**Проблемы, практика и перспективы компьютерного конструирования
новых полимерных композиционных материалов**

С.В. Панин, д.т.н., профессор РАН

ИФПМ СО РАН, Томск

paninsergey71@mail.ru

**Дата семинара: 2025-04-08**

Проблема создания материалов с заранее заданными свойствами всегда являлась актуальной задачей. Полимерные композиционные материалы по определению являются материалами, для которых характерна сложная многоуровневая структура. Так, армирующие включения, независимо от их геометрии (волокнистые или дисперсные наполнители различной формы и размеров) и расположения, определяют верхний масштаб гетерогенности. На меньших пространственных масштабах проводится учет межфазных слоев на контакте матрицы и включений. Неоднородность полимерной матрицы определяется ее кристаллическим/аморфным строением. Учет данных особенностей строения материалов на разных масштабах привел к введению понятия о многоуровневости структуры, и, соответственно, деформационного поведения [1].

При анализе физико-механических свойств композитов возникает два класса задач. Задачи моделирования, когда заданы свойства и геометрия расположения фаз, характер их взаимодействия (т.н. управляющие параметры); определению подлежат эффективные свойства [2,3]. В последнее время для расчета эффективных свойств интенсивно используются численные методы. Они основаны на вариационных принципах с последующим осреднением свойств по репрезентативному объему различными способами. Задачи конструирования в известном смысле обратны по отношению к задачам моделирования – эффективные свойства заданы, определить нужно набор управляющих параметров, придающих эти свойства материалу [4]. Задание свойств может быть проведено как в виде односторонних или двусторонних ограничений [5].

В докладе рассмотрены аспекты экспериментально-теоретических основ разработки полимерных композиционных материалов (ПКМ) с улучшенными/новыми свойствами, а также подходы и результаты их компьютерного дизайна (проектирования). С использованием развитого подхода проведено экспериментально-теоретическое исследование ПКМ на основе суперконструкционных термопластов (СКТП). Решались задачи численного моделирования и анализа деформационного поведения с явным и неявным учетом структуры следующих типов композитов: а) волоконно-армированные антифрикционные; б) слоистые (ламинаты); в) дисперсно-наполненные с повышенным сопротивлением усталости; г) сегментированные, получаемые методом 3D-печати; д) неразъемные соединения, формируемые методом УЗ-сварки [6, 7]. Рассмотрены примеры практического использования результатов исследований в части компьютерного дизайна и контроля состояния ПКМ [8].

Предложен, иллюстрируется и обсуждается Иерархический подход к разработке композитов на основе суперконструкционных термопластов (СКТП) [9].

**Литература**

[1]  Sergey V. Panin, Boris A. Lyukshin, Nataliya Y. Grishaeva, Svetlana A. Bochkareva, Iliya L. Panov¶. Computer-aided Design of Polymer-based Composites Using Multiscale Models. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics 2024, 17(1), 65-74.

[2]  П.А. Люкшин, Б.А. Люкшин, С.В. Панин, С.А. Бочкарева. Вычисление параметров напряженно-деформированного состояния полимерного композита в поле постоянного электрического тока. Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2023, № 1, с. 142–155. DOI: 10.31857/S0572329922600232.

[3]  Бочкарева С.А., Гришаева Н. Ю., Люкшин Б. А., Люкшин П. А., Матолыгина Н.Ю., Панин С.В., Реутов Ю. А. Единый подход к определению эффективных физико-механических характеристик наполненных полимерных композиций на основе вариационных принципов. Механика композитных материалов. 2018, Т. 54, № 6. С. 1-18.

[4] С.А. Бочкарева, Н.Ю. Гришаева, Б.А. Люкшин, И.Л. Панов, С.В. Панин. Получение композиций с заданным набором физико-механических свойств с использованием трех управляющих параметров. Физическая мезомеханика 23 4 (2020) 43–50. DOI 10.24411/1683-805X-2020-14006.

[5]  Панин С.В., Люкшин Б.А., Бочкарева С.А. Проблемы, практика и перспективы компьютерного конструирования новых композиционных материалов. ПМТФ, 2020, Т.61, №5, С. 168-174. D01: 10.15372/PMTF20200518.

[6] Панин С.В., Ло Цзянкунь, Буслович Д.Г., Корниенко Л.А., Алексенко В.О., Бочкарёва С.А. Разработка оптимального состава трехкомпонентных высокопрочных износостойких композитов на основе полиимида. ПМТФ, 2021, №6, с. 162-171.

[7]  С.А. Бочкарева, В. О. Алексенко, Б. А. Люкшин, Д. Г. Буслович, С. В. Панин. Влияние теплопроводности сопрягаемых материалов на интенсивность изнашивания полимер-полимерной пары трения. Механика композитных материалов, 2022. — Т. 58, № 3. — С. 1—18, DOI: 10.22364/mkm.58.3.0x.

[8]  Бочкарева С.А., Гришаева Н.Ю., Буслович Д. Г., Корниенко Л. А., Люкшин Б.А., Панин С.В., Панов И.Л., Донцов Ю. В. Разработка износостойкого экструдируемого композиционного материала на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена с заранее заданными свойствами. Механика композитных материалов. — 2020. — Т. 56, №1. — С. 1—16.

[9]  Sergey V. Panin, Boris A. Lyukshin, Svetlana A. Bochkareva, Lyudmila A. Kornienko, Nguyen Duc Anh, Le Thi My Hiep, Iliya L. Panov and Nataliya Yu. Grishaeva. Material Design Methodology for Optimized Wear‐Resistant Thermoplastic–Matrix Composites Based on Polyetheretherketone and Polyphenylene Sulfide. Materials, 2020, 13, 524.