



分子模拟硅灰石与硅烷作用机制及改性粉体填充尼龙6性能

摘要：通过采用硅烷对硅灰石进行干法改性优化硅灰石物化性能，探究了改性温度、时间、硅烷用量对改性效果的影响。采用红外光谱对改性前后硅灰石粉体表面官能团进行表征。分别将未改性硅灰石原样与改性粉体填充尼龙6制备复合材料，对复合材料的冲击强度、拉伸强度、弯曲强度、弯曲模量、热变形温度等指标进行测试。使用分子模拟分析了硅烷SCA1113（3-氨基三乙氧基硅烷）改性硅灰石的微观机制。结果表明：改性温度80℃，改性时间20min，硅烷用量0.8%为优化工艺条件；未改性硅灰石填充尼龙6样品较尼龙6纯样刚性提高但降低韧性，而改性后的硅灰石填充尼龙6可以同时提高尼龙6材料的刚性与韧性；硅烷SCA1113改性硅灰石时其反应性不来自于硅灰石晶体内部，晶面（100）最具反应性，硅烷SCA1113与硅灰石表面吸附为化学吸附，形成了Si-O-Ca键。

关键词：硅灰石;硅烷SCA1113;尼龙6;力学性能;分子模拟

基金资助：浙江省非金属矿工程技术研究中心开放课题基金（ZD2023K07）

《复合材料科学与工程》，网络首发2024-04-28

废旧聚氨酯泡沫醇解产物作为再生剂实现废橡胶的力化学再生

摘要：近年来，废聚氨酯和废橡胶产量呈上升趋势，其资源化循环利用成为研究热点。本文使用丙二醇作为醇解剂在不同温度下分解聚氨酯泡沫，并利用聚氨酯醇解产物作为再生剂实现了废橡胶的力化学再

生。醇解产物下层液（PAPL）含有较多的胺类基团，可与橡胶再生过程中产生的自由基结合，提高橡胶的脱硫程度，从而提高再生胶（RRs）的力学性能。与只添加活化剂的RRs相比，在原有活化剂添加份数的基础上，加入PAPL可缩短RRs的最佳硫化时间，提高交联密度。使用180℃制备的聚氨酯醇解产物下层液，RRs硫化橡胶的综合性能最好，拉伸强度达到15.6MPa，断裂伸长率达到325.5%。该方法实现了废聚氨酯和废橡胶的双重高价值回收，应用前景广阔。

关键词：聚氨酯醇解;废橡胶回收;再生试剂;高价值回收

《高分子材料科学与工程》，网络首发2024-05-08

基于虚拟纤维的各向异性超弹性材料本构模型设计

摘要：为了拓展图形学弹性体模拟中的各向异性超弹性虚拟材料种类，建立了基于虚拟纤维的本构模型。首先从能量可加性出发，将超弹性体应变能量密度函数分解为轴向、剪切、体积分量的纤维加和形式，然后建立单根纤维的轴向应变、剪切应变、体积应变的应变度量，最后推导出各分量的应力表示。仿真实验使用基于四面体的非线性有限元法（finite element method, FEM），半隐式时间积分进行解算，并采用CPU串行算法，测试了不同场景下非线性能量函数以及纤维权重组合对虚拟纤维材料刚度、泊松效应、轴向特性的影响。结果表明，虚拟纤维本构模型具有大变形稳定性，材料参数设置可良好地展现上述物理特性，相比现有的横观各向同性模型具有更丰富的可调节能力。

关键词：各向异性材料;有限元;物理动画;虚拟纤维

《计算机辅助设计与图形学学报》，

网络首发2024-04-23

油酸钾浓度及玄武岩纤维取向对天然橡胶/玄武岩纤维复合材料性能的影响

摘要：通过油酸钾溶液对玄武岩纤维进行表面改性处理，研究不同浓度的油酸钾溶液对玄武岩纤维表

面处理及玄武岩纤维取向对天然橡胶 (NR) /玄武岩纤维 (BF) 复合材料综合性能的影响。结果表明, 随着油酸浓度的增大, 复合材料的拉伸强度、撕裂强度及断裂伸长率均表现为先增大后减小, 且在油酸钾溶液的质量分数为7%时取得最大值, 拉伸强度提高了15.6%, 撕裂强度提高了12.1%; BF经定向排列后, 复合材料的Payne效应减弱, 采用径向取向制备的复合材料, 其拉伸强度提高了2.3%, 断裂伸长率降低了17.8%, 但磨损增加了8.3%。扫描电镜缝隙表明, 7%浓度的油酸钾可以均匀地包覆在BF表面, 纤维在橡胶中分散性较好。

关键词: 玄武岩纤维;油酸钾;复合材料;纤维取向;天然橡胶

基金资助: 国家自然科学基金资助项目(50775116); 山东省重点研发计划(2019JMRH00205); 山东省自然科学基金资助项目(ZR2016XJ003); 山东省自主创新及成果转化专项(2014CGZH0405)

《高分子材料科学与工程》, 网络首发2024-05-08

帽形加筋壁板共固化用硅橡胶芯模孔占比对维形传力效果及壁板成型质量的影响

摘要: 为满足帽形加筋壁板共固化成型过程中固化压力的均匀传递, 实现制件良好的厚度均匀性和型腔高度, 对帽形加筋壁板成型工艺辅助芯模进行改进, 提出一种设置梯形预制孔的硅橡胶薄壁芯模—真空袋组合的新型柔性芯模。利用有限元仿真方法, 研究了不同孔占比的硅橡胶薄壁芯模对帽形加筋壁板共固化成型过程中的压力传递均匀性的影响, 并对固化后帽形加筋壁板成型精度进行了分析。结果表明: 当硅橡胶薄壁芯模预制孔孔占比在0.68-0.84之间时, 硅橡胶薄壁芯模膨胀适中且均匀, 能够实现压力的均匀、稳定传递, 同时保证帽形加筋壁板外形准确度。最后, 通过实验方法验证了硅橡胶芯模热膨胀有限元模拟的正确性, 为实现硅橡胶芯模辅助帽形加筋壁板成型厚度均匀性开创了工艺窗口。

关键词: CFRP帽形加筋壁板;共固化;柔性组合芯模;预制孔;维形传力

基金资助: 国家自然科学基金青年-复合材料曲线仿生格栅结构成型工艺及其形性调控机理研究

(52005257)

《复合材料科学与工程》, 网络首发2024-04-18

注射成型中聚合物熔体信息的超声在线测量

摘要: 提出了成型中聚合物熔体温度和密度的超声在线测量方法, 并与其他方法对比验证了超声在线测量方法的正确性。设计并制造了底部不封口的流变模具, 搭建了超声信号与温度、压力信号采集平台, 采集超声信号后进行分析计算, 得到聚合物熔体内超声速度变化曲线, 结合压力、温度信号, 对注射成型中熔体信息进行计算分析。结果表明, 超声速度信号可无损定性反映熔体在型腔内的演化过程; 借助于压力信号可迭代计算熔体温度演变曲线, 与红外光纤温度传感器测量结果相比误差小于6%, 实现了对聚合物熔体温度的无损定量分析; 对超声信号在时/频域内分别计算分析, 得到声阻抗与声速的变化曲线, 进而计算得到熔体密度的演变曲线, 与压力-体积-温度(PVT)方法计算得到的结果十分吻合, 均方差仅0.040 3 g/cm³, 实现了对聚合物熔体密度的无损定量测量。超声测量技术可实现注射成型中聚合物熔体信息的在线测量, 在实际生产过程中具有广阔的应用前景。

关键词: 注射成型;熔体信息;温度;密度;超声测量

基金资助: 宁波市科技创新2025重大专项(2021H002); 浙江省“尖兵”“领雁”研发攻关计划项目(2022C01069、2023C01170)

《中国塑料》, 2024, 04

