J.-P., Schrooten J.* The effect of pore geometry on the in vitro biological behavior of human periosteum-derived cells seeded on selective laser-melted Ti6Al4V bone scaffolds // *Acta Biomaterialia.* 2012. V. 8. № 7. P. 2824–2834.

26. Bartolo P., Kruth J.-P., Silva J., Levy G., Malshe A., Rajurkar K., Mitsuishi M., Ciurana J., Leu M. Biomedical production of implants by additive electro-chemical and physical processes // *Cirp Annals-Manufacturing Technology*. 2012. V. 61. № 2. P. 635–655.
27. McKown S., Shen Y., Brookes W.K., Sutcliffe C.J., Cantwell W.J., Langdon G.S., Nurick G.N., Theobald M.D. The quasi-static and blast loading response of lattice structures // *International Journal of Impact Engineering*. 2008. V. 35. № 8. P. 795–810.
28. Yan C., Hao L., Hussein A., Wei Q., Shi Y. Microstructural and surface modifications and hydroxyapatite coating of Ti–6Al–4V triply periodic minimal surface lattices fabricated by selective laser melting // *Materials Science and Engineering: C*. 2017. V. 75. P. 1515–1524.
29. Olakanmi E.O., Cochrane R.F., Dalgarno K.W. A review on selective laser sintering/melting (SLS/SLM) of aluminium alloy powders: Processing, microstructure, and properties // *Progress in Materials Science*. 2015. V. 74. P. 401–477.
30. Bergstrom J.S. *Mechanics of Solid Polymers: Theory and Computational Modeling*. William Andrew. Elsevier. 2015. P. 520.
31. Abueidda D.W., Bakir M., Abu Al-Rub R.K.B., Jörgen S., Sobh N.A., Jasiuk I. Mechanical properties of 3D printed polymeric cellular materials with triply periodic minimal surface architectures // *Materials & Design*. 2017. V. 122. P. 255–267.
32. Bergström J. *PolyUMod User's Manual*. Veryst Engineering. LLC. Needham. MA. 2009. P. 7.
33. Abou-Ali A.M., Al-Ketan O., Lee D.-W., Rowshan R., Abu Al-Rub R.K. Mechanical behavior of polymeric selective laser sintered ligament and sheet based lattices of triply periodic minimal surface architectures // *Materials & Design*. 2020. V. 196. P. 109100.
34. Montazerian H., Davoodi E., Asadi-Eydivand M., Kadkhodapour J., Solati-Hashjin M. Porous scaffold internal architecture design based on minimal surfaces: a compromise between permeability and elastic properties // *Materials & Design*. 2017. V. 126. P. 98–114.