



## Thermal Residual Stress Analysis of CNTs Reinforced Polymer Using a Cyclic Symmetry Semi-Continuum Model

### ARTICLE INFO

#### Article Type

Original Research

#### Authors

Abbasi A.<sup>1</sup> MSc,

Mondali M.<sup>\*2</sup> PhD

#### How to cite this article

Abbasi A, Mondali M. Thermal Residual Stress Analysis of CNTs Reinforced Polymer Using a Cyclic Symmetry Semi-Continuum Model. Modares Mechanical Engineering, 2020;20(4):1041-1052.

<sup>1</sup>Aerospace Engineering Department, Engineering Faculty, Science & Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

#### \*Correspondence

Address: Aerospace Engineering Department, Engineering Faculty, Science & Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Phone: -

Fax: -

mondali@srbiau.ac.ir

#### Article History

Received: September 09, 2018

Accepted: September 03, 2019

ePublished: April 17, 2020

### ABSTRACT

In this research, the thermo-mechanical behavior of SWCNTs reinforced polymer has been characterized using an analytical method based on semi-continuum modeling. For this reason, a representative volume element of CNT reinforced polymer with cyclic symmetry boundary condition is used while the nanotube reinforcement is modeled in nanoscale and its surrounding polymer is considered as a continuum environment. Applying the cyclic symmetry boundary conditions in the problem-solving procedure causes satisfactory agreement between the results of the analytical method and the actual conditions. The interphase between the nanotube and polymer is also modeled using the cohesive stresses and the mechanical properties extracted from the Vander-Waals forces between the atoms of nanotube and polymer. In general, the thermal residual stresses in polymer/CNT nanocomposites can occur due to the significant differences between the thermal expansion coefficient of polymer and CNT. In the present paper, the semi-continuum modeling has been firstly explained and then the role of some effective parameters such as volume fraction, aspect ratio, and temperature change on the residual thermal stresses has been studied. Although, based on some available researches in macro scale, it seems that adding the CNTs to polymer leads to decreasing the thermal expansion of nanocomposite and consequently decreasing its thermal residual stresses. However, the results of this paper show that by inappropriate selection of some parameters such as the volume fraction and aspect ratio of nanotubes and also the temperature change, the residual thermal stresses increase between the polymer and nanotube which it can weaken the material strength.

**Keywords** Carbon-Nanotube; Thermal Residual Stress; Semi-Continuum Model; Cyclic Symmetry Boundary Condition

### CITATION LINKS

[1] Theoretical analysis on the pullout behavior of carbon nanotube at cryogenic environment with the consideration of thermal residual stress [2] High volume fraction carbon nanotube composites for aerospace applications [3] Thermal expansion of single wall carbon nanotubes [4] Prediction of thermal expansion properties of carbon nanotubes using molecular dynamics simulations [5] Equivalent continuum modeling of nanostructured materials [6] Multiscale analysis of fracture of carbon nanotubes embedded in composites [7] Micromechanical modeling of effective elastic properties of hybrid nanocomposites reinforced by fuzzy fiber containing carbon nanotubes [8] Multi-scale numerical simulations of thermal expansion properties of CNT-reinforced nanocomposites [9] Multi-scale modeling of tensile behavior of carbon nanotube-reinforced composites [10] Multiscale modeling of compressive behavior of carbon nanotube/polymer composites [11] Analysis and calculation of residual stress in carbon nanotube reinforced magnesium matrix composites [12] Reduction of thermal residual stresses of laminated polymer composites by addition of carbon nanotubes [13] Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties [14] A cohesive law for carbon nanotube/polymer interfaces based on the van der Waals force [15] Interface modeling of nanotube reinforced nanocomposites by using multi-scale modeling method [16] Elasticity in engineering mechanics [17] Theory of elasticity [18] On the mechanical properties of chiral carbon nanotubes [19] Mechanical modeling of carbon nanomaterials from nanotubes to buckypaper [20] Distribution of residual stresses in polymer reinforced carbon nanotubes and laminated carbon fibers

## تحلیل تنش‌های پسماند حرارتی پلیمر تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی با استفاده از یک مدل نیمه‌پیوسته متقارن چرخه‌ای

علی عباسی MSc

گروه مهندسی هوافضا، دانشکده فنی و مهندسی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

مهدی مندعلی\* PhD

گروه مهندسی هوافضا، دانشکده فنی و مهندسی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

### چکیده

در این پژوهش رفتار مکانیکی- حرارتی پلیمرهای تقویت‌شده با نانولوله کربنی ساده با استفاده از یک روش تحلیلی مبتنی بر مدل‌سازی مکانیک نیمه‌پیوسته مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور یک المان حجمی نماینده از پلیمر تقویت‌شده با نانولوله استوانه‌ای شکل با تقارن چرخه‌ای استفاده می‌شود که در آن تقویت‌کننده نانولوله در مقیاس نانو و پلیمر اطرافش به صورت محیط پیوسته مدل شده‌اند. وارد نمودن شرایط متقارن چرخه‌ای در فرآیند حل مساله سبب هماهنگی هرچه بیشتر نتایج تحلیلی با شرایط واقعی می‌شود. فاز میانی بین نانولوله و پلیمر نیز با تنش‌های بین سطحی و خواص مکانیکی برگرفته از اثر نیروهای واندروالسی موثر بین اتم‌های نانولوله و پلیمر مدل‌سازی می‌شود. به طور کلی تنش‌های پسماند حرارتی در نانوکامپوزیت‌های پلیمری به دلیل اختلاف قابل توجه بین ضریب انبساط پلیمر و نانولوله به وجود می‌آید. در مقاله حاضر ابتدا مدل‌سازی نیمه‌پیوسته توضیح داده شده است و سپس نقش برخی پارامترهای موثر بر تنش‌های پسماند حرارتی نظیر نسبت حجمی، نسبت منظری و دما مورد مطالعه قرار گرفته است. اگرچه بر اساس برخی از تحقیقات موجود در مقیاس ماکرو به نظر می‌رسد که افزودن نانولوله‌ها به پلیمر سبب کاهش ضریب انبساط نانوکامپوزیت و در نتیجه کاهش تنش‌های پسماند حرارتی آن خواهد بود، لکن نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که با انتخاب نامناسب برخی پارامترها نظیر نسبت حجمی و منظری نانولوله و نیز تغییر دما، تنش‌های پسماند حرارتی بین نانولوله و پلیمر زیاد می‌شود که این امر می‌تواند باعث تضعیف استحکام نهایی ماده پلیمری شود.

**کلیدواژه‌ها:** نانولوله کربنی، تنش پسماند حرارتی، مدل نیمه‌پیوسته، شرط مرزی متقارن چرخه‌ای

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۶/۱۸

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۰۶/۱۲

\*نویسنده مسئول: mondali@srbiau.ac.ir

### ۱- مقدمه

ماتریس‌های پلیمری تقویت‌شده با نانوذرات دارای خواص مکانیکی و حرارتی قابل توجهی هستند که آنها را تبدیل به یک بخش ضروری از مواد مهندسی موجود می‌کند. از آنجا که تقریباً تمام کامپوزیت‌های ماتریس پلیمری ممکن است در محدوده‌های مختلفی از دما استفاده شوند، بررسی خواص حرارتی آنها به صورت تابعی از دما برای شناخت رفتار این مواد اجتناب‌ناپذیر است. امروزه استفاده از نانولوله‌های کربنی و نانوالیاف‌ها در کامپوزیت‌های پلیمری افزایش چشمگیری یافته است، زیرا این

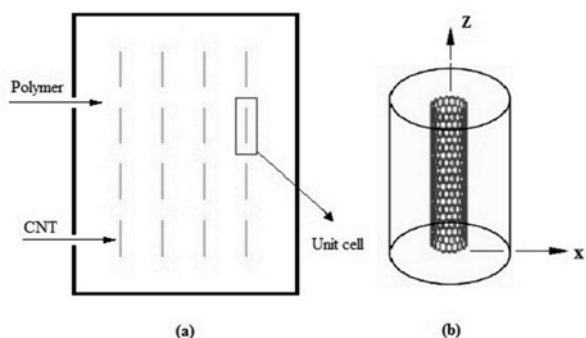
مواد به دلیل استحکام خوب، نسبت سفتی به وزن بالا، چگالی کم و رفتار حرارتی یا الکتریکی مطلوب در بسیاری از اجزای سازه‌ای هوابیما، خودرو، وسایل دریایی و دیگر صنایع معرفی شده‌اند. برای مثال برخی از مخازن سوخت کرایزنیک برای تحمل توأم بارهای حرارتی و مکانیکی به‌عنوان بخشی از سازه در وسایل نقلیه هوافضایی قابل استفاده مجدد طراحی شده‌اند. بر اساس گزارش‌های فنی منتشرشده توسط بسیاری از محققان، امروزه استفاده از نانولوله‌های کربنی در کامپوزیت‌های پلیمری در صنعت هوافضا، یک راه حل مهم برای صرفه‌جویی در وزن سازه‌ها همگام با افزایش استحکام ویژه آنها است [1,2].

مطالعه در مورد ضریب انبساط حرارتی (CTE) نانولوله‌ها به دلیل چالش در آزمایش‌ها و مدل‌سازی مقیاس نانو بسیار محدود است. جیاتنگ و همکاران، یک روش تحلیلی برای تعیین ضریب انبساط حرارتی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره بر اساس پتانسیل بین اتمی و مدل هارمونیک محلی ارائه کرده‌اند. مطابق این تحقیقات ضریب انبساط‌های نانولوله‌های کربنی در دمای پایین و دمای اتاق منفی، اما در درجه حرارت‌های بالا مثبت است. مادامی که قطر نانولوله‌ها کاهش می‌یابد، محدوده ضریب انبساط منفی نیز کاهش می‌یابد [3]. پیش‌بینی‌های دینامیک مولکولی نیز در تایید این مساله همچنین نشان می‌دهد که ضریب انبساط‌های محوری نانولوله‌های کربنی در محدوده گسترده‌ای از دماهای پایین، منفی بوده و به صورت غیرخطی با درجه حرارت تغییر می‌کنند که این ضرایب انبساط محوری ممکن است با افزایش دما مثبت شوند [4]. در نانوکامپوزیت‌ها، معمولاً انبساط ماتریس توسط سفتی بالا و ضریب انبساط کم نانولوله‌های کربنی محدود می‌شود. لذا ضریب انبساط کامپوزیت می‌تواند به‌طور قابل توجهی با افزودن نانولوله کربنی به یک ماتریس پلیمری که پیوند میان‌سطحی خوبی بین آنها باشد، کاهش یابد. با این حال، خواص این کامپوزیت‌ها به دلیل توزیع نامناسب نانولوله‌ها و اتصال ضعیف میان‌سطحی، آن‌طور که انتظار می‌رود، نخواهد بود. همچنین تنش‌های حرارتی به دلیل عدم تطابق در ضریب انبساط حرارتی نانوپرکننده‌ها و ماتریس پلیمری به‌وجود می‌آیند که این تنش‌ها می‌تواند بسیار بزرگ بوده و (اگر تا حد استحکام شکست ماتریس یا بالاتر از آن پیش رود) در نهایت باعث آسیب جدی در سازه مورد استفاده شود. به‌طور کلی برای تحلیل و مدل‌سازی مساله حاضر می‌توان از رویکردهای چندمقیاسی که ترکیب روش‌های اتمی با روش‌های مکانیک محیط پیوسته است، استفاده نمود. با بررسی پژوهش‌های موجود نظیر /ودگارد و همکاران [5]، فنگ و همکاران [6] و حسن‌زاده و همکاران [7]، روشن است که همچنان توسعه روش‌های انعطاف‌پذیر چندمقیاسی، به‌خصوص در تجزیه و تحلیل توزیع تنش‌های حرارتی در این مواد جدید نیاز است. //موسی و همکاران، خواص انبساط حرارتی نانوکامپوزیت تقویت‌شده با نانولوله کربنی با محتوای ۱ تا ۱۵ درصد وزنی را با استفاده از روش عددی چندمقیاسی روی دو نوع از مدل‌های

وقت‌گیری بودن، نانولوله به واسطه دینامیک مولکولی دقیقاً مدل‌سازی نمی‌شود، بلکه مکانیک سازه‌ای استاتیک مساله را شبیه‌سازی می‌کند. یک نانولوله کربنی تک‌دیواره به‌عنوان قاب فضایی در نظر گرفته می‌شود که پیوندهای کووالانسی و اتم‌ها به‌عنوان تیرها و گره‌های اتصالی هستند (شکل ۱). بر اساس معادل‌سازی انرژی پتانسیل مولکولی و انرژی سازه‌ای، پارامترهای ساختاری مورد نیاز برای تجزیه و تحلیل معین می‌شوند. به‌عنوان مثال:

$$\frac{EA}{L}\bigg|_b = k_r, \frac{EI}{L}\bigg|_b = k_\theta, \frac{GJ}{L}\bigg|_b = k_\phi \quad (1)$$

که در این رابطه پارامترهای  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\phi$  ثابت‌هایی در مکانیک مولکولی هستند که در بسیاری از منابع [13] ذکر شده است. پارامترهای  $E_b$ ،  $A_b$ ،  $L_b$ ،  $I_b$  و  $GJ_b$  به‌ترتیب نشان‌دهنده مدول الاستیک، سطح مقطع عرضی، طول، سختی خمشی و سختی پیچشی پیوندهای کربنی شبیه‌سازی‌شده، هستند. همچنین در مورد ضریب انبساط حرارتی پیوندهای کربنی و نانولوله‌های کربنی نتایج تحقیق جیانگ و همکاران [3] مورد استفاده قرار می‌گیرد که به‌طور مستقیم از پتانسیل بین اتمی و مدل هارمونیک محلی و حداقل‌سازی انرژی هلمهولتز به‌دست می‌آید.



شکل ۱) مدل نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با نانولوله کربنی؛ آرایش منظم از نانولوله‌ها (a) و المان حجمی نماینده با نانولوله بلند و سازه مولکولی (b)

## ۲-۲- مدل‌سازی ناحیه اتصالی نانولوله و ماتریس پلیمری

در سطح میانی با پیوند کامل، سازگاری کرنش‌ها به‌گونه‌ای فرض می‌شود که کرنش برای هر دو فاز نانولوله کربن و ماتریس پلیمری در ناحیه اتصال کاملاً مشابه باشند؛ اما در اتصال شیمیایی غیرکامل، مکانیزم انتقال تنش پیچیده‌تر است. در اینجا نمی‌توان پیوند کامل را تقریب زد؛ زیرا اتصال بین صفحه‌ای غیرپیوندی عموماً ضعیف‌تر از اتصال کاملاً پیوندی است. برای این نوع اتصال سطح میانی (در اینجا در روش تحلیلی)، سطح میانی همراه با تنش‌های بین سطحی تحت تاثیر تعامل وندروالسی استفاده شده است [14]، اما در روش اجزاء محدود، فاز میانی با خواص سازه‌ای برگرفته از تعاملات وندروالسی ایجاد شده است [15].

## ۲-۳- مدل‌سازی ماتریس پلیمری

در تعیین تنش‌ها همراه با تاثیر عواملی مانند تعامل وندروالسی موجود در یک اتصال غیرکامل، اغلب استفاده از مختصات قطبی

ساختاری میکرو، یکی تک‌جهته و دیگری مدل چندجهته مورد بررسی قرار دادند [8]. سرپس و همکاران، یک المان حجمی نماینده چندمقیاسی را برای مدل‌سازی رفتار کششی کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله کربنی پیشنهاد کردند [9]. لی و چو، یک مدل‌سازی چندمقیاسی از رفتار فشاری کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله کربنی و همچنین محاسبه تغییر نیروی کمانشی با توجه به قطر و طول نانولوله انجام داده‌اند [10]. تنش‌های پسماند حرارتی در کامپوزیت‌های ماتریس فلزی تقویت‌شده توسط نانولوله کربنی نیز در برخی مقالات مانند پژوهش لی و همکاران [11]، مورد مطالعه قرار گرفته است. در آثار اخیر، شکریه و همکاران [12]، نشان دادند که اضافه‌کردن مقادیر کمی از نانولوله‌های کربنی چندجداره منجر به کاهش قابل توجهی در مولفه‌های تنش حرارتی پسماند در هر دو سطح میکرو و ماکرو از کامپوزیت‌های چندلایه می‌شود.

مطالعه تحقیقات مذکور نشان می‌دهد که اگرچه افزودن نانولوله‌ها می‌تواند باعث افزایش پایداری و خواص حرارتی نانوکامپوزیت‌ها شود، لیکن درک بهتر رفتار مکانیکی آنها در محیط‌های با دمای بالا همچنان مورد نیاز است.

یکی از روش‌هایی که اخیراً برای تحلیل این نانوکامپوزیت‌ها فراگیر شده است، روش مدل‌سازی نیمه‌پیوسته است. در این نوع مدل‌سازی تقویت‌کننده‌ها به‌صورت شبکه اتمی در نظر گرفته شده و زمینه به‌صورت محیط پیوسته است. همچنین بارگذاری‌های مختلفی در این زمینه تاکنون در مدل‌های مذکور مورد بررسی قرار گرفته‌اند، اما بارگذاری حرارتی منجر به بروز تنش‌های پسماند همراه با دیدگاه میکرومکانیک نیمه‌پیوسته بسیار کم مورد توجه قرار گرفته است. لذا هدف از این مقاله ارایه یک مدل نیمه‌پیوسته با شرایط مرزی متقارن چرخه‌ای جهت تحلیل تنش‌های پسماند حرارتی پلیمر تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی است. همان‌طور که ذکر شد، در این مدل ساختار مولکولی نانولوله در مقیاس نانو مدل‌شده و پلیمر اطرافش به‌صورت محیط پیوسته است و بین آنها سطح تماس میانی با تنش‌های بین سطحی و خواص مکانیکی برگرفته از اثر نیروهای وندروالسی موثر بین اتم‌های نانولوله و ذرات پلیمر قرار دارد. همچنین اثر برخی پارامترهای تاثیرگذار نظیر نسبت حجمی، نسبت منطری، دما و نوع نانولوله نیز بر تنش‌های پسماند حرارتی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

## ۲- مدل‌سازی نانوکامپوزیت

در این پژوهش، یک المان حجمی نماینده شامل ماتریس پلیمری استوانه‌ای تقویت‌شده توسط نانولوله کربنی تک‌جداره بدون کفی انتهایی که در مرکز المان حجمی قرار دارد، در نظر گرفته می‌شود. مدل المان حجمی نماینده با طول بلند همچون یک سلول واحد است که در شکل ۱ نشان داده شده است.

## ۲-۱- مدل‌سازی نانولوله کربن

در مدل‌سازی چندمقیاسی برای محاسبه تنش، به‌دلیل

جایگزینی معادلات (۴) و (۵) در معادلات (۲) و (۳) این روابط دیفرانسیلی را به دست می‌دهد:

$$\nabla^2 u - \frac{u}{r^2} + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial r} - \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \frac{\partial(\alpha T)}{\partial r} = 0 \quad (6)$$

$$\nabla^2 w + \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial e}{\partial z} - \frac{2(1+\nu)}{1-2\nu} \frac{\partial(\alpha T)}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

که در این روابط  $\nabla^2 = \partial^2/\partial r^2 + 1/r \cdot \partial/\partial r + \partial^2/\partial z^2$  و  $e = \epsilon_r + \epsilon_\theta + \epsilon_z$  یک جواب خصوصی برای این معادلات همان‌طور که در مرجع [16] ذکر شده، به این صورت است:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad w = \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad e = \nabla^2 \psi, \quad \psi = \psi(r, z) \quad (8)$$

بر این اساس برای یک دمای مشخص شده داریم:

$$\nabla^2 \psi = \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot \alpha T \quad (9)$$

از روابط (۴)، (۵) و (۸) اجزاء تنش مربوط به حل خصوصی به دست می‌آید:

$$\begin{cases} \sigma'_r = 2G \left[ -\nabla^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right] \\ \sigma'_\theta = 2G \left[ -\nabla^2 \psi + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right] \\ \sigma'_z = 2G \left[ -\nabla^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] \\ \tau'_{rz} = 2G \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial z} \right] \end{cases} \quad (10)$$

پاسخ تکمیلی حل این معادلات برحسب تابع تنش لاو (۱۰) همان‌طور که در مرجع [17] ذکر شده، به شکل زیر است:

$$\begin{cases} \sigma''_r = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \vartheta \nabla^2 \varphi - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} \right] \\ \sigma''_\theta = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \vartheta \nabla^2 \varphi - \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right] \\ \sigma''_z = \frac{\partial}{\partial z} \left[ (2 - \vartheta) \cdot \nabla^2 \varphi - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right] \\ \tau''_{rz} = \frac{\partial}{\partial r} \left[ (1 - \vartheta) \cdot \nabla^2 \varphi - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right] \end{cases} \quad (11)$$

در صورتی که تابع تنش  $\varphi$  در معادله  $\nabla^2 \nabla^2 \varphi = 0$  صدق نماید. حل عمومی مساله تنش حرارتی متقارن محوری از جمع کردن پاسخ در معادلات (۱۰) و (۱۱) مذکور به دست می‌آید. حال در این پژوهش با توجه به شرایط فوق، توابع تنش مناسب به‌عنوان  $\varphi$  و  $\psi$  به‌صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\Psi(r, z) = \left( \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot \alpha \right) \cdot \left( \int \frac{r T(r) dr}{r} \right) - \frac{1}{4} b_1 r^2 + b_2 \ln(r) + \frac{1}{2} b_1 z^2 \quad (12)$$

$$\varphi(r, z) = a_1 \cdot \left( -\frac{1}{64} r^4 + \frac{1}{24} z^4 \right) + a_2 \cdot \left( \frac{1}{2} r^2 \ln(r) - \frac{1}{4} r^2 \right) + \frac{1}{6} a_5 \cdot z^3 \quad (13)$$

با فرض دمای ثابت پایدار و با استفاده از این توابع تنش و حل معادلات (۱۰) و (۱۱) این نتایج برای تنش‌ها به دست می‌آید:

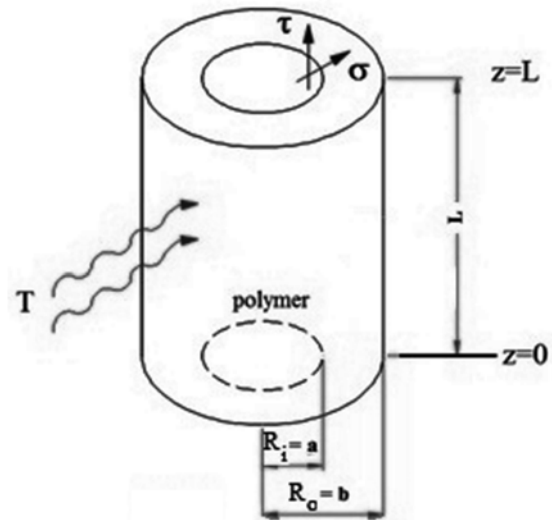
$$\sigma_r = \nu \cdot z \cdot a_1 + \nu \cdot a_5 - G \cdot b_1 - \frac{2G \cdot b_2}{r^2} - \frac{2G \cdot (1+\nu) \cdot \alpha \cdot \left( \int r T dr \right)}{r^2 \cdot (1-\nu)} \quad (14)$$

$$\sigma_\theta = \nu \cdot z \cdot a_1 + \nu \cdot a_5 - G \cdot b_1 + \frac{2G \cdot b_2}{r^2} - \frac{2G \cdot (1+\nu) \cdot \alpha \cdot T}{(1-\nu)} + \frac{2G \cdot (1+\nu) \cdot \alpha \cdot \left( \int r T dr \right)}{r^2 \cdot (1-\nu)} \quad (15)$$

$$\sigma_z = (1 - \nu) \cdot z \cdot a_1 + (1 - \nu) \cdot a_5 + 2G \cdot b_1 - \frac{2G \cdot (1+\nu) \cdot \alpha \cdot T}{(1-\nu)} \quad (16)$$

$$\tau_{rz} = \frac{1}{2} (\nu - 1) \cdot r \cdot a_1 + \frac{2(1-\nu) \cdot a_2}{r} \quad (17)$$

راحت‌تر است. لذا مطابق شکل ۲، استوانه‌ای پلیمری به صورت توخالی با شرایط مرزی مناسب در نظر گرفته شده و مدل ریاضی بر این اساس ساخته می‌شود. آنگاه معادلات عمومی سیستم در مختصات قطبی از جسم دایره‌ای را می‌توان از اصول الاستیسیته کلاسیک استخراج نمود.



شکل ۲) المان شماییک استوانه پلیمری همراه ابعاد و شرایط مرزی در ناحیه واسط

### ۳- حل مساله و آنالیز تنش‌ها

معادلات دیفرانسیل حاکم برای حل مساله با استفاده از تعادل نیروها در سیستم مختصات قطبی سه‌بعدی  $(r, \theta, z)$  به دست می‌آید. برای این منظور از المان استوانه‌ای پلیمر مطابق شکل ۲ استفاده شده است. بنابراین، در صورت عدم وجود نیروهای حجمی، معادلات تعادل در سه جهت به دست آمده و به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d\tau_{r\theta}}{d\theta} + \frac{d\tau_{rz}}{dz} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d\tau_{\theta z}}{d\theta} + \frac{d\tau_{rz}}{dr} + \frac{d\sigma_{zz}}{dz} + \frac{\tau_{rz}}{r} = 0 \quad (3)$$

با این فرض که ماده ایزوتروپ باشد، معادلات پایه ساختاری به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$\begin{cases} \epsilon_r = \frac{1}{E} [\sigma_r - \vartheta(\sigma_\theta + \sigma_z)] + \alpha T \\ \epsilon_\theta = \frac{1}{E} [\sigma_\theta - \vartheta(\sigma_r + \sigma_z)] + \alpha T \\ \epsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_z - \vartheta(\sigma_r + \sigma_\theta)] + \alpha T \\ \gamma_{r\theta} = \frac{\tau_{r\theta}}{G}, \quad \gamma_{\theta z} = \frac{\tau_{\theta z}}{G}, \quad \gamma_{rz} = \frac{\tau_{rz}}{G} \end{cases} \quad (4)$$

که در اینجا  $T$  درجه حرارت و  $\alpha$  ضریب انبساط حرارتی هستند. در مختصات استوانه‌ای، تنش‌های متقارن محوری با این شرایط که  $\partial/\partial\theta = 0$  و  $\nu = 0$ ،  $\tau_{r\theta} = \tau_{\theta z} = 0$  لذا معادلات کرنش‌ها خلاصه شده و روابط جایجایی و کرنش به این صورت نوشته می‌شوند:

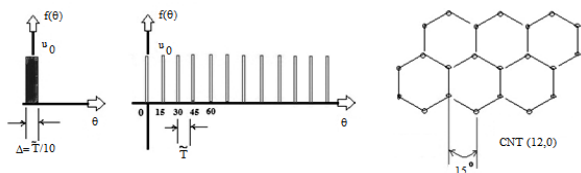
$$\epsilon_r = \frac{\partial u}{\partial r}, \quad \epsilon_\theta = \frac{u}{r}, \quad \epsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z}, \quad \gamma_{rz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \quad (5)$$

### ۳-۲- حل مساله نیمه‌پیوسته با شرایط متقارن چرخه‌ای

برای لحاظ نمودن شرایط تقارن چرخه‌ای در مدل‌های مولکولی نانولوله کربنی با استفاده از حل الاستیسیته محیط پیوسته متقارن محوری در ماتریس پلیمری، بایستی تغییر مکان‌های گسسته انبساط حرارتی با تابعی پیوسته جایگزین شود. بنابراین از بسط مثلثاتی سری نامحدود فوریه، برای تخمین یا بیان هر تابع تناوبی به وسیله تعیین مقادیر مناسبی برای ضرایب آن، استفاده می‌شود. تغییر مکان شعاعی یک نانولوله کربنی با توجه به مکان اتم‌های کربن و مارپیچیدگی (کایرالیت) به صورت یک تابع ضربه یا تابع پله باریک حول نقاط تناوب فرض می‌شود.

زاویه تناوب ( $\tilde{T}$ ) برای نانولوله کربنی ( $^{\circ}$  و  $12$ ) برابر  $15^{\circ}$  درجه یا  $\pi/12$  رادیان است که در شکل ۳ نشان داده شده است. تغییر مکان نسبی شعاعی نانولوله کربنی ناشی از حرارت که در روابط (۱۸) و (۱۹) تحت عنوان  $\tilde{u}$  در نظر گرفته شده، عبارت است از:

$$u_0 = r_{cnt} \cdot \alpha_{rad-cnt} \cdot \Delta T - R_i \cdot \alpha_p \cdot \Delta T \quad (26)$$



شکل ۳ شماتیکی از بسط سری فوریه برای تابع انبساط حرارتی در راستای شعاعی یک نانولوله زیگزاگ

در این رابطه،  $r$  شعاع اسمی نانولوله و  $R_i$  شعاع داخل استوانه پلیمری و  $\Delta T$  دمای وارده و  $\alpha$  ضریب انبساط حرارتی پلیمر یا نانولوله است. همچنین شرط بسته مربوط به تناوب محیطی نانولوله در بسط  $u(r, \theta, z) = u(r, \theta + \tilde{T}, z)$  است و ضرایب نامعلوم در بسط سری فوریه تابع برحسب متغیر زاویه  $\theta$  تعیین می‌شوند. اگر تابع  $f(\theta)$  یک تابع زوج باشد که تغییر مکان شعاعی نانولوله را نشان دهد، در حالت کلی می‌توان نوشت:

$$f(\theta) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos \frac{2n\pi}{\tilde{T}} \theta \quad (27)$$

$$a_0 = \frac{2}{\tilde{T}} \int_0^{\tilde{T}/2} f(\theta) \cdot d\theta \quad (28)$$

$$a_n = \frac{4}{\tilde{T}} \int_0^{\tilde{T}/2} f(\theta) \cos \frac{2n\pi}{\tilde{T}} \theta \cdot d\theta \quad (29)$$

اکنون فرض می‌شود که تابع ضربه  $u_0$  روی یک ناحیه بسیار باریک ( $\Delta$ ) توزیع شده باشد و  $\Delta$  به صورت کسری از دوره تناوب انتخاب می‌شود. اگر  $\tilde{T} = \pi/12$  باشد آنگاه  $\Delta = \pi/120 = \tilde{T}/10$  خواهد بود که عدد ضریب  $\lambda$  یک ضریب انتخابی بوده و در اینجا با سعی و خطا در بهینه‌ترین حالت  $\lambda = 10$  انتخاب شده است. لذا تابع  $f(\theta)$  در دامنه  $[-\tilde{T}/2\lambda, +\tilde{T}/2\lambda]$  یا همان  $[-\tilde{T}/20, +\tilde{T}/20]$  دقیقاً مقدار  $u_0$  را به خود می‌گیرد. بنابراین ثابت‌ها عبارتند از:

$$a_0 = \frac{2}{\tilde{T}} \left\{ \int_0^{\tilde{T}/2\lambda} u_0 \cdot d\theta + \int_{-\tilde{T}/2\lambda}^{\tilde{T}/2} u_0 \cdot d\theta \right\} = \frac{u_0}{\lambda} = \frac{u_0}{10} \quad (30)$$

که در اینجا  $G$  مدول برشی و  $\nu$  نسبت پواسون پلیمر و ضرایب  $a_1, a_2, a_5, b_1$  و  $b_2$  ضرایب ثابتی هستند که از شرایط مرزی در مختصات استوانه‌ای پلیمر تعیین می‌شوند.

### ۳-۱- حل مساله با شرایط مرزی بین سطحی ساده

بر اساس قانون چسبندگی سطوح میانی پلیمر و نانولوله کربنی که مستقیماً از نیروی واندروالسی توسط جیانگ و همکاران [14] به دست آمده، عبارات تحلیلی ساده‌ای شامل تنش برشی و تنش کششی چسبندگی ارائه شده که برای مطالعه تعامل مابین نانولوله و پلیمر به کار می‌رود.

$$\tau_{coh} = \frac{F_{tangent}}{L-\tilde{w}} \approx \frac{2\pi}{3} \rho_c \rho_p \tilde{\epsilon} \tilde{\sigma}^2 \left[ \frac{\tilde{\sigma}^3}{(0.858 \tilde{\sigma} + \tilde{u})^3} - \frac{\tilde{\sigma}}{15(0.858 \tilde{\sigma} + \tilde{u})^9} \right] \frac{\tilde{\sigma}}{L-\tilde{w}} \quad (18)$$

$$\sigma_{coh} = \frac{F_{normal}}{L-\tilde{w}} \approx 2\pi \rho_c \rho_p \tilde{\epsilon} \tilde{\sigma}^2 \left[ \frac{\tilde{\sigma}^4}{(0.858 \tilde{\sigma} + \tilde{u})^4} - \frac{2\tilde{\sigma}^{10}}{5(0.858 \tilde{\sigma} + \tilde{u})^{10}} \right] \quad (19)$$

در اینجا  $\rho_p$  و  $\rho_c$  به ترتیب دانسیته سطحی اتم‌های کربن روی نانولوله و دانسیته حجمی مولکول‌های پلیمر هستند. پارامتر  $\tilde{\epsilon}$  انرژی پیوند در فاصله تعادلی بین اتم‌ها است. مقدار  $\tilde{\epsilon}$  برابر  $0.004676$  الکترون‌ولت و مقدار  $\tilde{\sigma}$  برابر  $3825$  نانومتر است. متغیر  $\tilde{u}$  تغییر مکان بازشدگی نام دارد. این متغیر خارج از فاصله تعادلی بین سطوح قرار دارد (که خیلی نزدیک به مقدار  $0.858 \tilde{\sigma}$  است). متغیر  $\tilde{w}$  نیز تغییر مکان لغزشی دو سطح نسبت به هم، نام دارد؛ به عبارتی طول همپوشانی ( $L - \tilde{w}$ ) است. همچنین مقادیر تغییر مکان‌های نسبی  $\tilde{u}$  و  $\tilde{w}$  را با توجه به انبساط نانولوله و پلیمر در لایه تماسی بین آنها می‌توان محاسبه نمود. شرایط مرزی در نظر گرفته شده برای مساله اخیر به قرار زیر است:

$$\sigma_r = \sigma_{coh} \quad \text{و} \quad r = R_i \quad (20)$$

$$\tau_{rz} = \tau_{coh} \quad \text{و} \quad r = R_i \quad (21)$$

$$\sigma_r = 0 \quad \text{و} \quad r = R_o \quad (22)$$

$$\sigma_z = 0 \quad \text{و} \quad z = L \quad (23)$$

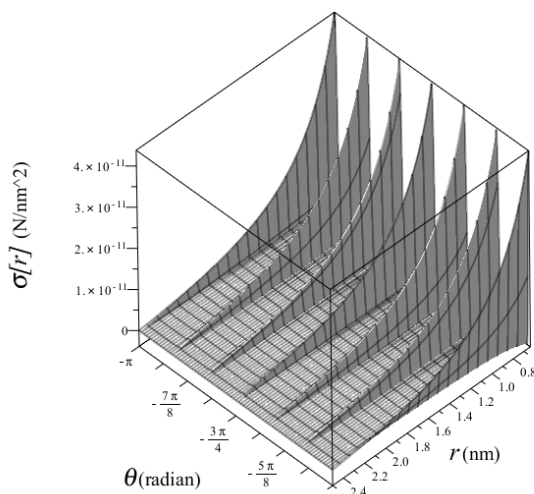
با اعمال شرایط مذکور، در معادلات (۱۶) تا (۱۷) و با استفاده از شرایط بدون تنش در سطوح بیرونی و نیز چسبندگی در سطح داخلی، ضرایب‌های ثابت موجود در پاسخ تنش‌ها مشخص شده و بنابراین تنش‌ها به این صورت به دست خواهند آمد:

$$\begin{cases} \sigma_r = -\frac{(R_o^2 - r^2) \sigma_{coh} R_i^2}{r^2 (R_i^2 - R_o^2)} \\ \sigma_\theta = \frac{(R_o^2 + r^2) \sigma_{coh} R_i^2}{r^2 (R_i^2 - R_o^2)} \\ \tau_{rz} = \frac{\tau_{coh} R_i}{r} \end{cases} \quad (24)$$

با توجه به اجزای تنش فوق، تنش معادل فون میزز (Von-Mises) نیز به این ترتیب محاسبه می‌شود:

$$\sigma_{eqv} = \frac{R_i}{r^2 (R_i^2 - R_o^2)} \left( 3\tau_{coh}^2 r^2 (R_i^2 - R_o^2)^2 + \sigma_{coh}^2 R_i^2 (R_i^2 r^4 + 3R_o^4) \right)^{0.5} \quad (25)$$

فاصله شعاعی و زاویه محیطی برای مدل با شرایط مرزی بین سطحی ساده ترسیم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، حداکثر تنش شعاعی ( $\sigma_r$ ) در سطح داخلی المان یا همان سطح بین پلیمر و نانولوله رخ می‌دهد و سپس به‌سرعت به طرف شعاع‌های بیرونی کاهش می‌یابد. تنش حلقوی یا محیطی ( $\sigma_\theta$ ) و تنش برشی ( $\tau_{rz}$ ) نیز با مقادیر متفاوت در شرایط مشابهی قرار می‌گیرند. همچنین از نمودار ۲، نتیجه گرفته می‌شود که همگی اجزاء تنش در پلیمر، در امتداد جهت زاویه‌ای دارای یک توزیع متقارن چرخه‌ای هستند. اما شرایط تقارن چرخه‌ای و ساختار مولکولی نانولوله کربنی اثرات کمتری بر مقادیر تنش‌ها در شعاع‌های بیرونی داشته و در خصوص تنش برشی نیز قابل صرف‌نظر کردن است.



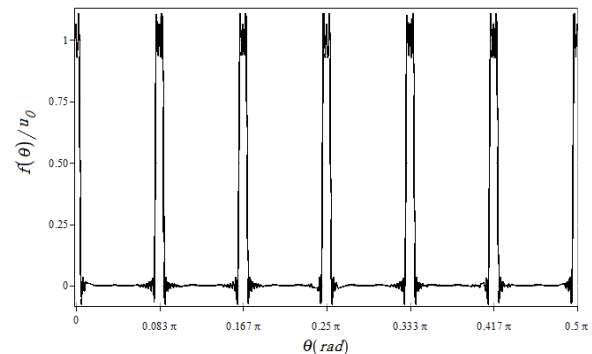
نمودار ۲) ترسیم سه‌بعدی تنش‌های پسماند حرارتی شعاعی برحسب فاصله شعاعی و زاویه محیطی

چنانکه پیشتر در بخش (۲-۳) بیان شد، با توجه به وجود تئوری فلوکه (Floquet) به منظور تولید یک تبدیل تناوبی، مساله اولیه متقارن چرخه‌ای می‌تواند به یک مساله متقارن محوری به‌وسیله بسط سری فوریه نسبت به متغیر محیطی زاویه ( $\theta$ ) تبدیل شود. اختلاف تنش‌ها در نقاط زاویه تناوب و نقاط غیرزاویه تناوب برای تنش‌های شعاعی یا محیطی به حداکثر ۱۰۰٪ هم می‌رسد؛ در حالی که برای تنش برشی این مقدار تفاوت خیلی پایین است و برای تنش معادل محاسباتی فونمیز ( $\sigma_{eqv}$ ) نیز بین ۶۰ تا ۹۰٪ به‌ترتیب در شعاع‌های خارجی و داخلی قرار می‌گیرد که در نمودارهای ۳ تا ۵، می‌توان این قضیه را ملاحظه کرد. اگرچه استفاده از استدلال تقارن چرخه‌ای به‌جای تقارن محوری کامل، حل مساله را وقت‌گیرتر می‌کند، اما منجر به سازگاری بهتر و تصدیق نتایج روش تحلیلی و نتایج روش عددی اجزاء محدود بر مدل نیمه‌پیوسته می‌شود. در حالی که تاثیرش بر نتایج پژوهشی سایر محققین در مقیاس ماکرو اصلاً دیده نمی‌شود. لازم به ذکر است که مدل‌سازی در این تحقیق در مقیاس نانو است که با

$$a_n = \frac{4}{\bar{T}} \left\{ \int_0^{\bar{T}/2\lambda} u_0 \cos \frac{2n\pi\theta}{\bar{T}} d\theta + \int_{\bar{T}/2\lambda}^{\bar{T}/2} u_0 \cos \frac{2n\pi\theta}{\bar{T}} d\theta \right\} = \frac{2u_0}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{\lambda} = \frac{2u_0}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{10} \quad (31)$$

در نهایت همان‌طور که در نمودار ۱ دیده می‌شود، بسط تابع مورد نظر به‌صورت زیر به‌دست می‌آید و جای  $\bar{u}$  در روابط قبلی استفاده می‌شود.

$$f(\theta) = \frac{u_0}{\lambda} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{2u_0}{n\pi} \right) \sin \frac{n\pi}{\lambda} \cos \frac{2n\pi\theta}{\bar{T}} = \frac{u_0}{10} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{2u_0}{n\pi} \right) \sin \left( \frac{n\pi}{10} \right) \cos(24n\theta) \quad (32)$$



نمودار ۱) تابع نرمال‌شده انبساط حرارتی در راستای شعاعی یک نانولوله با استفاده از بسط سری فوریه در زاویه  $\theta$

#### ۴-۴) ارزیابی نتایج مدل‌سازی تحلیلی و اعتبارسنجی

نتایج مدل‌سازی تحلیلی جهت بررسی تاثیر شرایط مرزی، اعتبارسنجی با نتایج المان محدود و نیز بررسی تاثیر پارامترهای هندسی در این پژوهش برای یک نمونه نانوکامپوزیت با ابعاد مشخصات داده شده در جدول ۱ ارائه خواهد شد.

جدول ۱) مشخصات نانوکامپوزیت CNT-polymer نمونه

مقدار	نشانه	مشخصه
۰/۹۳۸	d	قطر نانولوله کربنی؛ 12,0 (نانومتر)
۲/۶۵	L	طول المان حجمی نمونه (نانومتر)
۰/۲۹۹	$r_i$	شعاع داخلی نانولوله (نانومتر)
۰/۶۳۹	$r_o$	شعاع خارجی نانولوله (نانومتر)
۰/۶۳۹	$R_i$	شعاع داخلی پلیمراپوکسی (نانومتر)
۲/۵	$R_o$	شعاع خارجی پلیمراپوکسی (نانومتر)
۵	VF	نسبت حجمی (درصد)
$-0/125 \times 10^\circ$	$\alpha_{rad-CNT}$	ضریب انبساط شعاعی نانولوله (بر کلوین)
$-0/2 \times 10^\circ$	$\alpha_{axi-CNT}$	ضریب انبساط محوری نانولوله (بر کلوین)
$62 \times 10^\circ$	$\alpha_p$	ضریب انبساط پلیمراپوکسی (بر کلوین)

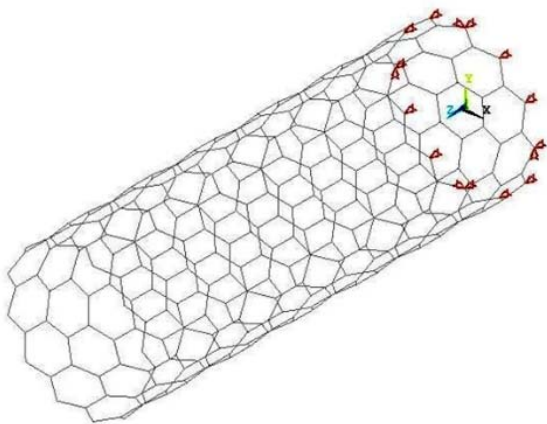
#### ۴-۱) محاسبه تنش‌های پسماند حرارتی با شرایط مرزی بین سطحی مختلف

در این بخش، نتایج مدل با شرایط مرزی بین سطحی ساده و مدل نیمه‌پیوسته با شرایط متقارن چرخه‌ای برای المان نماینده حجمی استوانه‌ای نانوکامپوزیت با ابعاد و مشخصات داده‌شده در جدول ۱ بر اساس محاسبات مربوط به معادلات (۲۴) و (۲۵) ارائه شده است. در نمودار ۲، تنش‌های پسماند حرارتی شعاعی با توجه به



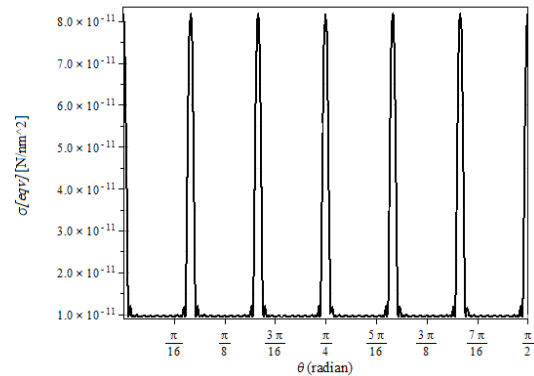
۴-۲- مدل‌سازی المان محدود جهت اعتبارسنجی نتایج تحلیلی

در این بخش، چگونگی مدل‌سازی المان محدود مساله با اطلاعات ارایه‌شده برای نانوکامپوزیت اپوکسی حاوی نانولوله کربنی تک‌جداره مطابق جدول ۱ تشریح می‌شود. همان‌طور که ذکر شد، نانولوله‌های کربنی تحت بارگذاری شبیه یک سازه قاب فضایی رفتار می‌کنند. پیوندهای کربنی به‌عنوان عضوهای اتصال تحمل‌کننده بار و اتم‌های کربن به‌عنوان اتصالات عضوها فرض می‌شوند. برای ایجاد مدل اجزاء محدود، گره‌ها در محل اتم‌های کربن فرض می‌شوند و پیوند بین آنها به‌کمک المان‌های تیر مدل‌سازی می‌شود. به این منظور از کدهای محیط نرم‌افزار انسیس (ANSYS) استفاده شده است. خواص الاستیک المان‌های تیر نظیر قطر مقطع از توازن انرژی سازه‌ای و مولکولی تعیین شده است. طول المان‌ها برابر طول پیوند کربنی یعنی ۱۴۲ نانومتر و مدول یانگ برابر  $5/48 \times 10^6 \text{ N/nm}^2$  و قطر آنها برابر ۱۴۶۶ نانومتر استفاده شده است. المان‌های اتصال خرابایی مربوط به پیوندهای غیرکووالانسی بین اتم‌های کربن نانولوله و سطح داخل ماتریس پلیمر اپوکسی در مدل با قابلیت کشش یا فشار تک‌محوری استفاده شده است. سختی خطی متوسط مربوط به رابطه نیروها و جابجایی‌ها در این المان‌ها مطابق رابطه نیروی لنارد جونز (Lennard-Jones) مشابه مرجع [15] در نظر گرفته شده تا نیروهای ضعیف و اندروالسی را به‌حساب آورده باشد. ناحیه پلیمری مدل نیز یک استوانه توخالی است که قطر خارجی‌اش با توجه به نسبت حجمی نانولوله به کامپوزیت تعیین می‌شود و با المان‌های توپر حجمی مش بندی می‌شود و سپس شرایط مرزی حداقلی برای آنکه حرکت جسم صلب در نرم‌افزار رخ ندهد، روی آن اعمال می‌شود. استوانه در یک سر با قید درجه آزادی محوری، ثابت می‌شود و دمای یکنواخت پایدار T بر تمام گره‌ها اعمال می‌شود. مدل المان محدود نانولوله و ماتریس پلیمری به‌ترتیب در شکل‌های ۴ و ۵ نشان داده شده‌اند.

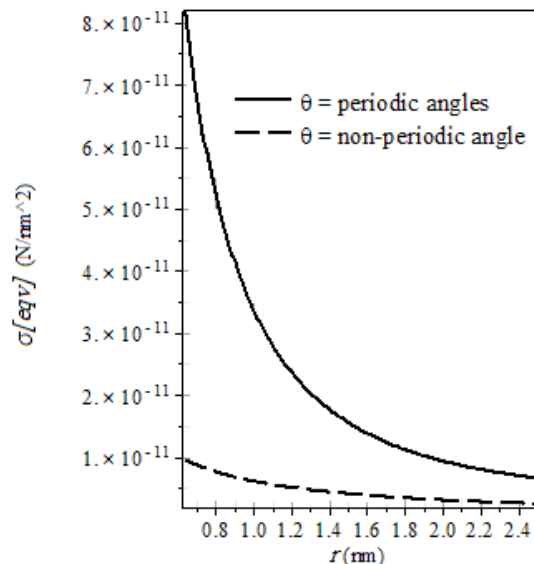


شکل ۴) مدل اجزاء محدود سازه نانولوله زیگزاگ (12,0) به‌کاررفته در المان حجمی نماینده

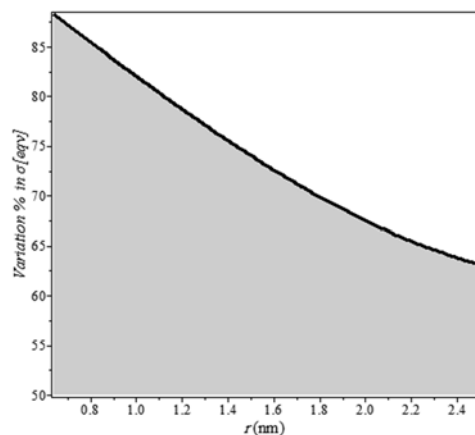
واقعیت که همانا تقارن چرخه‌ای نانولوله کربنی و تعامل بین سطحی بین نانولوله و پلیمر است، هماهنگ‌تر است.



نمودار ۳) ترسیم توزیع چرخه‌ای تنش پسماند حرارتی معادل فون میزز در امتداد زاویه محیطی از صفر تا  $\pi/2$  به‌ازای یک شعاع ثابت



نمودار ۴) مقایسه توزیع چرخه‌ای تنش پسماند حرارتی معادل در امتداد شعاع به‌ازای یک زاویه محیطی تناوبی و یک زاویه غیرتناوبی



نمودار ۵) درصد اختلاف تنش پسماند حرارتی معادل فون میزز در امتداد شعاع به‌ازای یک زاویه محیطی تناوبی و یک زاویه غیرتناوبی

مقایسه بین نتایج محاسبات تحلیلی و اجزاء محدود، در جدول ۲ با شرایط تقریباً مشابه انجام شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، روند کلی نتایج به‌خوبی با یکدیگر مطابقت دارند.

جدول ۲) مقایسه نتایج تنش به‌دست‌آمده از روش‌های تحلیلی حاضر و اجزاء محدود

تنش <sup>(۳)</sup>	نشانه	روش اجزاء محدود (MPa)	روش تحلیلی (MPa)
شعاعی	$\sigma_r$	47.8	43.3
محیطی	$\sigma_\theta$	-39.2	-49.3
معادل	$\sigma_{eqv}$	82.1	80.7

(\*) شرایط مساله عبارت است از  $\Delta T = 400$  و  $VF = 5\%$  و  $AR = 2.8$

### ۴-۳- بررسی تاثیر پارامترهای هندسی و تغییر دما بر تنش‌های پسماند حرارتی

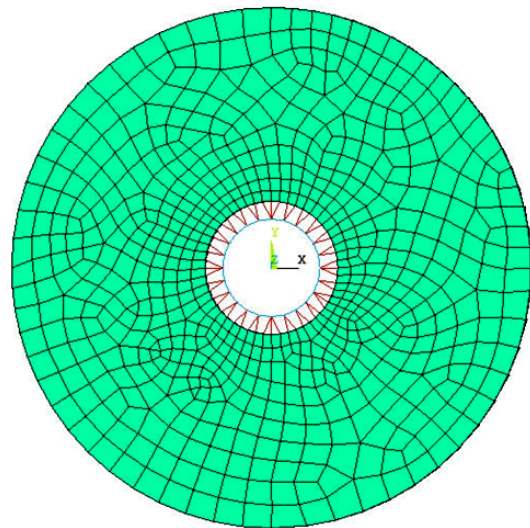
در این بخش، تاثیر پارامترهای هندسی نسبت حجمی (VF) و نسبت منطری (AR) نانولوله و نیز تغییر دما بر تنش‌های پسماند حرارتی نانوکامپوزیت نمونه مورد بررسی قرار گرفته و نتایج با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

نمودارهای ۶ تا ۹، به‌ترتیب نمودارهای تنش‌های پسماند حرارتی شعاعی، تنش برشی، تنش محیطی و تنش معادل پلیمر را به‌ازای نسبت حجمی‌های مختلف نانولوله به کامپوزیت نظیر ۵/۰، ۱ و ۲ تا ۱۰٪ به‌صورت تابعی شعاعی از فاصله تا سطح تماس میانی، نشان می‌دهند.

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، تنش برشی تقریباً مستقل از نسبت حجمی است ولی مقدار حد تنش برشی (T) در شعاع بیرونی توسط نسبت حجمی محدود می‌شود؛ در حالی که تنش‌های عمودی شعاعی و حلقوی ( $\sigma_r$  و  $\sigma_\theta$ )، به‌خصوص در شعاع‌های بیرونی با شدت بیشتری توسط نسبت حجمی تحت تاثیر قرار می‌گیرند. به‌طور کلی، افزایش نسبت حجمی اثر افزایشی اندکی بر تنش معادل ( $\sigma_e$ ) خواهد داشت و به‌ویژه در محدوده مقادیر نسبت حجمی زیر ۵٪ این تاثیر ناچیز است.

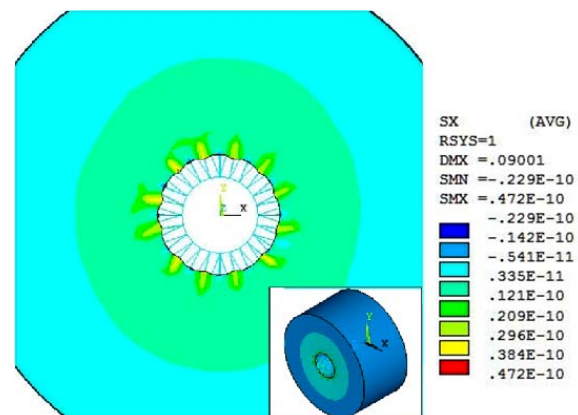
نمودارهای ۱۰ تا ۱۳، به‌ترتیب نمودارهای تنش‌های پسماند حرارتی شعاعی، تنش برشی، تنش محیطی و تنش معادل پلیمر را به‌ازای نسبت منطری‌های مختلف نانولوله کربنی از ۳/۰ تا حدود ۱۴ به‌صورت تابعی شعاعی از فاصله تا سطح تماس میانی، نشان می‌دهند.

با نظر به این نمودارها، می‌توان گفت که تنش برشی خیلی بیشتر تحت تاثیر نسبت منطری مدل قرار دارد. اگر نسبت منطری افزایش پیدا نماید، آنگاه تنش برشی شدیداً کم می‌شود و به‌عبارت دیگر در یک مدل نامحدود طولی، تنش برشی بین نانولوله کربنی و پلیمر از بین خواهد رفت. همچنین نسبت‌های منطری پایین تغییرات خیلی بیشتری در تنش شعاعی ایجاد می‌کنند؛ در حالی که با افزایش نسبت منطری، تغییرات کمتری در تنش‌های شعاعی و محیطی مشاهده می‌شود. همچنین به‌طور کلی نسبت منطری ۲/۸ می‌تواند به‌عنوان یک پیشنهاد مناسب برای

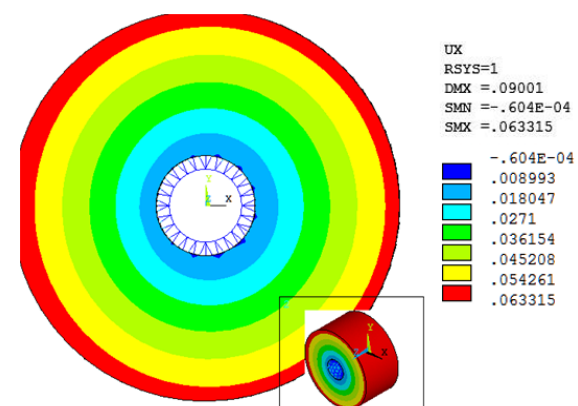


شکل ۵) برش مقطع سازه المان حجمی نماینده (پلیمر حاوی نانولوله کربنی) همراه با المان‌های میانی دو فاز

در ادامه به‌عنوان نمونه، تنش شعاعی و تغییر مکان شعاعی در شکل‌های ۶ و ۷ ارایه شده است. همان‌طور که در اینجا نیز دیده می‌شود، توزیع محیطی تنش‌ها در روش اجزاء محدود نیز حالت تقارن چرخه‌ای را از خود نشان می‌دهد.

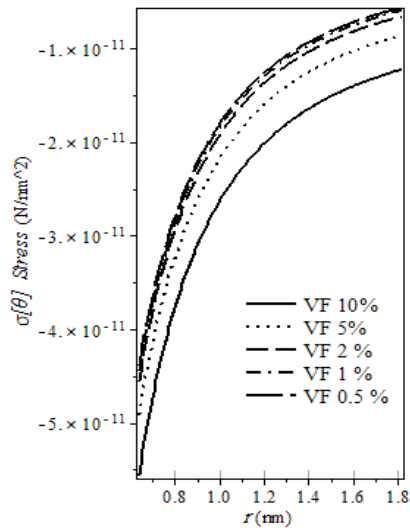


شکل ۶) توزیع تنش شعاعی متقارن چرخه‌ای در Ansys به‌دلیل مدل‌سازی ساختار مولکولی نانولوله و فاز میانی ( $N/mm^2$ )

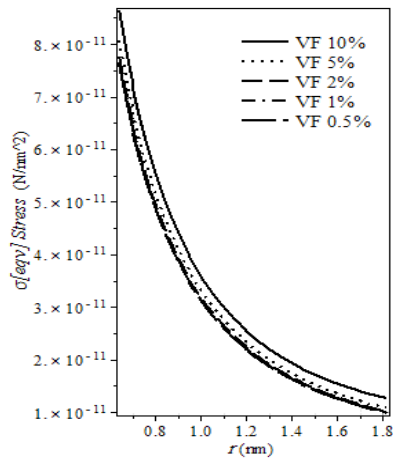


شکل ۷) توزیع تغییر مکان شعاعی در Ansys در نمای برش خورده از مقطع (nm)

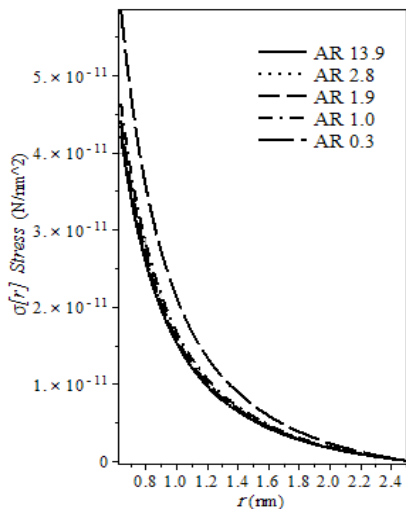




نمودار ۸) توزیع تنش پسماند حرارتی محیطی برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های حجمی‌های گوناگون نانولوله کربنی



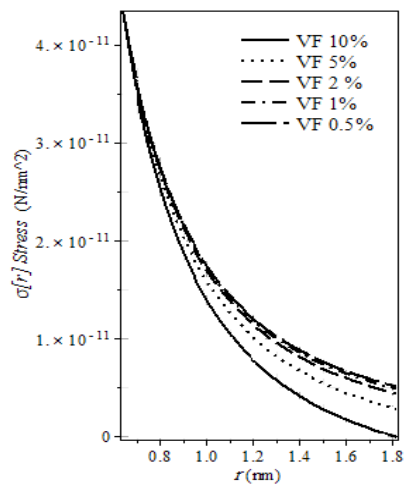
نمودار ۹) توزیع تنش پسماند حرارتی معادل برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های حجمی‌های گوناگون نانولوله کربنی



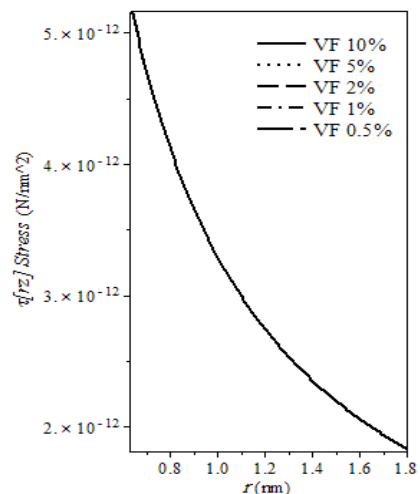
نمودار ۱۰) توزیع تنش پسماند حرارتی شعاعی برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های منظره‌های گوناگون نانولوله کربنی

مدلسازی اصلی ارایه شود که با تحقیقات سایرین [18, 19] نیز مطابقت دارد. عموماً می‌توان گفت که نسبت‌های منظری خیلی پایین، باعث رشد تنش حرارتی پسماند معادل شده و استفاده از آنها مناسب نیست. استفاده از نسبت‌های بالا (بیشتر از ۳) نیز به دلیل وقوع همگرایی در پاسخ‌ها، تاثیر چندانی بر کاهش تنش‌ها ندارد.

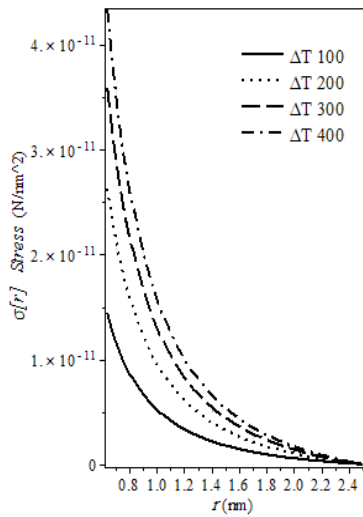
نمودارهای ۱۴ تا ۱۷ نیز به ترتیب نمودارهای تنش‌های پسماند حرارتی شعاعی، تنش برشی، تنش محیطی و تنش معادل پلیمر را به‌ازای تغییر دما از ۱۰۰ تا ۴۰۰ کلوین به صورت تابعی شعاعی از فاصله تا سطح تماس میانی، نشان می‌دهند. در خصوص بررسی تغییر دما و تاثیرش یادآوری می‌شود که در تحلیل‌های فعلی، در محدوده دمایی صفر تا یک حد معین (مثلاً حداکثر ۶۰۰ کلوین)، ضریب انبساط نانولوله کربنی منفی استفاده شده است و بالاتر از این حد معین در محدوده دماهای خیلی بالا ضریب انبساط مثبت به تدریج ظاهر می‌شود.



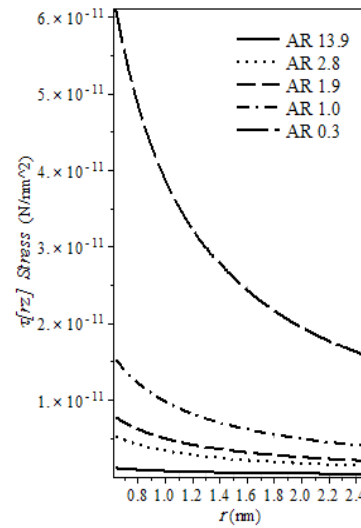
نمودار ۱۱) توزیع تنش پسماند حرارتی شعاعی برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های حجمی‌های گوناگون نانولوله کربنی



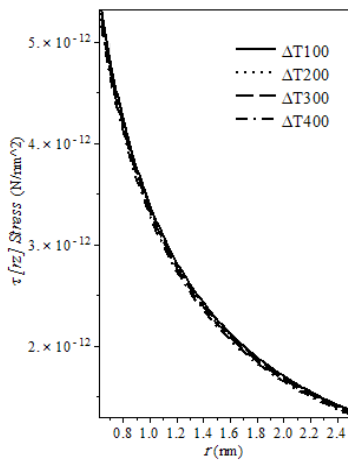
نمودار ۱۲) توزیع تنش پسماند حرارتی برشی برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های حجمی‌های گوناگون نانولوله کربنی



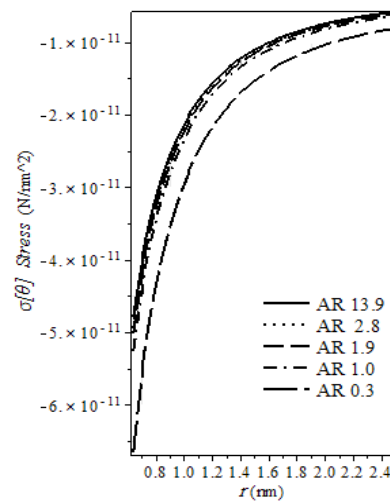
نمودار ۱۴) توزیع تنش پسماند حرارتی شعاعی برحسب جهت شعاعی به‌ازای تغییر دماهای گوناگون



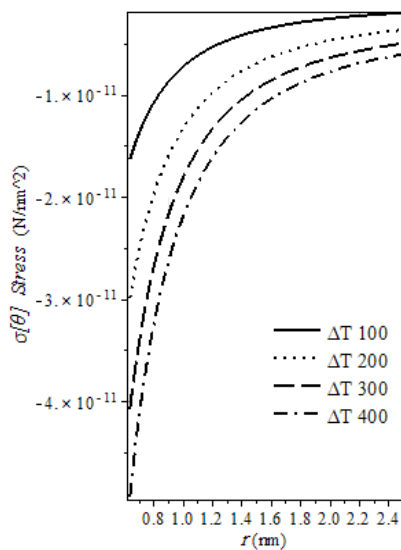
نمودار ۱۱) توزیع تنش پسماند حرارتی برشی برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های منظری‌های گوناگون نانولوله کربنی



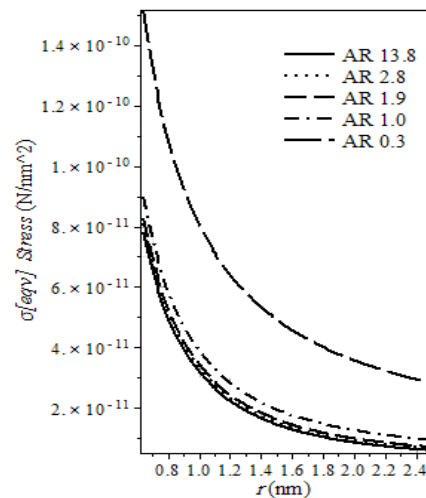
نمودار ۱۵) توزیع تنش پسماند حرارتی برشی برحسب جهت شعاعی به‌ازای تغییر دماهای گوناگون



نمودار ۱۲) توزیع تنش پسماند حرارتی محیطی برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های منظری‌های گوناگون نانولوله کربنی



نمودار ۱۶) توزیع تنش پسماند حرارتی محیطی برحسب جهت شعاعی به‌ازای تغییر دماهای گوناگون



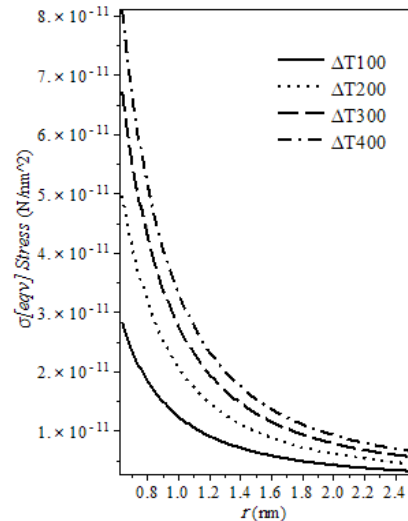
نمودار ۱۳) توزیع تنش پسماند حرارتی معادل برحسب جهت شعاعی به‌ازای نسبت‌های منظری‌های گوناگون نانولوله کربنی

پلیمرها باعث کاهش تنش پسماند در کامپوزیت‌ها می‌شود، این عبارت می‌تواند تنها در مقیاس ماکرو معتبر باشد. این برداشت اغلب به سبب ضریب انبساط منفی تعداد زیادی از انواع نانولوله‌های کربنی در دمای محیط و عموماً زیر ۶۰۰ کلوین است. به‌طور کلی به علت ضریب انبساط کمتر نانولوله‌های کربنی در مقایسه با پلیمرها، معمولاً ضریب انبساط ترکیبی پلیمر مخلوط‌شده با نانولوله‌ها کاهش می‌یابد. اما باید خاطر نشان ساخت که در مقیاس نانو، افزودن نانولوله‌های کربنی به پلیمر، تنش‌های حرارتی پسماند در ماده ایجاد می‌نماید که خصوصاً در سطح تماس محلی بین پلیمر و نانولوله دارای اهمیت است. لذا با انتخاب نامناسب یا غلط پارامترهایی نظیر نسبت منطری، نسبت حجمی، میزان دما، حرارت یا قطر و نوع نانولوله کربن، تنش‌های قابل ملاحظه‌ای ایجاد می‌شود که می‌تواند حتی به استحکام پلیمر آسیب برساند. به عبارت دیگر، اگرچه تنش‌های پسماند بین پلیمر و الیاف تقویتی در کامپوزیت‌ها به دلیل اضافه شدن نانولوله به پلیمر و اُفت ضریب انبساط پلیمر کاهش می‌یابد (همان‌طور که در مرجع [12] نیز ذکر شده بود)، لکن تنش‌های پسماندی بین پلیمر و نانولوله‌های کربنی توسعه می‌یابد که نمی‌توان آن را نادیده انگاشت.

#### ۵- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

محاسبه توزیع تنش‌های پسماند حرارتی در نانو کامپوزیت‌ها به‌ویژه در مقیاس محلی بین پلیمر و نانولوله، دارای اهمیت بسیاری است. در پژوهش حاضر یک مدل نیمه‌پیوسته با شرایط مرزی متقارن چرخه‌ای جهت تحلیل تنش‌های پسماند حرارتی پلیمر تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی ارائه شد. بر این اساس نشان داده شد که نتایج حاصل از مدل‌سازی نیمه‌پیوسته با شرایط مرزی متقارن چرخه‌ای در مقایسه با شرایط مرزی بین سطحی ساده، تطابق بسیار قابل قبول‌تری با نتایج تحلیل المان محدود دارد. لازم به ذکر است که تاثیر استفاده از مدل نیمه‌پیوسته با شرایط مرزی متقارن چرخه‌ای بر نتایج پژوهشی سایر محققین در مقیاس ماکرو اصلاً دیده نمی‌شود.

بر اساس تحقیق حاضر، پارامترهای هندسی و حرارتی نانولوله می‌توانند تنش‌های پسماند را دچار تغییر نمایند، به‌گونه‌ای که انتخاب نامناسب این پارامترها می‌تواند منجر به ازدست‌رفتن خواص ترمومکانیکی نانوکامپوزیت شود. لذا اثر برخی پارامترهای تاثیرگذار نظیر نسبت حجمی، نسبت منطری و تغییر دما روی تنش‌های پسماند حرارتی مورد بررسی قرار گرفتند. بر این اساس نشان داده شد که تنش‌های پسماند حرارتی مدل پلیمر حاوی نانولوله کربنی به‌آرامی با افزایش نسبت حجمی زیاد می‌شوند. اما نسبت منطری نانولوله هنگامی که تقریباً برابر ۲/۸ و بالاتر باشد، تنش‌های پسماند حرارتی مدل به مقدار پایداری می‌رسند. این مقدار می‌تواند به‌عنوان یک پیشنهاد مناسب برای مدل‌سازی نانوکامپوزیت انتخاب شود که با تحقیقات سایر محققین تطابق



نمودار ۱۷) توزیع تنش پسماند حرارتی معادل برحسب جهت شعاعی به‌ازای تغییر دماهای گوناگون

با توجه به این نمودارها می‌توان دریافت که همراه با تغییر دما در محدوده منفی ضریب انبساط، با ازدیاد تغییر دما، مقدار مطلق تنش‌های شعاعی، محیطی و معادل همگی افزایش یافته و تغییر در تنش برشی کمتر مشهود است. به عبارت دیگر در محدود افزایش دمایی صفر تا ۴۰۰ کلوین، تنش معادل به‌طور غیرخطی با دما تقریباً ۱۸۰٪ افزایش می‌یابد.

همچنین در تغییرات دمایی بالاتر، تنش‌ها مقادیر بیشتری به خود می‌گیرند که حاکی از تضعیف ماده به دلیل رشد تنش‌های پسماند حرارتی باقی‌مانده بین نانولوله کربنی و پلیمر در یک المان حجمی نماینده مدل شده است. در جدول ۳، مقایسه‌ای بین نتایج این تحقیق و مقادیر منتشرشده موجود از پژوهش دیگری توسط قاسمی و محمدی [20] ارائه شده است.

جدول ۳) مقایسه نتایج تنش به‌دست‌آمده از روش تحلیلی حاضر و نتایج پژوهش‌های پیشین در دسترس

تنش (MPa)	نشانه	مرجع [20]	پژوهش حاضر*
شعاعی	$\sigma_r$	۱۰/۴۷	۱۴/۴
محیطی	$\sigma_\theta$	-۲۳/۷	-۱۵/۵

(\*) شرایط مساله مرجع [20]:  $\Delta T = 100 K$  و  $VF = 3\%$  و  $r_{CNT} = 40nm$  و نانولوله MWCNT: (\*\* شرایط مساله حاضر:  $\Delta T = 100 K$  و  $VF = 5\%$  و  $AR = 2.8$  و نانولوله SWCNT

یادآوری می‌شود که در مرجع [20] توزیع تنش پسماند در نانوکامپوزیت تقویت‌شده با الیاف و نانولوله در جهات شعاعی و محیطی با روش اجزاء محدود به‌دست‌آمده است. اگرچه شرایط این مسائل از نظر نوع نانولوله، نسبت حجمی و روش تحلیل خیلی متفاوت است، لکن این مقایسه یک افق روشن و مسیر صحیح را نسبت به نتایج پژوهش حاضر نشان می‌دهد.

مهم‌ترین نتیجه‌ای که از این بخش می‌توان دریافت، این است که اگر اعتقاد بر این باشد که اضافه کردن نانولوله‌های کربنی به

- properties of CNT-reinforced nanocomposites. *Nanoscale Research Letters*. 2013;8:15.
- 9- Tserpes KI, Papanikos P, Labeas G, Pantelakis SG. Multi-scale modeling of tensile behavior of carbon nanotube-reinforced composites. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2008;49(1):51-60.
- 10- Li C, Chou TW. Multiscale modeling of compressive behavior of carbon nanotube/polymer composites. *Composites Science and Technology*. 2006;66(14):2409-2414.
- 11- Li S, Wang Y, Rummeli MH, Vlček J, Pištora J, lesňák M. Analysis and calculation of residual stress in carbon nanotube reinforced magnesium matrix composites. *GeoScience Engineering*. 2009;LV(4):73-77.
- 12- Shokrieh MM, Daneshvar A, Akbari S. Reduction of thermal residual stresses of laminated polymer composites by addition of carbon nanotubes. *Materials & Design*. 2014;53:209-216.
- 13- Kalamkarov AL, Georgiades AV, Rokkam SK, Veedu VP, Ghasemi-Nejhad MN. Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties. *International Journal of Solids and Structures*. 2006;43(22-23):6832-6854.
- 14- Zakeri M, Shayanmehr M, Shokrieh MM. Interface modeling of nanotube reinforced nanocomposites by using multi-scale modeling method. *Modares Mechanical Engineering*. 2012;12(5):1-11. [Persian]
- 15- Boresi AP, Chong K, Lee JD. *Elasticity in engineering mechanics*. 3<sup>rd</sup> Edition. Hoboken: John Wiley & Sons; 2011.
- 16- Timoshenko SP, Goodier JN. *Theory of elasticity*. 3<sup>rd</sup> Edition. New York: McGraw-Hill; 1970.
- 17- Jiang LY, Huang Y, Jiang H, Ravichandran G, Gao H, Hwang KC, et al. A cohesive law for carbon nanotube/polymer interfaces based on the van der Waals force. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2006;54(11):2436-2452.
- 18- Zakeri M, Shayanmehr M. On the mechanical properties of chiral carbon nanotubes. *Journal of Ultrafine Grained and Nanostructured Materials*. 2013;46(1):1-9.
- 19- Zaeri MM, Ziaei-Rad S, Vahedi A, Karimzadeh F. Mechanical modeling of carbon nanomaterials from nanotubes to buckypaper. *Carbon*. 2010;48(13):3916-3930.
- 20- Ghasemi AR, Mohammadi-Fesharaki M. Distribution of residual stresses in polymer reinforced carbon nanotubes and laminated carbon fibers. *Mechanics of Advanced Composite Structures*. 2017;4(1):9-18.

بسیار خوبی دارد. تنش‌های پسماند حرارتی همچنین با ازدیاد تغییرات دما افزایش می‌یابد که روند دقیق این افزایش نیاز به اعمال دقیق ضریب انبساط لحظه‌ای نانولوله کربنی در محدوده منفی یا مثبت خود را دارد.

- تشکر و قدردانی:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.
- تاییدیه اخلاقی:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.
- تعارض منافع:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.
- سهم نویسندگان:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.
- منابع مالی:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.

### منابع

- 1- Ma HL, Lau KT, Hui D, Shi SQ, Poon CK. Theoretical analysis on the pullout behavior of carbon nanotube at cryogenic environment with the consideration of thermal residual stress. *Composites Part B: Engineering*. 2017;128:67-75.
- 2- Siochi EJ. High volume fraction carbon nanotube composites for aerospace applications. *TechConnect Briefs*. 2016;1:49-52.
- 3- Jiang H, Liu B, Huang Y, Hwang KC. Thermal expansion of single wall carbon nanotubes. *Journal of Engineering Materials and Technology*. 2004;126(3):265-270.
- 4- Alamusi, Hu N, Jia B, Arai M, Yan C, Li J, et al. Prediction of thermal expansion properties of carbon nanotubes using molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*. 2012;54:249-254.
- 5- Odegard GM, Gates TS, Nicholson LM, Wise KE. Equivalent continuum modeling of nano-structured materials. *Composites Science and Technology*. 2002;62(14):1869-1880.
- 6- Shi DL, Feng XQ, Jiang H, Huang YY, Hwang KC. Multiscale analysis of fracture of carbon nanotubes embedded in composites. *International Journal of Fracture*. 2005;134:369-386.
- 7- Hassanzadeh-Aghdam MK, Mahmoodi MJ, Barkhordari H. Micromechanical modeling of effective elastic properties of hybrid nanocomposites reinforced by fuzzy fiber containing carbon nanotubes. *Modares Mechanical Engineering*. 2017;17(9):261-272. [Persian]
- 8- Alamusi, Hu N, Qiu J, Li Y, Chang C, Atobe S, et al. Multi-scale numerical simulations of thermal expansion