

Załącznik 2: Autoreferat

1. Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

- **Doktor inżynier** (niem. **Doktor-Ingenieur**), Wydział Mechaniczny, Uniwersytet Techniczny w Dreźnie (niem. *Technische Universitaet Dresden*), Niemcy (nadany 04.11.2004).
Temat: „Sensitivity Analysis of Interface Fatigue Crack Propagation in Elastic Composite Laminates”.
Promotorzy: Dr hab. Bernd Lauke oraz Prof. Dr hab. G. Heinrich, Instytut Badań nad Polimerami (IPF) (niem. *Leibniz-Institut fuer Polymerforschung*) w Dreźnie, Niemcy/ Uniwersytet Techniczny w Dreźnie, Niemcy).
- **Magister inżynier**, Wydział Budownictwa, Architektury i Inżynierii Środowiska, Politechnika Łódzka (nadany 20.10.1999). Specjalność: Konstrukcje budowlane i inżynierskie.
Temat: „Analiza numeryczna właściwości efektywnych kompozytów o składnikach sprężysto-plastycznych”.
Promotor: Prof. dr. inż. hab. Marcin Kamiński, Politechnika Łódzka.

2. Zatrudnienie w jednostkach naukowych

- **Adiunkt** (ang. *Assistant Professor*), Warwick Manufacturing Group, Uniwersytet w Warwick, Wielka Brytania (od 2014 r);
- **Wykładowca** (ang. *Lecturer*), Wydział Inżynierii, Uniwersytet w Portsmouth, Wielka Brytania (2013-2014);
- **Specjalista**, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk w Łodzi (2012-2013);
- **Wykładowca** (ang. *Lecturer*), Wydział Mechaniczny, Lotniczy i Biomedyczny, Uniwersytet w Limerick, Irlandia (2009-2012);
- **Pracownik naukowy** (ang. *Postdoctoral Researcher*), Wydział Nauk Inżynierskich, Uniwersytet w Oksfordzie, Wielka Brytania (2006-2009);
- **Pracownik naukowy** (ang. *Postdoctoral Researcher*), Instytut Badań nad Materiałami, Niemieckie Centrum Lotnictwa/Kosmiczne (DLR) w Kolonii, Niemcy (2005-2006);
- **Pracownik naukowy**, Instytut Badań nad Polimerami (IPF), Drezno, Niemcy (2000-2004).

3. Wskazanie osiągnięcia stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

Osiągnięciem naukowym habilitanta wynikającym z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595 z późn. zm.) jest jednotematyczny cykl publikacji zatytułowany „**Zbadanie związku przetwarzanie-morfologia-zachowanie mechaniczne dla nanokompozytów polimerowych: modelowanie i eksperymenty**”. Cykl ten tworzy 9 publikacji o spójnej tematyce, które są wyszczególnione poniżej:

- H1. **Ł. Figiel**, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley “Computational modelling of large deformations in layered-silicate/PET nanocomposites near the glass transition” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18 (2010), 015001 (21pp), IF=2.167 (za 2014 r.)
- H2. C. Pisano, **Ł. Figiel** „Modelling of morphology evolution in intercalated PET-clay nanocomposites during semi-solid state processing” *Composites Science and Technology* 75: 35-41, 2013, IF=3.569 (za 2014 r.)
- H3. **Ł. Figiel** “Effect of the interphase on large deformation behaviour of polymer-clay nanocomposites near the glass transition: 2D RVE computational modelling” *Computational Materials Science* 84: 244-254, 2014. [korekta: *Computational Materials Science* 89: 264, **2014**], IF=2.131 (za 2014 r.)
- H4. M. Stępień, **Ł. Figiel** „Morphology evolution and macroscopic behaviour of PLA-organoclay nanocomposites during extensional rheology: experimental study” *Polymer Testing* 42: 79-88, 2015, IF=2.240 (za 2014 r.)
- H5. **Ł. Figiel**, C.P. Buckley “Elastic constants for an intercalated layered-silicate/polymer nanocomposite using the effective particle concept - a parametric study using numerical and analytical continuum approaches”. *Computational Materials Science*, 44(3), 1332-1343, 2009, IF=2.131 (za 2014 r.)
- H6. C. Pisano, P. Priolo, **Ł. Figiel** “Prediction of strength in intercalated epoxy-clay nanocomposites via finite element modelling” *Computational Materials Science* 55, 10-16, 2012, IF=2.131 (za 2014 r.)
- H7. D. Weidt, **Ł. Figiel** “Predictions of energy absorption characteristics of aligned CNT-epoxy nanocomposites” In: J. Njuguna (ed.), *Structural Nanocomposites*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2013 (DOI: 10.1007/978-3-642-40322-4_9)
- H8. D. Weidt, **Ł. Figiel** “Finite strain compressive behaviour of CNT/epoxy nanocomposites: 2D versus 3D RVE-based modelling” *Computational Materials Science* 82: 298-30, 2014, IF=2.131 (za 2014 r.)
- H9. D. Weidt, **Ł. Figiel** “Effect of CNT waviness and van der Waals interaction on the nonlinear compressive behaviour of epoxy/CNT nanocomposites” *Composites Science and Technology* 115: 52-59, 2015, IF=3.569 (za 2014 r.)

Mój wkład w powstanie wyżej wymienionych prac wynosił 45%-100%. Szczegółowe dane zawarłem w Załączniku 3 (Wykaz publikacji – część I).

3.1. Wprowadzenie

Nanotechnologia jest obecnie jednym z najbardziej dynamicznie rozwijających się obszarów badań i rozwoju w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych, który koncentruje się na rozwoju technologii, urządzeń oraz nowoczesnych rozwiązań, na poziomie nano (tj. poniżej 100 nm). Ze względu na swoją różnorodność tematyczną skupia ona wokół siebie wiele dyscyplin i specjalności. Jedną z nich jest inżynieria materiałowa, a w niej szczególnie prężnie rozwijającą się jest technologia i nauka o polimerach oraz ich kompozytach. Choć sama nauka o polimerach i ich kompozytach od dawna już zajmuje się badaniami ich struktury i zachowania na poziomie nano (np. kopolimery czy elastomery napełnione sadzą) to jednak pojawienie się nowych nanocząstek, mogących pełnić rolę nanonapełniaczy, takich jak organicznie modyfikowane nanopłytki glinki, nanorurki węglowe czy grafen, pozwoliło wykształcić odrębną klasę materiałów polimerowych zwanych *nanokompozytami polimerowymi* o ogromnym znaczeniu dla rozwoju nanotechnologii. Materiały te stały się przedmiotem znacznego zainteresowania z powodu obiecujących efektów poprawy właściwości fizyko-mechanicznych takich jak sztywność, wytrzymałość, odporność na pękanie, odporność na przenikanie powietrza czy pary wodnej, niepalność, przewodnictwo cieplne i elektryczne, czy też stabilność termiczna (Pinnavaia i Bealle, 2000; Njuguna i Pielichowski, 2003; Utracki, 2004; McNally i Poetschke, 2011; Young i wsp., 2012). Poprawa właściwości fizyko-mechanicznych polimerów jest szczególnie ważna z punktu widzenia zastosowań inżynierskich, zaczynając od lotnictwa (np. nanonapełnione osnowy polimerowe dla klasycznych laminatów o polepszonej wytrzymałości na udar), w inżynierii biomedycznej (np. implanty, rusztowania), aż po nowoczesne urządzenia generujące/przetwarzające energię (np. ogniwa fotowoltaiczne) oraz elastyczną elektronikę (np. giętkie wyświetlacze). W przypadku nanokompozytów polimerowych, poprawa ich właściwości mechanicznych łączona jest z:

- (1) typem nanonapełniacza w zależności od ilości jego wymiarów w skali nano, tj. **1-D** (jeden wymiar jest w skali nanometrowej, np. nanopłytki glinki lub grafen), **2-D** (dwa wymiary są nanometrowe, np. nanowłókna celulozowe lub nanorurki węglowe) oraz **3-D** (trzy wymiary są rzędu nanometrów, np. sferyczne nanocząstki krzemionki lub polihedralne oligosilseskwioksany (ang. *POSS*)),
- (2) właściwościami mechanicznymi samych nanonapełniaczy (np. wysoki moduł Young'a),
- (3) geometrią definiowaną poprzez wysoki współczynnik kształtu (ang. *high aspect ratio*),
- (4) wysokim stosunkiem powierzchni do objętości,
- (5) rozmiarem nanocząstek (np. średnicą nanocząstek sferycznych) .

Efekty (2)-(3) są analogiczne do wywołanych przez napełniacze typu mikro np. przez krótkie lub ciągle włókna węglowe (Wagner, 2002), gdzie wzmocnienie spowodowane jest obecnością sztywniejszego składnika oraz dzięki długości/powierzchni nanonapełniacza, wzdłuż której następuje przekazywanie naprężeń z osnowy. Natomiast efekty (1),(4)-(5) łączone są z tzw. *efektami nano*. Mianowicie, całkowite pole powierzchni nanonapełniaczy w osnowie jest znacząco większe w porównaniu z polem powierzchni mikrowłókien - np. całkowite pole powierzchni nanorurek węglowych (o średnicy 12 nm i długości 20 μm) jest ok. 500 razy większe w porównaniu z całkowitym polem powierzchni sferycznych mikronapełniaczy (o średnicy 100 μm) dla tej samej frakcji objętościowej 0.1% w objętości 1mm^3 (Ma i wsp., 2010), co prowadzi do znaczącej zmiany oddziaływań pomiędzy

polimerem a nanonapełniaczem. W zależności od chemicznej modyfikacji powierzchni nanonapełniacza, może to prowadzić do fizycznego lub chemicznego połączenia osnowy i nanowtrącenia, a w efekcie mieć mniej lub bardziej korzystny wpływ na przekazywanie naprężenia z osnowy na nanonapełniacz. Ponadto, zmienione pole oddziaływań typu nanonapełniacz-polimer prowadzi często do zmiany lokalnego zachowania mechanicznego oraz mobilności polimeru w rejonie nanowtrącenia. Zakłada się, że rejon ten ma skończoną grubość (mierzoną od granicy napełniacz-polimer) i nazywany jest on najczęściej interfazą polimerową, której właściwości fizyko-mechaniczne, różnią się od polimeru bez nanowtrąceń (Utracki, 2004). Zmiana mobilności i właściwości fizyko-mechanicznych osnowy polimerowej w rejonie interfazy może być dodatkowo spowodowana rozmiarem nanonapełniaczy i odległościami pomiędzy nimi (Jancar i wsp., 2010). W odróżnieniu od napełniaczy o rozmiarze mikro, odległości pomiędzy poszczególnymi nanowtrąceniami mogą być porównywalne z promieniem żyracji (z ang. *radius of gyration*) łańcuchów polimeru, szczególnie w przypadku wysokiego stopnia dyspersji nanonapełniacza. W takiej sytuacji prowadzi to do ograniczeń przestrzennych narzuconych łańcuchom polimerowym w pobliżu nanonapełniaczy. W rezultacie, powyższe efekty *nano* mogą bezpośrednio prowadzić do znacznej modyfikacji mobilności oraz właściwości fizyko-mechanicznych samego polimeru w pobliżu nanonapełniacza, takich jak temperatura zeszklenia czy moduł Young'a, co dalej prowadzić może do znacznej modyfikacji zachowania makroskopowego tych materiałów (Liao i wsp., 2014).

Pomimo powyższych przypuszczeń oraz hipotez wynikających z badań przeprowadzonych w wielu ośrodkach na świecie, szczegółowa i systematyczna wiedza o wpływie nanonapełniacza na przetwarzanie oraz właściwości mechaniczne nanokompozytów polimerowych nie jest jeszcze w pełni dostępna. Ogólnie, wymaga to lepszego poznania oraz optymalizacji związku pomiędzy warunkami przetwarzania (np. temperaturą czy prędkością odkształcenia), składem nanokompozytu (np. frakcją objętościową napełniacza, czy modyfikacjami chemicznymi powierzchni nanowtrąceń), morfologią materiału (np. stopniem dyspersji i ukierunkowaniem nanowtrąceń) i makroskopowymi właściwościami nanokompozytów (np. modułem Young'a czy wytrzymałością). Szczegółowe poznanie tego związku pozwoliłoby na wydajniejsze lub całkowicie nowe wykorzystanie nanokompozytów polimerowych w zastosowaniach inżynierskich. Systematyczne zbadanie powyższego związku za pomocą technik eksperymentalnych wymaga połączenia wielu zaawansowanych metod charakteryzacji oraz odpowiedniej preparatyki próbek do np. studiowania przestrzennej morfologii nanokompozytów za pomocą mikroskopii transmisyjnej, metod rentgenowskich, czy też mikroskopii sił atomowych (Tracz i wsp., 2005; Gołębiewski i wsp., 2008; Różański i wsp., 2009; Bartczak i wsp., 2014), czy też studiowania lokalnej dynamiki i właściwości fizyko-mechanicznych nanokompozytów polimerowych za pomocą spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (ang. *nuclear magnetic resonance spectroscopy*) (Brus i wsp., 2006), czy też spektroskopii Ramana (Young i wsp., 2011) co jest często bardzo czasochłonnym i kosztownym zajęciem. Z tego powodu, coraz większą rolę przy przewidywaniu tego związku odgrywają zaawansowane modelowanie i symulacje komputerowe zachowania tych materiałów, czasem nazywane *eksperymentami komputerowymi*, które są ważnym elementem uzupełniającym badania eksperymentalne, nie tylko w specjalności polimery i nanokompozyty polimerowe, ale i w całej dziedzinie inżynierii materiałowej.

Uniwersalny model dla nanokompozytów polimerowych, który opisuje zachowanie mechaniczne, łącząc ze sobą wiele skal czasu i długości jeszcze nie istnieje. W wielu

przypadkach przewidywanie właściwości mechanicznych nanokompozytów ogranicza się do wybranej skali czasu lub/i długości. W tym kontekście należy wymienić modele bazujące na dynamice molekularnej (ang. *molecular dynamics*) (Binder, 1995), które pozwalają na studiowanie obszarów w zakresie długości $\sim 0.1-100\text{nm}$ oraz krótkotrwałych zjawisk z zakresu czasu $\sim \text{fs}-\text{ns}$. Pomimo tych ograniczeń, modele dynamiki molekularnej pozwalają na wyznaczenie oddziaływań pomiędzy modyfikatorem powierzchni a nanonapełniaczem (Hackett i wsp., 2010), polimerem a nanonapełniaczem (Sikdar i wsp., 2006, Awasthi i wsp., 2009, Chen i wsp., 2013), oraz właściwości mechanicznych (np. moduł sprężystości Young'a) samego nanonapełniacza (Manevitch i Rutledge, 2004), czy też zachowania zaglomerowanego nanonapełniacza (Xu i wsp., 2012). Modele *mezoskopowe* (z ang. *mesoscale*) dla nanokompozytów polimerowych koncentrują swoją uwagę na układy w skali długości $\sim 100\text{nm}-\text{mm}$ oraz skali czasu $\mu\text{s}-\text{s}$, i pozwalają na przewidywanie makroskopowych właściwości fizyko-mechanicznych nanonapełnionych polimerów z uwzględnieniem struktury i morfologii materiału oraz oddziaływań polimer-napełniacz oraz napełniacz-napełniacz (Elliott i Windle, 2000; Long i Sotta, 2006).

W wielu przypadkach, eksperymentalnie uzasadnionym oraz wydajnym obliczeniowo jest modelowanie przy pomocy mechaniki ośrodków ciągłych (ang. *continuum mechanics*), zastosowane do analizy zachowania mechanicznego nanokompozytów polimerowych w zakresie skali długości $\text{nm}-\text{m}$, oraz czasu $\text{s}-\text{min}$, szczególnie w połączeniu z koncepcją *Reprezentatywnego Elementu Objętości* (REO) (ang. *Representative Volume Element*) (Gusev, 1997, Odegard i wsp., 2002, Dai i Mishnaevsky, 2014). W tym kontekście, na początku badań nad nanokompozytami szczególnie efektywne okazały się modele pierwotnie zaproponowane do przewidywania właściwości mikrokompozytów, a bazujące na koncepcji Eshelby'ego (Hull i Clyne, 1996). Analizując one zachowanie materiału zawierającego elipsoidalne wtrącenie, które w połączeniu z podejściem Mori'ego-Tanaki (Benveniste, 1987) pozwalają na przewidywanie związku pomiędzy parametrami morfologii (współczynnik kształtu, frakcja objętościowa, uśrednione zorientowanie wtrącenia) i makroskopowymi właściwościami liniowo-sprężystymi (np. moduł Young'a) nanokompozytu (Brune i Bicerano, 2002). Założenie zachowania liniowo-sprężystego polimeru, braku interakcji pomiędzy nanonapełniaczami oraz pomiędzy nanonapełniaczem a polimerem, oraz ograniczony sposób opisu stopnia aglomeracji nanonapełniacza oraz zorientowania są głównymi ograniczeniami tego typu modeli. Niektóre z tych ograniczeń mogą być zmodyfikowane za pomocą odpowiednich koncepcji przybliżania właściwości aglomeratu składającego się z kilku nanopłytek (czyli tzw. taktoidu (ang. *tactoid*)) (Sheng i wsp., 2004, Wang i Pyrz, 2004) oraz uśredniania tensora sprężystości (Luo i Daniel, 2003), czy też przy zastosowaniu rozszerzonych, wieloskładnikowych modeli Mori'ego-Tanaki, do włączenia zachowania liniowo-sprężystego interfazy (Lu i wsp., 2013).

Zastosowanie w/w koncepcji *Reprezentatywnego Elementu Objętości* (REO), oraz połączenie jej z metodami numerycznymi podejścia ośrodków ciągłych np. Metodą Elementów Skończonych pozwala na pokonanie w/w ograniczeń, a więc na bezpośredni opis morfologii nanokompozytu (zarówno dla zagadnień dwuwymiarowych (2D) jak i trójwymiarowych 3D) w postaci rozproszenia i rozkładu nanonapełniacza w osnowie polimerowej (Sheng i wsp., 2004; Hbaieb i wsp., 2010; Cricri i wsp., 2011; Ptaszny i wsp., 2014) oraz przewidywanie liniowych i nieliniowych deformacji nanokompozytu. Dodatkowo, podejście to pozwala na opis zachowania osnowy polimerowej w szerokim zakresie odkształceń, prędkości odkształcenia oraz temperatury, przy użyciu odpowiednich modeli

konstrytuwnych. Ponadto, możliwe jest uwzględnienie informacji z innej skali (np. molekularnej (*Choi i wsp., 2015*)), by opisać bardziej szczegółowo oddziaływania pomiędzy nanonapełniaczem i polimerem, np. za pomocą związku pomiędzy siłą lub naprężeniem a przemieszczeniem na interfejsie (ang. *traction-separation law*), lub przy pomocy zmodyfikowanego modelu konstytutywnego dla matrycy polimerowej. W tym kontekście, należy również wspomnieć o łączeniu skal (np. molekularnej i ciągłej) w jednym modelu (ang. *concurrent model*) (*Li i Chou, 2003; Chandra i wsp., 2013*). Takie modele są jednak na razie ograniczone do szczególnych oraz uproszczonych przypadków układów nanokompozytowych, co nie pozwala na ich wykorzystanie do ilościowego przewidywania związku pomiędzy przetwarzaniem, morfologią i właściwościami mechanicznymi nanokompozytów polimerowych.

Pomimo możliwości oferowanych przez podejście REO, tylko niewielka część prac badawczych dotyczących modelowania nanokompozytów polimerowych, koncentruje się na przewidywaniu nieliniowych właściwości mechanicznych (*Matadi Boumbimba i wsp., 2012*), czy też procesów uszkodzenia (*Song i wsp., 2013*). Jeszcze mniejsza ilość prac skupia się na dużych odkształceniach oraz zakresie temperatur oraz prędkości odkształcenia charakterystycznych dla przetwarzania nanokompozytów (*Spencer i wsp., 2008*). Powyższe zagadnienia są złożone i wymagają połączenia koncepcji REO z odpowiednim opisem fizycznym zachowania mechanicznego polimerów, interfazy oraz interfejsu, w kontekście dużych nieliniowych deformacji w przedziale czasowo-temperaturowym charakterystycznym dla przetwarzania oraz użytkowania nanokompozytów polimerowych. Jeszcze mniejsza część prac badawczych porównuje i weryfikuje takie modele, zarówno jakościowo jak i ilościowo, z wynikami prac doświadczalnych.

3.2. Cel naukowy badań w zakresie tematu pracy habilitacyjnej

Celem naukowym w zakresie pracy habilitacyjnej było systematyczne zbadanie związku pomiędzy morfologią, warunkami przetwarzania a zachowaniem mechanicznym nanokompozytów polimerowych za pomocą eksperymentów komputerowych na bazie koncepcji reprezentatywnego elementu objętości (REO), oraz dostarczenie systematycznej bazy danych doświadczalnych do budowy nowych modeli dla nanokompozytów polimerowych. Szczególny nacisk położono na zbadanie efektów *wielkości odkształcenia*, *prędkości odkształcenia*, *temperatury*, *stopnia eksfoliacji* i *zorientowania nanonapełniacza*, właściwości mechanicznych *interfejsu* oraz *interfazy*, na zachowanie nanokompozytów podczas *przetwarzania* w pobliżu temperatury zeszklenia i topnienia, oraz na wybrane *makroskopowe właściwości mechaniczne* wybranych nanokompozytów polimerowych. Pod uwagę wzięto szeroki zakres właściwości mechanicznych nanokompozytów polimerowych od właściwości liniowo-sprężystych (np. moduł Young'a), do właściwości związanych z zachowaniem sprężysto-plastycznym (np. granicą plastyczności) oraz wytrzymałością, aż po duże odkształcenia sprężysto-lepko-plastyczne związane z przetwarzaniem nanokompozytów w okolicy temperatury zeszklenia oraz topnienia.

W badaniach skoncentrowano się na nanokompozytach polimerowych z dwoma typami nanonapełniacza tj. 2-D (nanorurki węglowe) oraz 1-D (nanopłytki glinki), ze względu na ich duży stosunek powierzchni do objętości, oraz znaczny współczynnik kształtu, a co za tym idzie ogromny potencjał w kontekście zastosowań nanokompozytów polimerowych w opakowalnictwie, elektronice, transporcie czy też generacji/zbiorze energii. Na osnowy polimerowe wybrano szeroko stosowane polimery termoplastyczne (ang. *thermoplastic*) oraz termoutwardzalne (ang. *thermoset*). Wyniki eksperymentów komputerowych porównano z wynikami badań doświadczalnych podjętych przez habilitanta oraz istniejących w literaturze.

3.3. Omówienie najważniejszych wyników

3.3.1. Związek przetwarzanie-morfologia-zachowanie makroskopowe

W pracach **H1-H4** studiowano efekt warunków przetwarzania (temperatury, prędkości odkształcenia, wielkości odkształcenia), składu materiałowego (frakcja wagowa/objętościowa nanonapełniacza), morfologii (dyspersja i zorientowanie nanonapełniacza) oraz wpływu właściwości mechanicznych tzw. galerii (ang. *gallery*) oraz interfazy (ang. *interphase*) na ewolucję morfologii, oraz nieliniowe zachowanie makroskopowe (krzywe naprężenie-odkształcenie) w okolicach temperatury zeszklenia oraz topnienia, dla nanokompozytów termoplastycznych na bazie polietylenu tereftalanu (ang. *PET*) oraz polilaktydu (ang. *PLA*) nanonapełnionych organicznie modyfikowanymi nanopłytkami glinki (ang. *organoclay*).

W pracy **H1** skupiono się na zbadaniu wpływu warunków przetwarzania, frakcji objętościowej oraz początkowego zorientowania nanoglinki w osnowie PET, na reorientację nanoglinki oraz krystalizację nanokompozytu wywołaną odkształceniem, oraz na zachowanie makroskopowe nanokompozytu. W tym celu zbudowano zaawansowany komputerowy model nanokompozytu w oparciu o koncepcję REO, połączony z procedurą Monte Carlo do rekonstrukcji morfologii oraz nieliniowym modelem konstytutywnym opisującym zachowanie osnowy PET w okolicy temperatury zeszklenia. Do rekonstrukcji

morfologii założono, że nanopłytki glinki są w pełni rozwarstwione (eksfoliowane (ang. *exfoliated*)) tzn., że aglomeraty (taktoidy (ang. *tactoids*)) nanopłytek glinki nie występują. Parametry modelu osnowy polimerowej zostały wyznaczone za pomocą wyników testów dwuosiowego rozciągania w okolicach temperatury zeszklenia, przy prędkościach odkształcenia typowych dla wtórnego (ang. *secondary*) przetwarzania nanokompozytów. Wyznaczenie właściwości mechanicznych nanopłytki glinki drogą eksperymentalną jest trudne z uwagi na bardzo małe wymiary nanonapełniacza. Dlatego też jej zachowanie mechaniczne zostało zdefiniowane na podstawie wyników symulacji dynamiki molekularnej przy założeniu liniowo-sprężystego i izotropowego zachowania nanonapełniacza – w rezultacie, dwie stałe sprężyste (moduł Young’a oraz współczynnik ścisłości Poisson’a) uzyskane z symulacji molekularnych zostały użyte do zdefiniowania nanopłytki reprezentowanej jako efektywny ośrodek ciągły w modelu komputerowym REO. Eksperymenty komputerowe pozwoliły przewidzieć znaczny wpływ płytek nanoglinki na makroskopowe krzywe naprężenie-odkształcenie dla różnych frakcji objętościowych nanoglinki w przedziale 1-5%. Największy wpływ nanoglinki na w/w krzywe zanotowano dla dużych odkształceń, choć jej znaczący efekt był również zaobserwowany dla małych odkształceń. Początkowe nachylenie krzywych naprężenie-odkształcenie, znormalizowane względem matrycy (PET), wyniosło ok. 1.27, 1.74 oraz 1.96 dla frakcji objętościowych 1%, 2.5% oraz 5% - uważa się, że **frakcja objętościowa** oraz **wysoki współczynnik kształtu** napełniacza są odpowiedzialne za w/w wzrost sztywności (modułu Young’a) nanokompozytu. Dalszy wzrost odkształcenia spowodował zmianę morfologii nanokompozytu w postaci **reorientacji nanonapełniacza** względem przyłożonego obciążenia – w efekcie tych procesów, zwiększyło się **przekazywanie naprężeń** z osnowy na nanonapełniacz, co doprowadziło do wzrostu makroskopowych naprężeń, czyli tzw. **wzmocnienia** materiału. Procesy te zostały zintensyfikowane wraz z odkształcaniem się materiału i stowarzyszoną z nimi zmianą morfologii, co skutkowało bardzo szybkim wzrostem naprężeń dla dużych odkształceń tj. większych od 1. W pracy H1 zaproponowano dodatkowo, że głównym czynnikiem prowadzącym do wzmocnienia nanokompozytu jest **krystalizacja osnowy spowodowana uporządkowaniem się łańcuchów polimerowych pod wpływem odkształcenia**. Ten efekt występuje również dla nienapełnionej osnowy polimerowej typu PET pod wpływem jej odkształcenia, jednakże jest on **znacznie wzmocniony przez obecność napełniacza**. Dla przykładu, zjawisko w/w krystalizacji pod odkształceniem pojawia się w nienapełnionym PET na poziomie makroskopowych odkształceń ok. 1.6 (w temperaturze 95°C, oraz prędkości odkształcenia 1s⁻¹), podczas, gdy dla badanego nanokompozytu, zostało ono przewidziane już dla odkształceń ok. 0.2, przy frakcji objętościowej nanoglinki 5% (w temperaturze 95°C i prędkości odkształcenia 1s⁻¹). Aby lepiej poznać odpowiednie mechanizmy wzmocnienia, rozdzielono wpływ reorientacji oraz krystalizacji pod wpływem odkształcenia, poprzez odpowiednią dezaktywację części modelu konstytutywnego dla osnowy polimerowej. W efekcie stwierdzono, że **największy wpływ na wzmocnienie materiału w zakresie dużych odkształceń** ma rzeczywiście zjawisko **krystalizacji pod odkształceniem**, przyspieszone obecnością napełniacza. W dalszej części pracy H1, zaobserwowano również, że obecność nanoglinki **nie prowadzi do zmian jakościowych** wykresów naprężenie-odkształcenie w porównaniu do nienapełnionego polimeru, w różnych temperaturach (wokół temperatury zeszklenia T_g) oraz zakresie prędkości odkształcenia 1-32 s⁻¹. Jednakże, naprężenia są znacznie większe dla nanokompozytów niż dla nienapełnionego polimeru, dla tych samych odkształceń. W pracy H1 zbadano też wstępnie wpływ prędkości odkształcenia oraz temperatury na morfologię

nanokompozytu – w rezultacie, przewidziano, że **zmniejszenie temperatury przetwarzania** dla mniejszych prędkości odkształcenia ($1s^{-1}$), **ma większy wpływ na morfologię** prowadząc do reorientacji napełniacza, niż przy większej prędkości ($8s^{-1}$). **Zmianę morfologii** nanokompozytu **stowarzyszono** ostatecznie **ze wspólnym działaniem temperatury oraz prędkości**, a przewidziane trendy były w zgodzie z wynikami badań eksperymentalnych (Soon i wsp., 2009).

W pracy H2 rozszerzono model nanokompozytu by **z badać wpływ stopnia aglomeracji nanopłytek glinki oraz właściwości mechanicznych materiału pomiędzy sąsiadującymi płytkami w taktoidzie nanoglinki tzw. galerii** (ang. *gallery*). W tym celu przeprowadzono rekonstrukcję morfologii nanokompozytu by uwzględnić stałą liczbę płytek w każdym taktoidzie. Ponadto założono, że kompozycja materiałowa galerii składa się z krótkich łańcuchów modyfikatora powierzchni oraz łańcuchów osnowy polimerowej, które zdołały częściowo dyfundować do galerii. Założono, że **zachowanie mechaniczne galerii** podczas przetwarzania jest **zdominowane** poprzez naprężenia ścinające, które **powodują poślizg pomiędzy sąsiadującymi płytkami nanoglinki**. Powyższe założenie jest w zgodzie z wynikami przeprowadzonych eksperymentów (Rajeev i wsp., 2009), w których nie zauważa się separacji w kierunku normalnym do powierzchni nanonapełniacza, a wyłącznie poślizg wewnątrz taktoidów. Do opisu tego poślizgu posłużono się obserwacjami eksperymentalnymi zachowania dwóch równoległych powierzchni pokrytych krótkimi łańcuchami polimeru, oddzielonymi od siebie materiałem w stanie stopionym i poddanymi odkształceniom ścinającym o prędkościach charakterystycznych dla wtórnego przetwarzania polimerów (Leger i wsp., 2006). W rezultacie zachowanie galerii opisano za pomocą nieliniowego związku pomiędzy stycznymi składnikami wektora naprężenia (ang. *traction*) a przemieszczeniem stycznymi do granicy pomiędzy galerią a nanopłytką glinki. Powyższy związek założył, że **poślizg płytek względem siebie następuje przy stałej wielkości naprężenia ścinającego** – przy całkowitym rozsunięciu się płytek, założono, że naprężenie jest w dalszym ciągu podtrzymane poprzez interakcję z osnową, poprzez stale reformujące się oddziaływania typu van der Waals'a. Zachowanie galerii dla bardzo małych odkształceń założono jako liniowe i opisano je za pomocą modułu Young'a o wartości równej modułowi ścinania nienapełnionej osnowy polimerowej PET w rozważanym zakresie temperatur. Wartość naprężenia ścinającego stowarzyszonego z poślizgiem dwóch sąsiadujących płytek nanoglinki przyjęto jako równą 1MPa, co jest wielkością tego samego rzędu co oddziaływania van der Waals'a pomiędzy płytkami nanoglinki w taktoidzie podczas mieszania w stopie (Borse i Kamal, 2009), oraz ścinania pomiędzy dwoma sztywnymi i równoległymi powierzchniami oddzielonymi polimerem w stopie (Leger i wsp., 2006). Jako, że nie zauważono rozwarstwiania się taktoidu w kierunku normalnym do powierzchni nanonapełniacza (Rajeev i wsp., 2009), wytrzymałość galerii w tym kierunku założono jako znacznie większą niż w kierunku stycznymi i przyjęto ją równą ok. 100MPa. Zbadano wpływ trzech różnych kompozycji taktoidów tj. składających się kolejno z 2, 4 oraz 8 płytek nanoglinki. Symulacje komputerowe przeprowadzono w temperaturze 100°C, prędkości odkształcenia $1s^{-1}$, dla 5% frakcji objętościowej nanoglinki – ta znaczna frakcja objętościowa nanoglinki została użyta, by wskazać potencjalnie największy efekt wzmocnienia nanokompozytu. Symulacje przewidywały, że znormalizowany (względem osnowy) **moduł Young'a wzrasta** wraz ze **zmniejszaniem się liczby płytek** w aglomeracie i wynosi odpowiednio, 1.27 dla ośmiopłytkowego aglomeratu oraz 1.62 dla dwupłytkowego aglomeratu – ten wynik związany jest ze **zwiększonym współczynnikiem kształtu dla mniejszych aglomeratów**, a co za tym idzie ze zwiększonym przenoszeniem naprężenia z

osnowy na nanonapełniacz. Skład taktoidu ma jeszcze większy wpływ na zachowanie mechaniczne nanokompozytu dla dużych odkształceń, tj. zauważono, że **początek makroskopowego wzmocnienia materiału** przesuwają się w kierunku coraz **mniej odkształceń wraz ze zmniejszaniem się liczby płytek w aglomeracie**, odpowiednio od odkształcenia ok. 0.7 dla taktoidów dwupłytkowych do ok. 1.1 dla taktoidów ośmiopłytkowych. Warto wspomnieć, że wpływ **liczby płytek w aglomeracie** na makroskopowe krzywe **naprężenie-odkształcenie** jest **jakościowy zbliżony** do wpływu **frakcji objętościowej** nanoglinki, opisanego w pracy H1. W pracy H2 zbadano również wpływ składu taktoidu na średni kąt zorientowania płytek nanoglinki w trakcie odkształcenia. Symulacje przewidziały znaczną reorientację nanonapełniacza w kierunku przyłożonego odkształcenia, od ok. 20° (w zakresie odkształcenia do ok. 0.5) do ok. 5° (zakres odkształcenia 1-1.5). Z drugiej strony, symulacje pokazały **znikomy wpływ składu aglomeratu na reorientację napełniacza**. Zaproponowany model komputerowy nanokompozytu pozwolił również na zbadanie wpływu składu aglomeratów oraz frakcji objętościowej na poślizg płytek nanoglinki w taktoidzie, aby porównać je jakościowo z obserwacjami eksperymentalnymi. Symulacje pokazały, że całkowity **poślizg płytek** w aglomeracie **wzrasta najsilniej do odkształcenia ok. 1**, a potem następuje stopniowa saturacja poślizgu. Symulacje pokazały, że **poślizg** między płytkami nanoglinki jest **niezależny od frakcji objętościowej** nanonapełniacza (dla 1% oraz 5% zawartości nanoglinki), podczas gdy większy całkowity poślizg wewnątrz taktoidu przewidziano dla taktoidu zawierającego większą liczbę płytek (dla tej samej frakcji objętościowej nanoglinki). Zbadano też wpływ składu aglomeratów na początek wzmocnienia naprężenia w różnych temperaturach przetwarzania. Przewidziano, że **wzrost temperatury** prowadzi do **wzrostu odkształcenia**, przy którym rozpoczyna się etap makroskopowego wzmocnienia naprężenia, co jest zgodne z wynikami badań doświadczalnych (*Shen i wsp., 2011*) – zanotowano zmianę w/w odkształcenia z ok. 0.7 (dla 100°C) do ok. 1.05 (dla 110°C) dla dwupłytkowych aglomeratów, oraz z ok. 1.1 (dla 100°C) do ok. 1.5 (dla 110°C) dla ośmiopłytkowych taktoidów. W efekcie stwierdzono, że w przypadku zdolności kontroli stopnia aglomeracji płytek nanoglinki, celowym jest kontrola temperatury do otrzymania odpowiedniej wielkości makroskopowych naprężeń, które z jednej strony pozwolą na otrzymanie produktu o wysokiej jakości (np. o stałej grubości profilu), a z drugiej strony na oszczędności energii podczas procesów przetwarzania.

W pracy **H3** skoncentrowano się na zbadaniu wpływu tzw. interfazy (ang. *interphase*) polimerowej na lokalne zachowanie mechaniczne oraz makroskopowe krzywe naprężenie-odkształcenie w warunkach wtórnego przetwarzania dla układu PET-nanoglinka w okolicach temperatury zeszklenia. W literaturze uważa się, że właściwości oraz zachowanie osnowy polimerowej w pobliżu nanonapełniacza mogą być odmienne od polimeru z dala od nanonapełniacza (*Utracki, 2004*). Ogólnie, właściwości oraz zasięg interfazy są bardzo trudne do wyznaczenia – zakłada się, że zależą one od typu nanonapełniacza oraz polimeru (bezpostaciowy, częściowo krystaliczny), rozproszenia oraz zawartości (wagowej lub objętościowej) nanonapełniacza, które to efekty mają bezpośredni wpływ na rodzaj oraz siłę oddziaływań pomiędzy polimerem a nanonapełniaczem (*Rittigstein i wsp., 2007*). W konsekwencji uważa się, że mobilność polimeru w pobliżu nanonapełniacza jest zmodyfikowana, co wpływa zarówno na relaksację naprężeń w tym obszarze, jak i na makroskopową temperaturę zeszklenia nanokompozytu (*Kalfus i Jancar, 2007, Qiao i wsp., 2011*). Z tego też względu, założono, że obecność interfazy może mieć wpływ na zachowanie nanokompozytu podczas jego przetwarzania w okolicach temperatury

zeszklania. W tym celu, model nanokompozytu, rozwinięty w pracach H1 oraz H2, został rozszerzony by uwzględnić obecność i właściwości interfazy, a co za tym idzie by rozważyć bardziej rzeczywistą morfologię nanokompozytu. Zachowanie oraz frakcja objętościowa interfazy zostały tak dobrane, by móc opisać przesunięcie temperatury zeszklenia w stosunku do nienapełnionego polimeru – zjawisko to zaobserwowano dla układu PET-nanoglinka za pomocą Dynamicznej Termo-Mechanicznej Analizy (ang. *Dynamic Thermal Mechanical Analysis - DMTA*) (Soon i wsp., 2009). Do opisu nieliniowego zachowania interfazy polimerowej zmodyfikowano model konstytutywny dla nienapełnionego polimeru z pracy H1, tak by uwzględnić zmianę mobilności polimeru w pobliżu napełniacza. Z uwagi na przesunięcie makroskopowej temperatury zeszklenia nanokompozytu w stronę mniejszych temperatur (jak pokazała to DMTA), **interfazie polimerowej przypisano zwiększoną mobilność w porównaniu z nienapełnionym polimerem**. Zakłada się, że powyższy efekt spowodowany jest częściową degradacją modyfikatora powierzchni nanoglinki podczas procesu przetwarzania nanokompozytu, gdy modyfikator powierzchni jest w stanie stopionym. W rezultacie, zakłada się, że prowadzi to do zmniejszenia lepkości oraz skrócenia czasu odprężenia (relaksacji) (ang. *relaxation time*) polimeru w pobliżu nanoglinki. Krótszy czas relaksacji interfazy polimerowej opisany jest za pomocą odpowiednio zmniejszonej temperatury odniesienia (ang. *reference temperature*), która jest zdefiniowana za pomocą odpowiednich współczynników przesunięcia (ang. *shift factors*) i tak dopasowana, by opisać przesunięcie współczynnika stratności (ang. *loss tangent*). Temperaturę odniesienia dla interfazy wyznaczono przeprowadzając wstępne symulacje relaksacji naprężenia nanokompozytu dla różnych zawartości objętościowych interfazy, tj. zbadano trzy różne frakcje objętościowe interfazy (względem całkowitej objętości nanokompozytu) równe ok. 0.3, 0.4 oraz 0.5. Stwierdzono, że przebieg współczynnika stratności nanokompozytu w funkcji temperatury najlepiej opisany jest, gdy **temperatura odniesienia jest równa 75.5°C, a frakcja objętościowa interfazy wynosi ok. 0.6**. Te wartości przyjęto do dalszych symulacji dużych odkształceń nanokompozytu w połączeniu z wygenerowaną komputerowo morfologią nanokompozytu. Ta ostatnia została zrekonstruowana na podstawie histogramów przedstawiających rozkład liczby płytek w taktoidzie i utworzonych na podstawie zdjęć z transmisyjnej mikroskopii elektronowej (ang. *TEM*) – rekonstrukcja została przeprowadzona za pomocą procedury Monte Carlo przy użyciu rozkładu skośnego Gauss'a. Eksperymenty komputerowe zostały przeprowadzone w temperaturze 90°C, 95°C oraz 100°C dla prędkości odkształcenia 1 s⁻¹ oraz w zakresie odkształcenia od 0 do 2. Makroskopowe krzywe naprężenie-odkształcenie zostały otrzymane poprzez uśrednienie wyników otrzymanych z 5 różnych modeli REO, podczas gdy każdy z modeli REO zawierał ok. 30 obiektów tj. zarówno aglomeratów jak i eksfoliowanych płytek nanoglinki. Wyniki symulacji wykazały **znaczny wpływ interfazy** na w/w krzywe w porównaniu do przypadku, w którym jej nie uwzględniono. Różnice w obu przypadkach zależały od temperatury i wielkości odkształcenia – odpowiednio, wyniosły one 12.2% i 10.7% dla odkształceń 0.5 oraz 1.5 w temperaturze 90°C, oraz 6.43% i 15.4% dla odkształceń 0.5 oraz 1.5 w temperaturze 100°C. Jako, że wielkości naprężenia przy których dochodzi do przetwarzania materiału na produkty mają wpływ na ich jakość (np. na jednorodny rozkład grubości profilu czy też szorstkość powierzchni produktu), uzyskane wyniki podkreślają **konieczność uwzględnienia interfazy** w symulacjach procesów przetwarzania. W dalszej części pracy H3 zbadano wpływ interfazy na zmianę morfologii nanokompozytu podczas jego przetwarzania w obecności interfazy oraz jej braku, poprzez obserwację reorientacji nanoglinki oraz lokalnego wzmocnienia materiału. W tym celu

rozkłady orientacji nanonapełniacza zostały wyznaczone na podstawie wyników symulacji dla różnych wielkości odkształcenia w zakresie od 0 do 2, w temperaturach 90°C oraz 100°C, a następnie użyte do obliczenia średniej wielkości kąta zorientowania. Wyniki symulacji wskazały, że **następuje znaczna reorientacja nanonapełniacza** w/w zakresie odkształcenia i jest ona równa ok. 30 stopni. Jednakże, wyniki eksperymentów komputerowych wskazały, że **wielkość reorientacji nanonapełniacza statystycznie nie zależy od obecności interfezy oraz temperatury, dla zadanych właściwości interfezy oraz wielkości temperatury**. W dalszej kolejności systematycznie przeanalizowano wielkości obszarów osnowy oraz interfezy, które doświadczają lokalnego wzmocnienia, a co za tym idzie determinują początek krystalizacji pod odkształceniem. W tym celu wyznaczono i porównano frakcje objętościowe tych obszarów dla różnych wielkości odkształcenia i temperatury, w zakresie opisanym powyżej. Wzrost całkowitej frakcji objętościowej związanej ze wzmocnieniem, jest zauważalny powyżej odkształcenia 0.5, choć wyniki dla modeli uwzględniających interfezę oraz modeli bez interfezy są **statystycznie takie same, w zakresie wielkości odkształcenia do ok. 1**. Dopiero powyżej tej wartości odkształcenia, zaobserwowano pewne różnice w wynikach modeli. Przewidziano, że zakres wzmocnienia jest **większy dla niższej temperatury** (90°C), choć efekt interfezy jest wtedy pomijalnie mały – przypuszcza się, że wynika to z faktu, że w tej temperaturze relaksacja naprężenia w osnowie oraz interfezie jest porównywalna. Jednakże w **wyższej temperaturze** (100°C) **relaksacja naprężenia w interfezie przebiega szybciej niż w matrycy**, co prowadzi do opóźnienia procesu wzmocnienia oraz początku procesu krystalizacji wywołanej odkształceniem, w porównaniu z matrycą, a w rezultacie do różnic pomiędzy wynikami symulacji w obecności oraz przy braku interfezy.

W pracy **H4**, która zamyka mini-cykl dotyczący przetwarzania nanokompozytów skoncentrowano się na zbadaniu wpływu składu materiałowego oraz prędkości odkształcenia na ewolucję morfologii oraz zachowanie makroskopowe nanokompozytu polilaktyd-nanoglinka podczas jednoosiowego rozciągania w stopie. Poza dostarczeniem nowej wiedzy, celem tej pracy było również zbudowanie nowej i szczegółowej doświadczalnej bazy danych do zbudowania modelu komputerowego nanokompozytu na bazie koncepcji REO. Celem tego modelu będzie przewidywanie oraz optymalizacja procesów przetwórstwa takich jak wytłaczanie z rozdmuchem dla nanokompozytów opartych na biopolimerach i nanoglince. Praca H4 wypełniła lukę w literaturze, w której brakuje systematycznych danych eksperymentalnych dotyczących deformacji nanokompozytu w stopie. Systematyczne zbadanie tego problemu ma ogromne znaczenie dla lepszego zrozumienia i optymalizacji procesów przetwarzania nanokompozytów w pobliżu temperatury topnienia. W badaniach użyto polilaktydu 4032D oraz zmodyfikowanej powierzchniowo nanoglinki Cloisite 30B. W rezultacie wytworzono nanokompozyty o dwóch frakcjach wagowych nanoglinki 3% oraz 5%. W badaniach rozciągania stopu użyto systemu ARES z przystawką do pomiaru lepkości na rozciąganie (ang. *Extensional Viscosity Fixture*) w temperaturze 168°C oraz w prędkościach odkształcenia Hencky'ego w zakresie od $0.1s^{-1}$ do $10s^{-1}$. Przyjęta temperatura testu, wyznaczona na podstawie temperatury topnienia równej ok. 162°C z różnicowej kalorymetrii skaningowej (ang. *Differential Scanning Calorimetry - DSC*), pozwoliła założyć bezpostaciowość osnowy polimerowej, a wybrany zakres prędkości odzwierciedlił temperatury towarzyszące wytłaczaniu z rozdmuchem. Średnią grubość, długość oraz zorientowanie taktoidów nanoglinki w matrycy scharakteryzowano za pomocą szczegółowej analizy zdjęć z mikroskopu transmisyjnego oraz niskokątowego rozpraszania promieni Roentgena (tylko dla niezdeformowanych

próbek). **Obie metody pozwoliły wyznaczyć porównywalne wartości parametrów morfologii.** Analiza zdjęć mikroskopowych pokazała, że **wzrost odkształcenia oraz prędkości odkształcenia prowadzi do wydłużenia taktoidów** poprzez ich rozsuwanie spowodowane naprężeniami ścinającymi. Odwrotne zjawisko zostało zaobserwowane w stosunku do grubości taktoidów, gdzie następuje ok. 25% **redukcja grubości wraz ze wzrostem w/w parametrów** – przypuszcza się, że eksfoliacja (rozwarstwianie) oraz ściskanie taktoidu (w kierunku normalnym do jego powierzchni) są jednymi z przyczyn tego zachowania. Podobne zachowanie zaobserwowano w pracy (Rajeev i wsp., 2009), podczas dwuosiowego rozciągania nanokompozytów w temperaturach wokół temperatury zeszklenia. Analiza zdjęć mikroskopowych pokazała, że istnieje zależność pomiędzy zorientowaniem taktoidów a prędkością odkształcenia Hencky'ego. **Zależność** ta jest **nieliniowa** i wskazuje, że **wzrost prędkości odkształcenia prowadzi do wzrostu reorientacji taktoidów.** Należy podkreślić, że frakcja wagowa **nanoglinki** (w analizowanym zakresie od 3% do 5%) **nie ma znacznego wpływu** zarówno na zmianę długości i grubości taktoidu oraz jego orientację w analizowanym zakresie prędkości i wielkości odkształcenia. W dalszej części pracy H4 zbadano wpływ odkształcenia oraz jego prędkości na zachowanie makroskopowe nanokompozytów w postaci krzywych naprężenie-odkształcenie. Wyniki pokazały **silną zależność krzywych od prędkości odkształcenia** – naprężenie wzrosło wraz z prędkością odkształcenia dla obu analizowanych zawartości nanoglinki – **zawartość nanoglinki miała mały wpływ na otrzymane wyniki**, choć **naprężenia otrzymane dla nanokompozytów były większe niż dla nienapełnionego polimeru** dla każdej z prędkości odkształcenia. Dalsza analiza pokazała, że maksymalna lepkość nienapełnionego polimeru jest niezależna od prędkości odkształcenia – odmienna sytuacja ma miejsce dla nanokompozytów, dla których maksymalna wartość **lepkości maleje wraz ze wzrostem prędkości odkształcenia**, co pozwala nazwać to **zjawiskiem rozrzedzania rozciąganiem**. Efekt ten połączono z **lokalnym ścinaniem polimeru spowodowanym obecnością nanonapełniacza** – sugeruje się, że efekt ten wpływałby negatywnie na przetwarzanie nanokompozytu, a szczególnie na stabilność jego stopu w procesach takich jak wytłaczanie z rozdmuchem.

3.3.2. Związek morfologia-zachowanie mechaniczne nanokompozytów

W pracach **H5-H9** zbadano zależność pomiędzy morfologią oraz składem materiałowym nanokompozytu (np. frakcją objętościową nanonapełniacza) na wybrane właściwości mechaniczne (moduł Young'a, granicę plastyczności, wzmocnienie odkształceniem, a także wytrzymałość i odporność na pękanie oraz absorpcję energii mechanicznej) nanokompozytów z nanonapełniaczami typu 1-D (nanopłytki glinki) oraz 2-D (nanorurki węglowe). W tym celu zbudowano zarówno liniowe oraz nieliniowe modele komputerowe dla w/w systemów nanokompozytowych, a ich wyniki porównano, tam gdzie było to możliwe, z wynikami odpowiednich prac eksperymentalnych.

Nanokompozyty polimer-nanoglinka

Wiele prac badawczych skoncentrowano na studiowaniu zależności między składem materiałowym a stałymi sprężystymi nanokompozytów polimerowych na bazie żywic epoksydowych z nanoglinską. Jednakże, w literaturze brakowało systematycznych badań wpływu stopnia eksfoliacji oraz zorientowania nanonapełniacza na w/w stałe sprężyste. Dlatego w pracy **H5** wyznaczono wpływ w/w parametrów morfologii na trzy moduły sztywności nanokompozytu (podłużny, poprzeczny i ścinający) w temperaturze pokojowej za

pomocą eksperymentów komputerowych. Założono, że w temperaturze pokojowej mobilność matrycy polimerowej jest pomijalna, a efekty lepkości oraz plastyczności są nieobecne. Liniowo-sprężyste modele komputerowe nanokompozytu na bazie koncepcji REO oraz teorii Mori'ego i Tanaki pozwoliły na systematyczne zbadanie wpływu stopnia eksfoliacji nanopłytek glinki, jej zorientowania oraz zawartości objętościowej, a także efektu właściwości galerii na stałe sprężyste nanokompozytu. W pierwszej części pracy H5 rozważono wydzielowaną morfologię nanokompozytu w postaci kolumnowego rozkładu jednokierunkowo zorientowanych trójpłytkowych taktoidów, by zbadać wpływ stopnia eksfoliacji na stałe sprężyste. Stopień eksfoliacji nanokompozytu został opisany za pomocą stosunku odległości między osią środkową nanopłytki do jej grubości. W rezultacie, różne wydzielowane morfologie nanokompozytu zostały rozważone, począwszy od taktoidu (dla stopnia eksfoliacji dążącego do 1) po pełną eksfoliację (dla stopnia eksfoliacji dążącego do nieskończoności). Współczynnik kształtu każdej z nanopłytek przyjęto jako równy 100, a symulacje komputerowe zostały przeprowadzone dla trzech frakcji objętościowych nanoglinki tj. 1%, 3%, 5%. Wyniki eksperymentów komputerowych przewidywały związek pomiędzy stopniem eksfoliacji a podłużnym oraz poprzecznym modułem Young'a. Początkowo, prawie **liniowy wzrost modułu Young'a** został przewidziany **wraz ze wzrostem stopnia eksfoliacji**, podczas gdy **dalszy wzrost tego ostatniego** w stronę jego wartości maksymalnej doprowadził do **nieliniowego wzrostu** w/w modułu. Obliczenia pokazały, że **maksymalna wartość stopnia eksfoliacji** oraz wielkość modułu Young'a **silnie zależy od frakcji objętościowej nanoglinki**. Wykazano, że **maksymalna wartość stopnia eksfoliacji wzrasta wraz ze spadkiem frakcji objętościowej**. Równie interesującym wynikiem okazał się **brak wrażliwości modułu ścinania na stopień eksfoliacji**, który był **wyłącznie zależny od właściwości matrycy oraz frakcji objętościowej nanoglinki**. W przeciwieństwie do modelu REO, model na podstawie teorii Mori'ego i Tanaki przewidział wartość modułu Young'a jako niezależną od stopnia eksfoliacji - to wynika z jego założeń dotyczących wysokiego stopnia eksfoliacji, dla którego przewiduje on wartości modułu Young'a zbliżone do modelu komputerowego na bazie REO. Niemniej jednak model Mori'ego i Tanaki okazał się wydajny obliczeniowo w badaniach wpływu właściwości galerii oraz zorientowania taktoidów na moduł Young'a nanokompozytu, w połączeniu z koncepcją efektywnego napełniacza. W produktach wytworzonych z nanokompozytów, nanocząstki przyjmują wartości pośrednie dla zorientowania z zakresu od idealnego jednokierunkowego ułożenia do losowej orientacji. Dlatego szczególnie ważnym okazało się zbadanie wpływu zorientowania nanoglinki na moduły Young'a. Rozszerzony model Mori'ego-Tanaki przewidział początkowo nieliniowy wzrost modułu Young'a w kierunku podłużnym wraz ze stopniem jednokierunkowego ułożenia nanoglinki, a potem jego stabilizację. Natomiast, obliczenia dla modułu Young'a w kierunku poprzecznym pokazały, że moduł ten początkowo notuje nieliniowy spadek wraz ze wzrostem jednokierunkowego ułożenia, a następnie jego wartość ulega stabilizacji. Wzrost jednokierunkowego ułożenia nanoglinki doprowadził również do spadku modułu ścinania.

Przedstawione w literaturze wyniki badań eksperymentalnych wskazywały spadek wytrzymałości nanokompozytu wraz ze wzrostem frakcji wagowej nanonapełniacza, a proponowane przez autorów hipotezy sugerowały, że mechanizmem inicjującym zniszczenie nanokompozytu są rysy powstające w galeriach (Wang i wsp., 2005; Akbari i Bagheri, 2007; Ngo i wsp., 2010; Park i wsp., 2010) lub rozwarstwianie się interfejsu pomiędzy matrycą a nanoglinką (Qi i wsp., 2006; Kinloch i Taylor, 2006; Khanbabaei i wsp., 2007). Brak jednoznacznego zdania na powyższe hipotezy, który mechanizm zniszczenia ma

większy wpływ na inicjację procesu zniszczenia oraz spadek wytrzymałości nanokompozytów był motorem do systematycznego zbadania tego problemu za pomocą eksperymentów komputerowych. Dlatego w pracy **H6** zbadano wpływ właściwości mechanicznych (a) **interfejsu** (ang. *interface*) pomiędzy nanoglinką a polimerem oraz (b) **galerii** wewnątrz taktoidu na makroskopową wytrzymałość systemów nanokompozytowych typu żywica epoksydowa-nanoglinka. W tym celu zbudowano i użyto model komputerowy na bazie koncepcji REO, który wziął pod uwagę różne scenariusze zniszczenia galerii oraz interfejsu i pozwolił lepiej zrozumieć efekt w/w mechanizmów dla nanokompozytów o różnym stopniu aglomeracji nanoglinki oraz jej zawartości objętościowej. Nieliniowe zachowanie mechaniczne galerii oraz interfejsu opisano za pomocą dwuliniowego prawa kohezynego. Wyniki eksperymentów komputerowych dla scenariusza, gdy wiązanie na interfejsie pomiędzy matrycą a nanoglinką jest nieskończenie silne (ang. *perfect bonding*), a wytrzymałość oraz odporność na rozwarstwianie się galerii ma wartość skończoną, pokazały, że **wytrzymałość nanokompozytu spada wraz ze wzrostem zawartości nanoglinki**, zgodnie z wynikami badań eksperymentalnych (*Dorigato i wsp., 2011*). Symulacje komputerowe wskazały również, że **wytrzymałość nanokompozytu wzrasta nieliniowo wraz ze wzrostem odporności galerii na pękanie**, dla zadanej liczby płytek nanoglinki w każdym aglomeracie (taktoidzie). Eksperymenty komputerowe przeprowadzone dla dwu-, sześćo- oraz dziesięcio-nanopłytkowych taktoidów pokazały, że **zmniejszając się liczba płytek w aglomeracie** (tj. wyższy stopień eksfoliacji) prowadzi do **spadku wytrzymałości nanokompozytu**. Kolejny scenariusz zbadany za pomocą modelu komputerowego rozważał skończoną odporność na pękanie interfejsu, połączoną ze skończoną odpornością na pękanie galerii. Symulacje wskazały, że zniszczenie nanokompozytu inicjowane jest wyłącznie poprzez zniszczenie interfejsu, **gdy interfejs posiada odporność na pękanie mniejszą niż galeria**. Przy tej **samej odporności na pękanie dla galerii i interfejsu**, zarówno **pękanie galerii** oraz **rozwarstwianie się interfejsu** mają wpływ na **obniżenie wytrzymałości nanokompozytu** – w tym przypadku, spadek wytrzymałości jest większy, niż w przypadku, w którym jedynym mechanizmem zniszczenia jest pękanie galerii. Należy wspomnieć, że gdy wartość odporności na pękanie interfejsu oraz galerii jest większa niż 1 J/m^2 , to symulacje **nie przewidują inicjacji zniszczenia** w zbadanym zakresie przyłożonych (makroskopowych) **odkształceń do ok. 5%**. Innym ważnym rezultatem wynikającym z pracy H6 jest fakt, że **wytrzymałość nanokompozytu powinna brać pod uwagę zarówno współczynnik kształtu taktoidu**, wyrażony poprzez liczbę nanopłytek w aglomeracie, jak i wartość odporności na pękanie interfejsu oraz galerii. Przy niskiej wartości odporności na pękanie interfejsu oraz galerii tj. ok. 0.01 J/m^2 , wyższą wytrzymałość uzyskuje się przy wyższym stopniu aglomeracji (tj. przy większej liczbie płytek nanoglinki w taktoidzie), a więc przy mniejszym współczynniku kształtu. Trend ten jest odwrotny, gdy wartość odporności na pękanie interfejsu oraz galerii wzrasta do ok. 0.1 J/m^2 , co jest w zgodzie z wynikami niektórych badań eksperymentalnych. Wyniki eksperymentów komputerowych pokazały również, że zorientowanie taktoidów ma pewien wpływ na wytrzymałość nanokompozytu - gdy rozważana jest morfologia z losowo zorientowanymi nanopłytkami to galerie poddane są przeważnie mieszanemu trybowi (ang. *mixed mode*) pękania, który pozwala osiągnąć wyższą wytrzymałość, w porównaniu z sytuacją, gdy morfologia składa się z jednokierunkowo zorientowanych taktoidów. Podsumowując, wyniki modelowania w pracy H6 wskazują, że **kluczową dla wytrzymałości nanokompozytu jest kontrola odporności na pękanie zarówno interfejsu oraz galerii, za pomocą odpowiednich chemicznych modyfikacji powierzchni nanoglinki**. Ponadto, choć **niższy stopień eksfoliacji** nie prowadzi zazwyczaj

do zwiększenia modułu Young'a nanokompozytu, to może on jednak prowadzić, w zależności od modyfikacji powierzchniowej nanoglinki, do **zwiększonej wytrzymałości nanokompozytu**, w porównaniu z systemami o wyższym stopniu eksfoliacji.

Nanokompozyty polimer-nanorurki węglowe

Zaawansowane włókniste kompozyty warstwowe na bazie żywic epoksydowych są używane w wielu konstrukcjach w lotnictwie, przemyśle samochodowym czy też w łopatkach wirników w turbinach wiatrowych. Ich główną wadą jest dość kruche zachowanie osnowy na bazie żywic epoksydowych, szczególnie, gdy narażone są one na uderzenie przy przewadze naprężeń rozciągających. W tym celu uwaga została skierowana na polepszenie udarności żywic epoksydowych za pomocą polimerowych nanokompozytów zawierających nanorurki węglowe, które to mogą zostać użyte zarówno jako osnowy lub pokrycia powierzchniowe dla kompozytów warstwowych, by zwiększyć ich odporność na uderzenie. Podstawową hipotezą dla tych badań było to, że podwyższenie odporności na uderzenie nanokompozytów na bazie żywicy epoksydowej z nanorurkami węglowymi jest spowodowane zwiększoną absorpcją energii poprzez: (1) **mechanizm opóźniania wzrostu szczelin** poprzez połączenie ich powierzchni za pomocą nanorurek (ang. *crack bridging*) w wypadku, gdy dominują naprężenia rozciągające oraz (2) **zwiększone odkształcenia plastyczne** w wypadku, gdy przeważają naprężenia ściskające. W tym kontekście, w dostępnej literaturze brakuje systematycznych badań wpływu składu materiałowego oraz morfologii na zachowanie mechaniczne nanokompozytów na bazie żywic termoutwardzalnych z nanorurkami jednościenne i wielościenne. Dlatego w pracach **H7-H9** skoncentrowano się na zbadaniu związku pomiędzy morfologią a właściwościami mechanicznymi powiązanych z absorpcją energii żywic epoksydowych napełnianych nanorurkami węglowymi. W powyższych pracach rozważono dwa przypadki zachowania nanokompozytów pod makroskopowym odkształceniem: (1) przypadek z dominacją odkształceń rozciągających, który prowadzi do bardziej kruchego zachowania żywicy epoksydowej oraz (2) przypadek z przewagą odkształceń ściskających, pod którym żywica epoksydowa może osiągnąć duże nieliniowe odkształcenia makroskopowe. .

W pierwszej części pracy **H7** zbadano systematycznie efekt właściwości mechanicznych interfejsu pomiędzy osnową a nanorurką oraz między nanorurkami na odporność na pękanie nanokompozytów na bazie osnow z żywic epoksydowych z ułożonymi jednokierunkowo nanorurkami dwuścienne. W tym celu skonstruowano osiowo-symetryczny model nanokompozytu za pomocą uproszczonego podejścia REO w postaci pojedynczej komórki periodycznej (ang. *periodic unit cell*). Poszczególne właściwości mechaniczne na interfejsie (polimer-nanorurka oraz nanorurka-nanorurka) zostały wymodelowane za pomocą podejścia strefy kohezyjnej, zintegrowanego z pojedynczą komórką periodyczną. Dwuliniowy model kohezyjny został zdefiniowany za pomocą parametrów takich jak wytrzymałość oraz odporność na pękanie. W tej części badań, model nanokompozytu miał wprowadzoną szczelinę o zadanej długości, która była zlokalizowana w liniowo-sprężystej osnowie polimerowej. Taki model miał reprezentować możliwy scenariusz, w którym pęknięcie w osnowie epoksydowej znajduje się w pobliżu skupiska jednokierunkowo zorientowanych nanorurek. Model został poddany makroskopowemu odkształceniu rozciągającemu w kierunku prostopadłym do powierzchni szczeliny. W rezultacie wyznaczono wpływ właściwości interfejsu na wielkość znormalizowanej (względem nienapełnionej matrycy) prędkości uwalniania energii (ang. *energy release rate*) na czole szczeliny w funkcji przyłożonego odkształcenia. Ogólnie, wyniki symulacji wskazały, że **obecność nanorurek** w

polimerze powoduje **obniżenie naprężeń na czole szczeliny**, a co za tym idzie, prowadzi do **zmniejszenia się wielkości energii uwalniania** w porównaniu z nienapełnionym polimerem, co ostatecznie prowadzi do **zwiększenia odporności na pękanie nanokompozytu**. Wyniki symulacji przewidywały, że najbardziej efektywna redukcja naprężeń na czole szczeliny zachodzi dla mocnego połączenia na interfejsie, szczególnie pomiędzy osnową a nanorurką, co prowadzi do wydajniejszego przekazywania naprężeń z osnowy na nanorurki, a zatem do odciążenia czoła szczeliny. Dlatego przy odpowiedniej modyfikacji powierzchni nanorurek oraz stopniowej hybrydyzacji (sp^3) nanorurek, można oczekiwać redukcji naprężeń, a co za tym idzie zwiększyć obciążenie nanokompozytu, przy którym następuje jego zniszczenie. W dalszej części pracy H7, uwzględniono skończone odkształcenia sprężysto-lepko-plastyczne (oraz ich prędkości) dla osnowy epoksydowej podczas ściskania (Buckley et al., 2001), by wyznaczyć efekt obecności nanorurek jednościennych w osnowie epoksydowej (bez szczeliny) na energię zaabsorbowaną przez nanokompozyt w czasie makroskopowego ściskania. W tym celu, osiowo-symetryczna komórka periodyczności została połączona z nieliniowym modelem konstytutywnym dla żywic epoksydowych poddanych ściskaniu w zakresie prędkości odkształcenia od wartości prawie statycznych (ang. *quasi-static*) ($\sim 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) aż po udarowe ($\sim 10^3 \text{ s}^{-1}$). Znormalizowana (względem nienapełnionej osnowy) absorpcja energii została wyznaczona na podstawie krzywych naprężenie-odkształcenie dla zakresu odkształceń od 0 do ok. 0.13, dla różnych wielkości frakcji objętościowej oraz współczynnika kształtu nanorurek. Symulacje te wskazały na **znaczną korelację pomiędzy zaabsorbowaną energią a frakcją objętościową nanorurek**, szczególnie dla współczynnika kształtu nanorurek większego niż 150. Wyniki pokazały też, że **największy wpływ** na wielkość zaabsorbowanej energii ma **zjawisko wzmocnienia nanokompozytu odkształceniem**, występujące po przekroczeniu granicy plastyczności nanokompozytu, które to **staje się silniejsze** wraz ze **wzrostem frakcji objętościowej** nanorurek.

Wyniki pracy H7 zostały uogólnione na układy nanokompozytowe typu żywica epoksydowa-nanorurka węglowa z orientacją losową nanonapełniacza w przestrzeni trójwymiarowej (3D). W tym celu, w pracy **H8** zbudowano zaawansowany trójwymiarowy (3D) model komputerowy nanokompozytu za pomocą koncepcji REO, by porównać efekt losowego i jednokierunkowego ułożenia nanorurek w osnowie epoksydowej oraz ich frakcji objętościowej i współczynnika kształtu na krzywe naprężenie-odkształcenie dla różnych prędkości odkształceń podczas makroskopowego ściskania nanokompozytu. Morfologia 3D nanokompozytu została zrekonstruowana za pomocą procedury Monte Carlo, dla której podstawą do opisu rozproszenia i zorientowania nanorurek w osnowie był rozkład jednorodny. Geometria nanorurek jednościennych została przybliżona przez efektywne proste (tzn. niepofalowane) i wypełnione w środku nanowłókna, które są efektywniejsze obliczeniowo niż rzeczywiste nanorurki. Morfologia 3D została zintegrowana z nieliniowym modelem konstytutywnym 3D dla osnowy (Buckley i wsp., 2001), by opisać duże odkształcenia nanokompozytu w trakcie ściskania. Doskonale mocne połączenie między osnową a nanorurką zostało założone w pracy H8. Symulacje 3D pokazały interesujący efekt **jednokierunkowego ułożenia nanorurek** na makroskopowe krzywe naprężenie-odkształcenie, które **prowadzi do wzmocnienia materiału tuż po przekroczeniu granicy plastyczności**. Odbiega to znacznie od wyników symulacji dla morfologii nanokompozytu z **losowo zorientowanymi nanorurkami**, dla której dochodzi do **osłabienia materiału** (ang. *stress softening*) tuż po przekroczeniu w/w granicy plastyczności, a dopiero później do wzmocnienia materiału dla dużych odkształceń. Uzyskane wyniki wskazały, że spośród

wszystkich analizowanych w pracy H8 parametrów opisujących morfologię nanokompozytu **zorientowanie nanorurek ma największy wpływ** na krzywe naprężenie-odkształcenie. Jednakże należy również wskazać, że **wzrost frakcji objętościowej** oraz **współczynnika kształtu** nanorurek prowadzi do zwiększenia wartości granicy plastyczności oraz przyspieszenia początku wzmocnienia materiału dla nanokompozytów z losowo zorientowanymi nanorurkami. Innym ważnym parametrem w kontekście zastosowań przeciwdarowych nanokompozytów jest prędkość odkształcenia. Dlatego, w pracy H8 przewidziano wpływ w/w parametru na krzywe naprężenie-odkształcenie nanokompozytu. Symulacje pokazały, że **wzrost prędkości odkształcenia** przynosi efekt podobny jak dla nienapełnionej osnowy tj. **wzrost granicy plastyczności** oraz związanego z nią **odkształcenia**, szczególnie dla nanokompozytu z **równolegle zorientowanymi nanorurkami**. Przypuszcza się, że w/w wzrost może prowadzić do zwiększenia zdolności absorpcji energii odkształcenia nanokompozytu. Niektóre wyniki symulacji zostały porównane jakościowo z dostępnymi wynikami eksperymentów ściskania mat nanokompozytowych z ułożonymi jednokierunkowo nanorurkami węglowymi zinfiltrowanymi żywicą epoksydową (*Dassios i wsp., 2012*) i poddanych dużym odkształceniom ściskającym. Wzrost modułu Young'a oraz wzrost granicy plastyczności zostały zaobserwowane zarówno podczas eksperymentów jak i symulacji. Jednakże, z uwagi na znacznie wyższą zawartość nanorurek węglowych w macie nanokompozytowej oraz ich jednokierunkowe rozłożenie wzdłuż grubości maty, wyniki eksperymentalne reprezentują górną granicę (ang. *upper bound*) zachowania mechanicznego nanokompozytów na bazie żywicy epoksydowej z jednokierunkowo zorientowanymi nanorurkami węglowymi podczas ściskania. Wyniki symulacji 3D porównano również z modelami 2D. W tym kontekście, stwierdzono, że modele 3D są w stanie dokładniej przewidzieć związek morfologia-zachowanie mechaniczne nanokompozytu. Jest to spowodowane tym, że modele 3D pozwalają na pełniejszą rekonstrukcję morfologii nanokompozytu, w postaci bardziej rzeczywistych kształtów nanorurek oraz odległości pomiędzy nimi, a przez to pozwalają na dokładniejsze opisanie oddziaływań pomiędzy nanorurką a polimerem, a co za tym idzie na pełniejszy opis przenoszenia naprężeń z polimeru na nanorurkę.

Wyniki z pracy H8 zostały otrzymane przy założeniu doskonałego połączenia (tzn. o nieskończenie wysokiej adhezji – ang. *perfect bonding*) na granicy (interfejsie) pomiędzy nanorurką oraz osnową, oraz morfologii nanokompozytu uwzględniającej nanorurki jednościenne, reprezentowane jako proste (tzn. niepofalowane) nanowłókna. Jednakże w większości przypadków jest to wyłącznie wygodne uproszczenie rzeczywistej sytuacji, w której nanorurki jedno- lub wielościenne są silnie pofalowane, a połączenie na granicy między osnową a nanorurką jest dość słabe. Dlatego też w pracy **H9** skoncentrowano się na zbadaniu efektów pofalowania nanorurek oraz niedoskonałego połączenia (typu van der Waals'a) na interfejsie polimer-wielościenne nanorurka, za pomocą rozszerzonego modelu komputerowego 3D. Nanorurki wielościenne przybliżono jako efektywne pofalowane nanowłókna, a ich zachowanie mechaniczne opisano jako liniowo-sprężyste poprzecznie izotropowe. Pofalowanie nanorurek przybliżono za pomocą funkcji sinusoidalnej, dla której amplitudę oraz okres wyznaczono eksperymentalnie za pomocą zdjęć ze skaningowej mikroskopii elektronowej (ang. *Scanning Electron Microscopy - SEM*). Oddziaływania van der Waals'a pomiędzy nanorurką a polimerem opisano za pomocą dwuliniowego modelu kohezyjnego, którego parametry zdefiniowano na podstawie istniejących symulacji dynamiki molekularnej oraz potencjału Lennard'a-Jones'a. Zachowanie mechaniczne osnowy polimerowej opisano za pomocą nieliniowego modelu konstytutywnego użytego w pracy H8,

by uwzględnić skończone odkształcenia. Eksperymenty komputerowe przeprowadzono dla makroskopowego ściskania w prawie statycznych (ang. *quasi-static*) prędkościach odkształcenia. Wyniki symulacji przewidywały wzrost modułu Young'a wraz ze wzrostem frakcji wagowej nanorurek, zarówno dla doskonałego połączenia oraz oddziaływań van der Waalsa na granicy polimer-nanorurka. Jednakże, w przypadku **oddziaływań van der Waals'a, zdolność nanorurek do przenoszenia naprężeń jest ograniczona** – zaobserwowano trzykrotne zmniejszenie się modułu Young'a w porównaniu z doskonałym połączeniem na interfejsie polimer-nanorurka. Podobny rezultat przewidziano dla granicy plastyczności tj. wzrost frakcji wagowej spowodował wzrost granicy plastyczności – jednakże w odróżnieniu od modułu Young'a, przewidziano, że granica plastyczności jest **zależna nieliniowo od frakcji wagowej nanorurek, w przypadku uwzględnienia oddziaływań van der Waals'a na interfejsie polimer-nanorurka**. Podobny efekt został przewidziany, gdy rozważono pofalowanie nanorurek, które ograniczyło przekazywanie naprężeń i doprowadziło do mniejszego modułu sprężystości oraz granicy plastyczności w porównaniu z nanorurkami niepofalowanymi. Jednakże z obu w/w parametrów, **pofalowanie** okazało się parametrem mającym **mniejszy wpływ na zachowanie mechaniczne** nanokompozytu w porównaniu z **oddziaływaniem van der Waals'a na interfejsie pomiędzy polimerem a nanorurką**. W aspekcie zdolności nanokompozytu do absorpcji energii, symulacje sugerują, że proste (niepofalowane) nanorurki, dobrze połączone z polimerową osnową na interfejsie, pozwoliłyby na lepsze wykorzystanie potencjału tych materiałów w zastosowaniach przeciwdarowych. Symulacje porównano z wynikami badań eksperymentalnych przeprowadzonymi na układzie z 0.3% zawartością wagową nanorurek w żywicy epoksydowej. Ta niska zawartość wagowa nanorurek wiąże się z faktem, że powyżej tej wartości zaobserwowane zostały aglomeraty nanorurek, które nie były uwzględnione w zaproponowanym modelu komputerowym. Ogólnie, krzywe naprężenie-odkształcenie przewidziane z symulacji były w jakościowej zgodzie z eksperymentami - niewielki wzrost wartości modułu Young'a oraz granicy plastyczności przewidziany za pomocą symulacji został potwierdzony eksperymentalnie – model nanokompozytu uwzględniający połączenie van der Waals'a na interfejsie przewidywał nieco mniejsze wartości dla modułu Young'a oraz granicy plastyczności, podczas gdy wartości obu parametrów zostały nieco zawyżone przy założeniu doskonałego połączenia na granicy osnowa-nanorurka. Ostatecznie stwierdzono, że moduł Young'a oraz granica plastyczności analizowanego nanokompozytu mogą być przewidziane dostatecznie dokładnie przez model komputerowy, gdy założyć wartość wytrzymałości na ścinanie interfejsu jest równa ok. 30 MPa.

3.4. Cytowana literatura

(prace wchodzące w skład rozprawy oznaczone są jako H1-H9 i zostały wymienione przed powyższym opisem)

B. Akbari, R. Bagheri, *European Polymer Journal* 43: 782-788, 2007.

A. P. Awasthi i wsp., *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17: 015002, 2009.

Z. Bartczak i wsp., *European Polymer Journal* 61: 274-284, 2014.

Y. Benveniste, *Mechanics of Materials* 6(2): 147-157, 1987.

K. Binder (Ed.), *Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Science*, Oxford University Press, 1995.

N.K. Borse, M.R. Kamal, *Polymer Engineering and Science* 49(4): 641-650, 2009.

D.A. Brune, J. Bicerano, *Polymer* 43(2): 369-387, 2002.

J. Brus i wsp., *Macromolecules* 39: 5400-5409, 2006.

C.P. Buckley i wsp., *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49: 1517-1538, 2001.

C.P. Buckley i wsp., *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 52: 2355-2377, 2004.

Y. Chandra i wsp., *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 46: 147-153, 2013.

Y. Chen i wsp., *Polymer* 54: 766-773, 2013.

J. Choi i wsp., *Composite Structures* 119: 365-376, 2015.

G. Cricri i wsp., *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 50(3): 207-220, 2012.

G. Dai, L. Mishnaevsky Jr., *Computational Materials Science* 95: 684-692, 2014.

K.G. Dassios i wsp., *Composites Science and Technology* 72: 1027-1033, 2012.

A. Dorigato i wsp., *Materials Science and Engineering A528*, 6324-6333, 2011.

J.A. Elliott, A.H. Windle, *Journal of Chemical Physics* 113: 10367, 2000.

A.A. Gusev, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 45(9): 1449-1459, 1997.

J. Gołębiewski i wsp., *European Polymer Journal* 44(2): 270-286, 2008.

E. Hackett i wsp., *Journal of Chemical Physics* 108(17): 7410-7415, 1998.

K. Hbaieb i wsp., *Polymer* 48: 901-909, 2007.

D. Hull, T.W. Clyne, *An Introduction to Composite Materials*, 2nd edition, Cambridge University Press, 1996.

J. Jancar i wsp., *Polymer* 51: 3321-3343, 2010.

J. Kalfus, J. Jancar, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 45: 1380-1388, 2007.

A.J. Kinloch, A.C. Taylor, *Journal of Materials Science* 41: 3271-3297, 2006.

G. Khanbabaie i wsp., *Journal of Macromolecular Science* 46: 975-986, 2007.

L. Leger i wsp., *C.R. Chimie* 9: 80-89, 2006.

C.Y. Li, T.W. Chou, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 3(5): 423-430, 2003.

K.-H. Liao i wsp., *Macromolecules* 47: 8311-8319, 2014.

D. Long, P. Sotta, *Macromolecules* 39: 6282-6297, 2006.

P. Lu i wsp., *International Journal of Engineering Science* 73: 33-55, 2013.

J.-J. Luo, I.M. Daniel, *Composites Science and Technology* 63(11): 1607-1616, 2003.

P.-C. Ma i wsp., *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 41, 1345-1367, 2010.

O.L. Manevitch, G.C. Rutledge, *Journal of Physical Chemistry B* 108: 1428-1435, 2004.

R. Matadi Boumbimba i wsp., *Mechanics of Materials* 52: 58-68, 2012.

T. McNally, P. Poetschke (Ed.), *Polymer-Carbon Nanotube Composites. Preparation, Properties and Applications*, Woodhead Publishing, Cambridge, 2011.

J. Njuguna, K. Pielichowski, *Advanced Engineering Materials* 5(11): 769-778, 2003.

T.D. Ngo i wsp., *Science and Engineering of Composites Materials* 17: 19-30, 2010.

G.M. Odegard i wsp., *Composites Science and Technology* 62: 1869-1880, 2002.

J.Y. Park i wsp., *Journal of Reinforced Plastics and Composites* 29: 755-770, 2010.

D.R. Paul, L.M. Robeson, *Polymer* 49: 3187-3204, 2008.

T.J. Pinnavaia, G.W. Beall (Ed.) *Polymer-clay nanocomposites*, John Wiley and Sons, 2000.

- J. Ptaszny i wsp., *International Journal of Multiscale Computational Engineering* 12(1): 33-43, 2014.
- B. Qi i wsp., *Composite Structures* 75: 514-519, 2006.
- R. Qiao i wsp., *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 49: 740-748, 2011.
- R.S. Rajeev i wsp., *European Polymer Journal* 45: 332-340, 2009.
- P. Rittigstein i wsp., *Nature Materials* 6: 278-282, 2007.
- N. Sheng i wsp., *Polymer* 45(2): 487-506, 2004.
- D. Sikdar i wsp., *Polymer* 47: 5196-5205, 2006.
- Y. Shen i wsp., *Composites Science and Technology* 71: 758-764, 2011.
- S. Song i wsp., *Composites Science and Technology* 85: 50-57, 2013.
- K.H. Soon i wsp., *Polymer International* 58: 1134-1141, 2009.
- P.E. Spencer i wsp., *Mechanics of Time-Dependent Materials* 12: 313-327, 2008.
- A. Tracz i wsp., *European Polymer Journal* 41(3): 501-509, 2005.
- L.A. Utracki, *Clay-containing polymeric nanocomposites*. Rapra Technology Ltd., 2004.
- K. Wang i wsp., *Macromolecules* 38: 788-800, 2005.
- H. D. Wagner, *Chemical Physics Letters* 361: 57-61, 2002.
- J. Wang, R. Pyrz, *Composites Science and Technology* 64 (7-8): 925-934, 2004.
- W. Xu i wsp., *Polymer* 53: 3735-3740, 2012.
- R.J. Young i wsp., *ACS Nano* 5(4): 3079-3084, 2011.
- R.J. Young i wsp., *Composites Science and Technology* 72: 1459-1476, 2012.

figiel

Załącznik 3: Wykaz opublikowanych prac naukowych oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki.

I. Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, o których mowa w art. 16 ust. 2 Ustawy

Tytuł osiągnięcia naukowego: „**Zbadanie związku przetwarzanie-morfologia-zachowanie mechaniczne dla nanokompozytów polimerowych: modelowanie i eksperymenty**”.

Cykl ten tworzy 9 publikacji o spójnej tematyce wyszczególnionych w poniższej części.

Wykaz jednotematycznych artykułów naukowych stanowiących podstawę postępowania habilitacyjnego (ze szczegółowym wskazaniem i scharakteryzowaniem elementów rozprawy habilitacyjnej, które zostały wykonane samodzielnie):

- **H1. Ł. Figiel**, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley “Computational modelling of large deformations in layered-silicate/PET nanocomposites near the glass transition” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18 (2010), 015001 (21pp), IF=2.167.
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu późniejszych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 85%.
- **H2. C. Pisano, Ł. Figiel** „Modelling of morphology evolution in intercalated PET-clay nanocomposites during semi-solid state processing“ *Composites Science and Technology* 75: 35-41, 2013, IF=3.569.
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, współprzygotowaniu programu do rekonstrukcji morfologii nanokompozytu w 2D, współudziale w przygotowaniu opisu konstytutywnego składników nanokompozytu (w tym zaimplementowaniu i testowaniu modelu konstytutywnego dla osnowy polimerowej PET), analizie wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu i redagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 60%.
- **H3. Ł. Figiel** “Effect of the interphase on large deformation behaviour of polymer-clay nanocomposites near the glass transition: 2D RVE computational modelling” *Computational Materials Science* 84: 244-254, 2014 [Korekta: *Computational Materials Science* 89: 264, **2014**], IF=2.131.
Mój wkład w powstanie tej pracy jest 100%.
- **H4. M. Stępień, Ł. Figiel** „Morphology evolution and macroscopic behaviour of PLA-organoclay nanocomposites during extensional rheology: experimental study“ *Polymer Testing* 42: 79-88, 2015, IF=2.240.
Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, przeprowadzeniu wstępnych badań doświadczalnych rozciągania w stopie, współudziale w analizie wyników i przygotowaniu pierwszej wersji tekstu, i redagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 50%.

- H5.** **Ł. Figiel**, C.P. Buckley “Elastic constants for an intercalated layered-silicate/polymer nanocomposite using the effective particle concept - a parametric study using numerical and analytical continuum approaches”. *Computational Materials Science*, 44(3), 1332-1343, 2009, IF=2.131.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu późniejszych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.
- H6.** C. Pisano, P. Priolo, **Ł. Figiel** “Prediction of strength in intercalated epoxy-clay nanocomposites via finite element modelling” *Computational Materials Science* 55, 10-16, 2012, IF=2.131.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współpracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, współudziale w opracowaniu programu do rekonstrukcji morfologii 2D nanokompozytu oraz w opisie konstytutywnym składników nanokompozytu, współudziale w analizie wyników i napisaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 45%.
- H7.** D. Weidt, **Ł. Figiel** “Predictions of energy absorption characteristics of aligned CNT-epoxy nanocomposites” In: J. Njuguna (ed.), *Structural Nanocomposites*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2013 (DOI: 10.1007/978-3-642-40322-4_9).

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, współudziale w budowaniu modelu nanokompozytu oraz opisie konstytutywnym jego składników (w tym implementacji i testowaniu modelu konstytutywnego dla żywicy epoksydowej), współanalizie wyników, współudziale w przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz redagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 50%.
- H8.** D. Weidt, **Ł. Figiel** “Finite strain compressive behaviour of CNT/epoxy nanocomposites: 2D versus 3D RVE-based modelling” *Computational Materials Science* 82: 298-30, 2014, IF=2.131.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, przygotowaniu i testowaniu pierwszej wersji rekonstrukcji morfologii 3D nanokompozytu, przeprowadzeniu eksperymentów komputerowych 2D, współudziale w opisie konstytutywnym składników nanokompozytu, współudziale w opracowaniu i implementacji nieliniowego podejścia metody homogenizacji w 3D, współudziale w analizie wyników, współudziale w przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz redagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 50%.
- H9.** D. Weidt, **Ł. Figiel** “Effect of CNT waviness and van der Waals interaction on the nonlinear compressive behaviour of epoxy/CNT nanocomposites” *Composites Science and Technology* 115: 52-59, 2015, IF=3.569.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, współudziale w rekonstrukcji morfologii 3D, współudziale w opisie konstytutywnym składników nanokompozytu, współudziale w analizie wyników, współudziale w przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz redagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 50%.

II. Wykaz innych (niewchodzących w skład osiągnięcia wymienionego powyżej) opublikowanych prac naukowych oraz wskaźniki dokonań naukowych

A. Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (IF za rok 2014):

1. I. Uysal Unalan, C. Wan, **Ł. Figiel**, R.T. Olsson, S. Trabattoni, S. Farris 'Exceptional oxygen barrier performance of pullulan nanocomposites with ultra-low loading of graphene oxide' *Nanotechnology* 26, 275703, **2015**, IF=3.821.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu eksperymentów komputerowych dla wyznaczenia właściwości mechanicznych nanokompozytu, analizie i opisie otrzymanych wyników oraz współredagowaniu tekstu. Mój udział procentowy szacuję na 15%.

2. **Ł. Figiel**, C.P. Buckley 'On the modelling of highly elastic flows of amorphous thermoplastics', *International Journal of Non-Nonlinear Mechanics*, 44(4), 389-395, **2009**, IF=1.977.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie otrzymanych wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu kolejnych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

3. **Ł. Figiel**, M. Kamiński 'Numerical probabilistic approach to sensitivity analysis in a fatigue delamination problem of a two layer composite'. *Applied Mathematics and Computation*, 209, 75-90, **2009**, IF=1.551.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie otrzymanych wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu kolejnych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

4. E. Harkin-Jones, **Ł. Figiel**, P.E. Spencer, R. Abu-Zurayk, W. Al-Shabib, V. Chan, R. Rajeev, K. Soon, C.P. Buckley, J. Sweeney, G. Menary, C. Armstrong, H. Assender, P. Coates, F.P.E. Dunne, T. McNally, P. martin. Performance enhancement of polymer nanocomposites via multiscale modelling of processing and properties. *Plastics, Rubber and Composites* 37 (1-3), 113-123, **2008**, IF=0.583.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu eksperymentów komputerowych dla systemu PET-nanoglinka, analizie i opisie otrzymanych wyników oraz współredagowaniu tekstu. Mój udział procentowy szacuję na 20%.

5. **Ł. Figiel**, B. Günther 'Modelling the high temperature longitudinal fatigue behaviour of metal matrix composites (SiC/Ti-6242): nonlinear time-dependent matrix behaviour'. *International Journal of Fatigue* 30: 268-276, **2008**, IF=2.275.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współwypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu eksperymentów komputerowych dotyczących dwuwarstwowego modelu konstytutywnego, analizie i opisie otrzymanych wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu i współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 60%.

6. **Ł. Figiel**, B. Lauke 'Interface Fracture of Polymer Films: Blister Test Experiments and Modelling'. *International Journal of Fracture* 139: 71-89, **2006**, IF=1.566.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współwypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu prac doświadczalnych i eksperymentów komputerowych, analizie i opisie otrzymanych wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu kolejnych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

7. I. Kondyurina, A. Kondyurin, B. Lauke, **Ł. Figiel**, R. Vogel, U. Reuter 'Polymerisation of composite materials in space environment for development of a moon base'. *Advances in Space Research* 37: 109-115, **2006**, IF=1.358.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu obliczeń naprężeń, analizie i opisie otrzymanych wyników oraz współredagowaniu tekstu. Mój udział procentowy szacuję na 5%.

8. **Ł. Figiel**, N.E. Zafeiropoulos, B. Lauke 'Numerical analysis of the elastic constants' effects on the delamination propagation in a curved layered composite beam under cyclic shear loading' *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 36(2): 153-162, **2005**, IF=3.071.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie otrzymanych wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu i współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

9. **Ł. Figiel**, M. Kamiński, B. Lauke 'Analysis of a compression shear fracture test for curved interfaces in layered composites' *Engineering Fracture Mechanics* 71(7-8): 967-980, **2004**, IF=1.767.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współwypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie otrzymanych wyników, napisaniu pierwszej wersji tekstu i współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 80%.

10. E.C. Botelho, **Ł. Figiel**, M.C. Rezende, B. Lauke 'Mechanical Behavior of Carbon Fiber Reinforced Polyamide Composites' *Composites Science & Technology*, 63(13): 1843-1855, **2003**, IF=3.569.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w doświadczalnym wyznaczaniu właściwości mechanicznych oraz analizie otrzymanych wyników, oraz współredagowaniu tekstu. Mój udział procentowy szacuję na 10%.

11. **Ł. Figiel**, M. Kamiński 'Mechanical and thermal fatigue delamination of curved layered composites' *Computers and Structures*, 81 (18-19): 1865-1873, **2003**, IF=2.134.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współwypracowaniu koncepcji badań, przeprowadzeniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie otrzymanych wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu kolejnych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

12. M. Kamiński, **Ł. Figiel** 'Effective elastoplastic properties of the periodic composites' *Computational Materials Science* 22(3-4): 221-239, **2001**, IF=2.131.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie otrzymanych wyników ze współautorem, przygotowaniu wstępnej wersji tekstu oraz współredagowaniu kolejnych jego wersji. Mój udział procentowy szacuję na 70%.

B. Zrealizowane oryginalne osiągnięcia projektowe, konstrukcyjne i technologiczne.

- **Projekt NCN 2011/01/B/ST8/06492**

- Modele komputerowe do przewidywania zachowania nanokompozytów w warunkach technologicznego formowania
- Eksperymentalna baza danych dotycząca związku pomiędzy przetwarzaniem, morfologią a właściwościami makroskopowymi nanokompozytów PLA-nanoglina

C. Udzielone patenty międzynarodowe i krajowe

Brak

D. Wynalazki oraz wzory użytkowe, które uzyskały ochronę i zostały wystawione na wystawach lub targach.

Brak

E. Monografie, publikacje naukowe w czasopismach międzynarodowych, lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie, o których mowa w pkt. II A:

1. D. Weidt, **Ł. Figiel**, M. Buggy 'Prediction of energy absorption characteristics of aligned carbon nanotube/epoxy nanocomposites' *IOP Conference Series-Materials Science and Engineering*, Volume: 40, Article Number: 012028, 2012.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, udziale w analizie wyników, współudziale w przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 40%.

2. D. Weidt, **Ł. Figiel**, M. Buggy 'Influence of interphase properties on the macroscopic response of single- and double-walled CNT/epoxy nanocomposites: a numerical study' *Materials Science Forum* 714, 3-11, **2012**.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, udziale w analizie wyników, współudziale w przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 40%.

3. C. Pisano, P. Priolo, **Ł. Figiel** 'Multiscale Finite Element Modelling of Gallery Failure in Epoxy-Clay Nanocomposites'. *Materials Science Forum* 714, 25-32, **2012**.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współwypracowaniu koncepcji badań i kierowaniu nimi, współanalizie wyników, współudziale w przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 40%.

4. **Ł. Figiel** 'A Two-Scale FE² Approach for Simulation of Forming Processes for Polymer Nanocomposites' In: G. Menary (Ed.) *AIP Conference Proceedings*, Volume 1353, Pages: 1226-1231, **2011**.

Mój udział procentowy wynosi 100%.

5. **Ł. Figiel**, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley 'Multiscale Modelling of Layered-Silicate/PET Nanocomposites during Solid-State Processing' In: R. Pyrz, J.C. Rauhe (Eds), IUTAM SYMPOSIUM ON MODELLING NANOMATERIALS AND NANOSYSTEMS, *IUTAM Bookseries*, Springer, Volume 13, Pages: 19-26, 2009.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 85%.

6. **Ł. Figiel**, B. Lauke, M. Kamiński 'Sensitivity analysis in a fatigue delamination problem of an elastic two-layer composite'. *Engineering Transactions* 56(1), 65-87, **2008**.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań wykonaniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 85%.

7. **Ł. Figiel**, M.M. Kamiński 'Deterministic and probabilistic sensitivity analysis of fatigue fracture model parameters for a curved two layer composite', In: T. Simos, G. Maroulis (Eds.) *LECTURE SERIES ON COMPUTER AND COMPUTATIONAL SCIENCES*, Volume: 4A-4B, Pages: 1062-1064, **2005**.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań wykonaniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

8. **Ł. Figiel**, M. Kamiński 'Numerical analysis of the damage evolution in a composite pipe joint under cyclic static axial tension' *Engineering Transactions* 51(4): 469-485, **2003**.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wypracowaniu koncepcji badań wykonaniu wszystkich eksperymentów komputerowych, analizie wyników, przygotowaniu pierwszej wersji tekstu oraz współredagowaniu jego kolejnych wersji. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

- F. Opracowania zbiorowe, katalogi zbiorów, dokumentacja prac badawczych, ekspertyz, utworów i dzieł artystycznych

Brak

- G. Sumaryczny *Impact Factor* według listy Journal Citation Reports (JCR) zgodnie z rokiem opublikowania

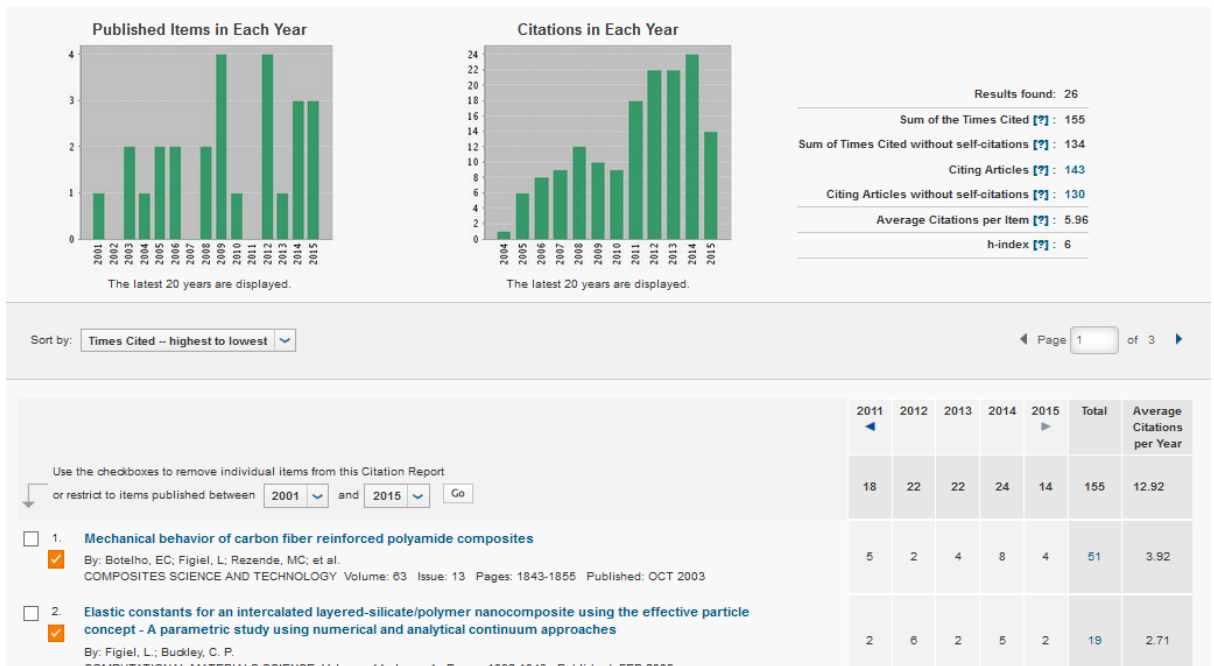
33.67

- H. Liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science:

134 (bez autocytowań)

- I. Indeks Hirscha według bazy Web of Science:

6



J. Kierowanie międzynarodowymi i krajowymi projektami badawczymi oraz udział w takich projektach. Tytuł projektu, lata, nazwa organu finansującego, charakter udziału.

- 'Optymalizacja morfologii i właściwości nanokompozytów na bazie polimerów częściowo krystalicznych w warunkach technologicznego formowania', 2011-2014, *Narodowe Centrum Nauki* (2011/01/B/ST8/06492). Rola: Kierownik projektu
- 'Preparation, testing and modelling of nanocomposite surface coatings to improve the impact behaviour of advanced composite laminates', 2010-2014, *Irish Research Council (IRC)*, Embark Programme, Rola: Kierownik projektu
- 'Performance enhancement of polymer nanocomposites via multi-scale modelling of processing and properties', 2006-2009, Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC) (EP/C006984/1). Rola: Główny wykonawca
- 'Failure mechanics of unidirectional metal matrix composites under thermomechanical fatigue', 2005, German Research Foundation (DFG), PO 405/5-1,2; HE 3370/1-1,2). Rola: Główny wykonawca
- 'Electrokinetic measurements and direct force measurements to describe an influence of environmental conditions on crack propagation in polymeric materials', 2000-2004, German Research Foundation (DFG), LA 818/11-1). Rola: Główny wykonawca
- 'Theoretical and experimental research on shear strength and mode-II toughness of curved composite materials', 2000-2001, German Research Foundation (DFG), (LA 818/6-3). Rola: Główny wykonawca

K. Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową.

- **Composite Award**, Institute of Materials, Minerals, and Mining (IOM3), Londyn, Wielka Brytania, 2009.

III. Dorobek dydaktyczny i popularyzatorski oraz informacja o współpracy międzynarodowej habilitanta.

- A. Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych. Autorzy, rok, tytuł, nazwa konferencji, miejsce.
1. M. Stępień, Ł. Figiel Morphology evolution and macroscopic response of PLA-organoclay in extensional melt deformations: experiments and modelling. *16th International Conference on Deformation, Yield and Fracture of Polymers*, 451-454, Kerkrade (Holandia), March-April, **2015**.
 2. Ł. Figiel. Interphase effects on polymer nanocomposite processing: physically-based multiscale modelling. *11th World Congress on Computational Mechanics*. Barcelona (Hiszpania), 20-25 July **2014**.
 3. Ł. Figiel Modelling interphase effects on large deformation behaviour of thermoplastic polymer-clay nanocomposites. *Third International Conference on Material Modelling*, p. 240, Warszawa (Polska), September **2013**.
 4. D. Weidt, Ł. Figiel, M. Buggy Prediction of energy absorption characteristics of CNT/epoxy nanocomposites *International Conference on Structural Nanocomposites, Cranfield University (Wielka Brytania)*, **2012**.
 5. Ł. Figiel, C. Pisano, M. Zaród, Computational modelling of quasi-solid state processing of PET-clay nanocomposites. *Polymers for Advanced Technologies*, Łódź (Polska), pp. 37, **2011**.
 6. Ł. Figiel, A Two-scale FE² Approach for Simulation of Forming Processes for Polymer Nanocomposites. *14th ESAFORM Conference on Material Forming, American Institute of Physics Conference Proceedings 1353*, pp. 1226-1231, Belfast (Irlandia Północna), **2011**.
 7. Ł. Figiel, Multiscale modelling of quasi-solid state processing of nanoclay/PET nanocomposites, *4th IUPAC International Conference on Polymer Behaviour*, Łódź (Polska), pp. 37, **2010**.
 8. Ł. Figiel, Two-scale Approach for Simulation of Forming Processes for Polymer Nanocomposites, *9th World Congress on Computational Mechanics*, Sydney (Australia), pp. 233, **2010**.
 9. Ł. Figiel, K.H. Soon, C.P. Buckley, Modelling and simulation of the large deformation behaviour of nanoclay/PET nanocomposites near the glass transition. *14th International Conference on Deformation, Yield and Fracture of Polymers (DYFP)*, Kerkrade (Holandia), 183-186, **2009**.
 10. Ł. Figiel, Computational Approach to Delamination Problems for Elastic Laminates using Interfacial Fracture Mechanics, *8th World Congress on Computational Mechanics/5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, Venice (Włochy), July, **2008**.
 11. Ł. Figiel, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley 'Multiscale modelling of layered silicate/PET nanocomposites during solid-state processing'. *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems*, Aalborg (Dania), May, **2008**.
 12. Ł. Figiel, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley 'Multiscale modelling of large deformation behaviour of layered silicate/PET nanocomposites'. *International Forum on Material Behaviour across the Lengthscales: a Meeting in Honour of David Hayhurst*, Oksford (Wielka Brytania), April, **2008**.
 13. Ł. Figiel, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley 'Physically-based modelling of large deformations clay/polymer nanocomposites'. *International Workshop on Computational Mechanics of Materials (IWCMM-17)*, Paryż (Francja), **2007**.
 14. Ł. Figiel, F.P.E. Dunne, C.P. Buckley 'Modelling morphology evolution during quasi solid-state processing of clay/polymer nanocomposites'. *16th International Conference on Composite Materials (ICCM-16)*, Kyoto (Japonia), **2007**.
 15. Ł. Figiel, C.P. Buckley 'The relationship between morphology and elastic deformation in a layered silicate polymer nanocomposite – a numerical study'. *Deformation and Fracture of Composites (DFC9)*, Sheffield (Wielka Brytania), **2007**.

16. Ł. Figiel, S. Brookes, P. Peters, B. Günther 'Modelling of high temperature fatigue behaviour of metal matrix composites (SiC/Ti-6242)' *International Workshop on High Temperature Thermo-Mechanical Fatigue*, Berlin (Niemcy), **2005**.
17. Ł. Figiel, M. Kamiński 'Fatigue sensitivity analysis for a curved composite beam' *7th International Symposium on Brittle Matrix Composites (BMC7)*, Warszawa (Polska), **2003**.
18. Ł. Figiel, M. Kamiński 'Fatigue of composite pipe joint under axial tension' *14th European Conference on Fracture (ECF14): Fracture mechanics beyond 2000*, Kraków (Polska), **2002**.
19. Ł. Figiel, M. Kamiński, B. Lauke 'Fracture and fatigue of curved composite beams' *8th International Conference on Composites Engineering ICCE/8*, Teneryfa (Hiszpania), **2001**.

- B. Udział w komitetach organizacyjnych międzynarodowych i krajowych konferencji naukowych. Nazwa konferencji, rok, miejsce, rola habilitanta
- *3rd International Conference on Advanced Composite Materials and Technologies for Aerospace Applications*, May 13-16, 2013, Wrexham (Wielka Brytania). Rola: Członek międzynarodowego komitetu naukowego.
 - *21st International Workshop on Computational Mechanics of Materials*, University of Limerick (Irlandia), 2011. Rola: Członek lokalnego komitetu organizacyjnego.
- C. Otrzymane nagrody i wyróżnienia inne niż wymienione w pkt II K.
- 2008, **Nagroda na wyjazd konferencyjny** (ang. *Travel Grant Award*), Royal Academy of Engineering (Wielka Brytania)
 - 2003, **Stypendium konferencyjne im. Marii Skłodowskiej-Curie** (ang. *Maria Skłodowska-Curie Travel Scholarship*) (Unia Europejska)
 - 2001, **Stypendium naukowe Max'a-Buchner'a** (Niemcy)
- D. Udział w konsorcjach i sieciach badawczych
- Konsorcjum QUBOX w ramach projektu EPSRC w latach 2006-2009, przy udziale Uniwersytetów w Oksfordzie, Bradford i Belfaście.
- E. Kierowanie projektami realizowanymi we współpracy z naukowcami z innych ośrodków polskich i zagranicznych oraz we współpracy z przedsiębiorcami, innymi niż wymienione w pkt II J
- Brak
- F. Udział w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism
- Brak
- G. Członkostwo w międzynarodowych i krajowych organizacjach oraz towarzystwach naukowych
- **Institute of Materials, Minerals and Mining** (IOM3), UK. Rola: Absolwent (ang. Professional Graduate (ProfGradIMMM)), od 2015 r. (Wielka Brytania)
 - **Engineering Professors Council** (EPC), UK. Rola: członek, od 2015 r. (Wielka Brytania)

H. Osiągnięcia i doświadczenia dydaktyczne

- **Członek Akademii Szkolnictwa Wyższego** (ang. *Fellow of the Higher Education Academy*) w Wielkiej Brytanii, od 2015 r.
- Uniwersytet w Warwick, Wielka Brytania, od 2014 r.:
 - Matematyka dla Inżynierów i Modelowanie Układów (studenci 1go roku: ćwiczenia),
 - Mechanika, Konstrukcje i Termodynamika (studenci 1go roku: ćwiczenia),
 - Obwody Elektryczne oraz Układy Mocy (studenci 1go roku: ćwiczenia),
 - Wprowadzenie do Zarządzania Firmami Inżynierskimi (studenci 1go roku: ćwiczenia),
 - Wprowadzenie do Materiałów Kompozytowych: Nauka i Inżynieria (studenci 2go roku: wykłady)
- Uniwersytet w Portsmouth, Wielka Brytania, 2013-2014:
 - Zasady Matematyczne (studenci 1go roku: ćwiczenia),
 - Wprowadzenie do Mechaniki Ciała Stałego i Dynamiki (studenci 1go roku: laboratorium),
 - Mechanika Ciała Stałego i Dynamika (studenci 2go roku: wykłady),
 - Układy Materiałowe i Inżynierskie (studenci 3go roku: nauka na odległość).
- Uniwersytet w Limerick, Irlandia, 2009-2012:
 - Mechanizmy Lotnicze (studenci 2go roku: wykłady, ćwiczenia, laboratorium),
 - Wprowadzenie do Analizy Metodą Elementów Skończonych (studenci 3go roku: wykłady, ćwiczenia, laboratorium),
 - Nieliniowa Analiza Metodą Elementów Skończonych (studenci magistranci: wykłady, ćwiczenia, laboratorium)
- Uniwersytet w Oksfordzie, Wielka Brytania, 2008:
 - Właściwości Materiałów (studenci 1go roku: ćwiczenia),
 - Metody Matematyczne (studenci 2go roku: ćwiczenia),
 - Konstrukcje i Mechanika (studenci 2go roku: ćwiczenia)

I. Opieka naukowa nad studentami

- Studenci licencjaci/magistranci
 - Uniwersytet w Portsmouth, 2013-2014, Wielka Brytania. Promotor 2 magistrantów (prace obronione).
 - Uniwersytet w Limerick, 2009-2012, Irlandia. Promotor 4 magistrantów oraz 4 licencjatów (prace obronione).

J. Opieka naukowa nad doktorantami

- D. Weidt, Uniwersytet w Limerick, Irlandia, 2010-2014 (wraz z Prof. M.A. Carthy (drugi promotor), Uniwersytet w Limerick, Irlandia); praca doktorska obroniona w 2014 r. Moja rola: *Promotor główny*
- C. Pisano, Uniwersytet w Limerick, Irlandia, 2009-2012 (wraz z Prof. F. Aymerich (drugi promotor)), Uniwersytet w Cagliari, Włochy); praca doktorska obroniona w 2012 r. Moja rola: *Promotor główny*

- K. Udział w zespołach eksperckich i konkursowych
- Narodowe Centrum Nauki, Panel ST8, Kraków, 2012.
- L. Recenzowanie projektów międzynarodowych i krajowych (organ zlecający, okres, rodzaj projektu np. badawczy, liczba recenzowanych projektów)
- Narodowe Centrum Nauki, 2012-2015, ok. 20 projektów.
 - Canada Foundation for Innovation, 2011, 1 projekt.
- M. Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych (Nazwa czasopisma, okres, liczba recenzowanych manuskryptów)
- *Computational Materials Science*: 14 recenzji (od 2008 r.)
 - *Polymer*: 5 recenzji (od 2010 r.)
 - *Philosophical Magazine*: 1 recenzja (od 2012 r.)
 - *European Journal of Mechanics – A/Solids*: 1 recenzja (od 2014 r.)
 - *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*: 1 recenzja (od 2014 r.)
 - *Composites Part B: Engineering*: 1 recenzja (od 2014 r.)
 - *Polymer Testing*: 1 recenzja (od 2015 r.)
 - *Composites Science and Technology*: 1 recenzja (od 2015 r.)
- N. Inne osiągnięcia, niewymienione w pkt III A-III M (nazwa, rok, charakterystyka, charakter udziału)

Wykłady wygłoszone na zaproszenie w instytutach zagranicznych:

- Ł. Figiel, *Multi-scale computational modelling for performance enhancement of polymer nanocomposites. 1st UK-China Symposium on Polymer Nanocomposites*, Uniwersytet w Warwick (Wielka Brytania), Grudzień **2014**.
- Ł. Figiel, *Performance Enhancement of Polymer Nanocomposites via Multi-scale modelling. Faculty Research Conference*, Uniwersytet w Portsmouth (Wielka Brytania), Lipiec **2014**.
- Ł. Figiel, *Processing and Mechanical Properties of Polymer Nanocomposites: physically-based computational modelling. Faculty of Engineering Seminar Series*, Uniwersytet w Nottingham (Wielka Brytania), Luty **2014**.
- Ł. Figiel, *Computational modelling of processing and properties of polymer nanocomposites. Materials Modelling Colloquium*, Uniwersytet w Stuttgarcie (Niemcy), Grudzień **2012**.
- Ł. Figiel, *Multiscale modelling of large deformations in layered-silicate/PET nanocomposites near the glass transition. Materials Modelling Colloquium*, Uniwersytet w Stuttgarcie (Niemcy), Kwiecień **2009**.

