

稀土热塑性聚氨酯防辐射复合材料研究

谭海 翟虹杰 朱洪艳 华菲雪
南京审计大学计算机学院, 江苏 南京 211800

摘要: 本研究通过分子动力学模拟, 系统探究了稀土氧化物增强热塑性聚氨酯 (TPU) 复合材料的防辐射性能。基于 Materials Studio 软件构建了稀土 /TPU 复合材料的分子模型, 模拟其在辐射条件下的结构稳定性、力学性能及辐射屏蔽效率。稀土 /TPU 复合材料兼具轻量化、高屏蔽效率和回收性, 为核辐射防护材料的设计提供了理论依据。未来研究可进一步探索新型稀土化合物配方以扩展其应用范围。

关键词: 核辐射; 防辐射材料; 稀土氧化物; 聚氨酯; 分子动力学模拟

Study of Radiation-Shielding Thermoplastic Polyurethane Composites

Tan,Hai Zhai,Hongjie Zhu,Hongyan Hua,Feixue

School of Computer Science, Nanjing Audit University, Nanjing, Jiangsu, 211800, China

Abstract: This study explores rare earth oxide-reinforced thermoplastic polyurethane (TPU) composites via molecular dynamics simulations. Using Materials Studio, simulations revealed that optimized rare earth oxide addition enhances tensile strength, hardness, and radiation resistance. The lightweight, high-efficiency shielding, and recyclable TPU composites offer a promising solution for radiation protection. Future work may focus on novel rare earth formulations.

Keywords: Nuclear radiation; Radiation-Shielding materials; Rare earth oxides; Polyurethane; Molecular dynamics simulation

DOI: 10.62639/sspis37.20250204

引言

为了有效防护核辐射对人体的危害, 人们开发了各种防辐射材料。传统防护材料如铅板、含硼聚乙烯及混凝土等存在重量大、柔韧性差或耐久性不足等缺陷, 难以满足现代辐射防护装备对轻量化、柔性化和多功能化的需求。因此研究新型防辐射材料具有重要意义。其中聚氨酯复合材料可以提高金属屏蔽填料的负载率, 改善材料的力学性能、耐老化性能和穿着舒适度^[1]。稀土氧化物作为一种重要的增强剂, 可以有效提高材料的防辐射性能。本研究旨在通过分子动力学模拟, 研究稀土 / 热塑性聚氨酯复合材料在不同氧化物掺杂下的辐射防护效能分析, 并为进一步优化材料设计提供参考。

一、聚氨酯基体性能分析

(一) 结构组成

热塑性聚氨酯由软段域和硬段域交替构成, 其中软段为柔性长链聚醚 / 聚酯多元醇, 硬段则由二异氰酸酯与扩链剂通过逐步聚合形成。该材料通过预聚 - 扩链两步法制备, 即异氰酸

酯与多元醇首先生成预聚体, 随后与扩链剂发生硫化反应交联固化。

(二) 力学性能

聚氨酯的拉伸强度以及弹性比较高, 相较于传统橡胶材料, 热塑性聚氨酯展现出更优异的综合力学性能: 其拉伸强度与弹性模量显著提升, 硬度范围 (邵氏 A 60-95) 覆盖更广。在中等硬度区间, 材料同时兼具高强度、高定伸应力及优异的抗撕裂性能。TPU 的耐磨耗性能尤为突出, 经测试其耐磨系数较天然橡胶提升约 900%。稀土元素的引入可显著调控聚合物基体的微观结构与界面作用, 从而对其宏观性能产生积极影响。稀土化合物制成超微粉, 将其用在高分子材料及聚氨酯中, 有望提高或改进某些力学性能^[2]。

(三) 耐辐射性能

聚氨酯作为一种重要的工程塑料, 在防辐射领域具有良好的性能表现^[3]。聚氨酯的分子结构包含了软段和硬段两个部分, 由长链多元醇构成软段, 硬段则由异氰酸酯和扩链剂组成, 其复杂的结构赋予了聚氨酯优异的机械性能和耐化学性能, 使其能够在各种恶劣环境下保持稳定的性能表现。在高能射线的辐射环境下,

(稿件编号: IS-25-4-77001)

作者简介: 谭海 (1977-), 男, 湖南隆回人, 教授, 博士, 主要研究方向为人工智能。

翟虹杰 (2002-), 男, 贵州毕节人, 在读本科, 主要研究方向为材料性能的计算机模拟与数据分析。

朱洪艳 (2004-), 女, 四川攀枝花人, 在读本科, 主要研究方向为实验数据的经济性分析及产业化评估。

华菲雪 (2004-), 女, 江苏宿迁人, 在读本科, 主要研究方向为材料生命周期成本核算研究。

基金项目: 江苏省大学生创新创业训练计划项目资助: “核 (和) 我审——核辐射智能检测审计系统提出者” (项目编号: 202211287122E)。

聚氨酯能够有效吸收和分散辐射能量,从而减缓辐射对其结构和性能的影响。其分子内部的键结构能够有效地阻止辐射能量的传递,降低辐射对分子的直接损伤,从而保持了材料的稳定性和可靠性。此外,聚氨酯具有良好的耐热性和耐磨性,在辐射环境中,聚氨酯能够保持其原有的力学性能和化学稳定性,不易发生退化或降解,从而确保了设备和结构的长期可靠运行。

二、稀土氧化物复合

(一) 稀土氧化物防辐射性能

稀土氧化物在防辐射复合材料中具有重要意义,其优异的防辐射性能使得其成为一种具有独特潜力的材料^[4]。稀土氧化物的防辐射性能主要源于其特殊的电子结构和化学性质。稀土元素具有丰富的电子能级和复杂的能带结构。特殊的电子结构赋予了稀土氧化物良好的吸收和散射辐射能力,使其能够有效地吸收高能射线,从而保护材料和设备免受辐射的侵害。稀土氧化物高原子序数和密度使稀土氧化物能够有效地吸收和散射辐射粒子,从而减少辐射对材料的穿透和侵害。稀土氧化物具有良好的化学稳定性和耐热性,可以在高能辐射环境中保持着较稳定的化学性质和结构完整性。

(二) 稀土化合物改进聚氨酯材料的力学性能

通过将稀土化合物引入聚氨酯基体^[5]中,可以改善聚氨酯的力学性能,提高其强度、硬度、耐磨性和耐老化性等方面的性能,从而扩展其在不同领域的应用范围。常见的方法有将稀土化合物作为填料添加到聚氨酯基体中。这些填料可以是稀土氧化物、稀土纳米颗粒或其他稀土化合物。稀土化合物具有高密度和较大的原子序数,可以有效地增加复合材料的质量,并提高其对辐射的屏蔽能力。稀土化合物的独特结构和化学性质还可以与聚氨酯基体相互作用,改善复合材料的力学性能。通过在聚氨酯基体中引入稀土化合物,可以形成一种强化网络结构,有效地防止材料的屈服和断裂,从而提高其拉伸强度和硬度。稀土化合物的高硬度和化学稳定性可以有效地抵抗外部环境的侵蚀和磨损,延长复合材料的使用寿命。稀土/TPU复合材料在实现高屏蔽的同时能有效降低材料的质量。选用 TPU 作为基体,能够提高复合材料的防辐射 M 值和 P 值。复合材料可以加工回收且防辐射性能不改变,是一种绿色的辐射防护材料^[6]。

三、分子动力学实验分析

TPU 复合材料在防辐射领域具有广泛的应用前景,为了更好地理解 TPU 防辐射性能并进一步优化材料设计,利用计算模拟方法,通过模拟稀土/热塑性聚氨酯复合材料的分子结构

及其相互作用,来研究材料的防辐射性能。通过模拟稀土元素与聚氨酯基体之间的键合、扩散和交换过程,可以揭示稀土元素在复合材料中的分布规律、稳定性和对材料性能的影响。通过模拟材料在受力和辐射条件下的响应行为,可以预测材料的拉伸、弯曲、抗压等力学性能,并评估其在不同辐射剂量下的稳定性和耐久性。

(一) 模拟方法与模型构建

运用 Materials Studio 平台,实施几何结构优化、物性预测及 X 射线衍射谱图模拟,结合分子动力学模拟与密度泛函理论计算,开展多尺度耦合研究。通过建立 3D 分子模型,深入模拟分析有机、无机材料以及聚合物。

(二) 分子模型建立

乙二醇(图 1)与二苯基甲烷二异氰酸酯

(图 2)在一定条件下反应生成

, 和乙二醇继续反应生成

,

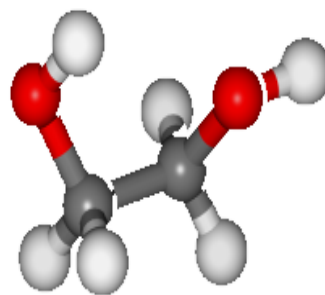
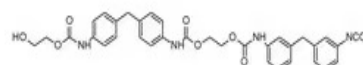


图 1 乙二醇

与 反应生成



, 经过一系列反应, 最终生成

(图 3)。

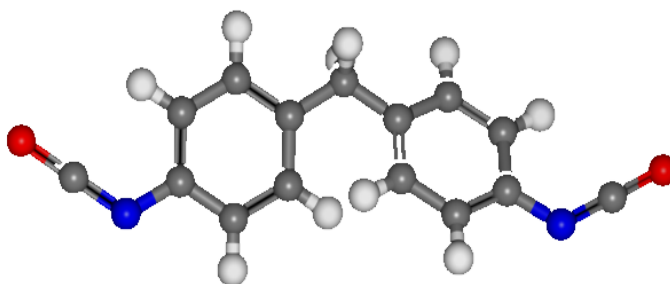


图 2 二苯基甲烷二异氰酸酯

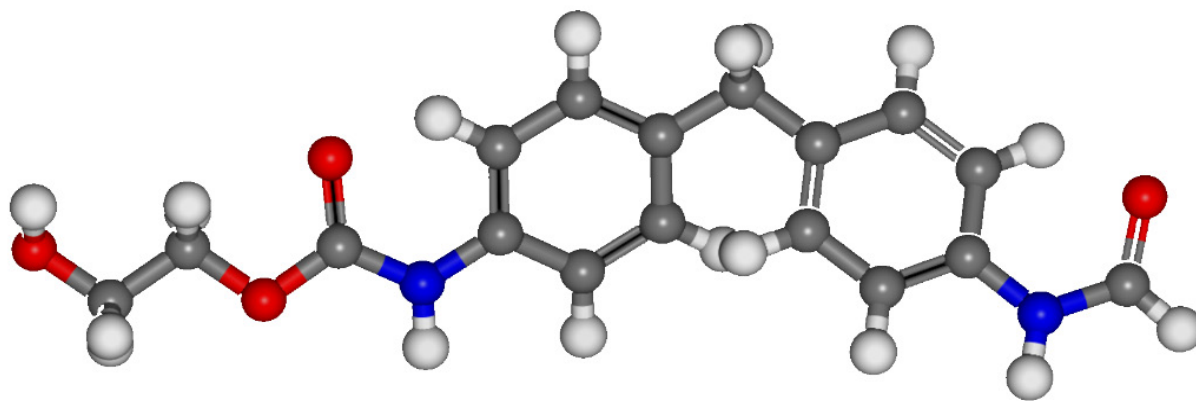


图 3 聚氨酯

(三) 不同氧化物添加下的防辐射性能

采用热塑性聚氨酯作为基体材料, 并添加不同质量百分比的氧化镧、氧化钇和氧化铽等稀土氧化物作为增强剂。使用 Materials Studio 软件进行分子动力学模拟。首先构建稀土 / 聚氨酯复合材料的分子结构模型, 然后模拟材料在外界核辐射条件下的行为, 包括结构变化、力学性能和辐射吸收能力。模拟过程包括对纯聚氨酯材料和添加不同氧化物后的复合材料进行力学性能和辐射吸收性能的模拟分析计算得到材料的拉伸强度、断裂伸长率、硬度等力学性能参数, 并评估其在不同核辐射条件下的防护效果。模拟结果显示, 添加稀土氧化物后, 材料的结构发生了显著变化。例如, Sm_2O_3 是一种射线的有效屏蔽物质。添加 Sm_2O_3 后是的是复合材料防辐射性能优于传统 TPU 材料^[7]。稀土氧化物颗粒的分散状态和尺寸影响了材料的微观结构, 添加稀土氧化物可以提高材料的力学强度和硬度, 使其具有更好的耐辐射性能。适量的氧化物添加可以改善材料的抗拉伸能力和断裂伸长率, 增强其耐辐射能力。同时, 采用硬脂酸预先包裹稀土填料的方式, 可以改善其在基体热塑性氨酯中的分散性, 达到提高复合材料拉伸强度的目的, 提高了材料的使用价值^[8]。模拟结果表明, 添加稀土氧化物后材料的辐射吸收能力显著增强, 稀土元素的高原子序数和密度使其能够有效吸收核辐射, 降低辐射对人体的危害^[9]。

四、结论与展望

本研究通过分子动力学模拟, 系统考察了不同稀土氧化物 (REO) 添加量对 TPU 复合材料辐射屏蔽效能的影响机制。实验结果表明, 当稀土氧化物添加量处于优化区间时, 可以显著提高材料的结构稳定性、力学性能和辐射吸收能力。未来的研究可以进一步优化材料配方, 探索新型稀土化合物对防辐射性能的影响, 开发生物基聚氨酯^[10]或稀土回收技术^[11], 推动辐射防护材料的绿色化转型, 提高防护效果和拓展复合新型复

合材料在深空探测、核医学等新兴领域的应用。

参考文献:

- [1] 姜志国, 姚明, 蒋国昌. 具有屏蔽辐射功能的复合面料结构: CN216001676U[P]. 2022-03-11.
- [2] 李汾. 稀土 / 聚氨酯复合材料的研究进展 [J]. 精细与专用化学, 2016, 24(08): 31-35. DOI:10.19482/j.cn11-3237.2016.08.018.
- [3] Assagra Y A O, Altafim R A P, Silva J F R, et al. Laminated composite based on polyester geotextile fibers and polyurethane resin for coating wood structures[J]. Materials Research, 2013, 16: 1140-1147.
- [4] Park S J, Cho K S. Filler-elastomer interactions. 8. Influence of fluorinated nanoscaled silicas on mechanical interfacial properties and thermal stabilities of polyurethane matrix composites[J]. Polymer (Korea), 2003, 27(2): 91-97
- [5] Cui T, Wang F, Bing L, et al. Monte Carlo simulation and optimization of neutron ray shielding performance of related materials[J]. Nuclear Engineering and Technology, 2024, 56(9): 3545-3552.
- [6] 吴小飞. 新型热塑性防辐射材料的研究和防高能辐射的树脂 / 稀土氧化物复合材料的制备及研究 [D]. 北京化工大学, 2007.
- [7] 刘力, 吴小飞, 范丽, 等. 氧化钐 / 热塑性聚氨酯复合材料的防辐射性能及流变性能 [J]. 合成橡胶工业, 2008, (01): 54-57.
- [8] 原小路, 胡水, 张法忠, 等. 硬脂酸表面包覆对热塑性聚氨酯基体稀土防辐射材料性能的影响 [J]. 塑料工业, 2010, 38(06): 52-55.
- [9] Koeppenkastrup D. Thermodynamic and kinetic studies on the interaction of rare earth elements with metal oxides[M]. University of Hawai'i at Manoa, 1992.
- [10] Li X X, Sohn M H, Cho U R. Changes in the Properties of Bio-Based Thermoplastic Polyurethanes with Different Chain Extenders[J]. 2019, 43(4): 621-628.
- [11] Sarfo P. Recovery of rare earth elements by advanced processing technologies[M]. Montana Tech of The University of Montana, 2019.