

УДК 539.3  
УДК 539.3

DOI:10.33744/0365-8171-2024-115.1-067-080

ТЕРМОМЕХАНІЧНІ ДЕФОРМУВАННЯ КАРБОНОВИХ НАНОТРУБОК В ПОЛІМЕРНИХ  
МАТРИЦЯХ

THERMOMECHANICAL DEFORMATION OF CARBON NANOTUBES IN POLYMER  
MATRIXES



*Шлюнь Наталія Володимирівна, кандидат технічних наук, доцент, Національний транспортний університет, в.о. завідувача кафедри вищої математики, к. 508, вул. Бойчука 42, Київ, Україна, 01103, e-mail: [nataliyashlyun@gmail.com](mailto:nataliyashlyun@gmail.com), тел. +380975936346,*

<https://orcid.org/0000-0003-1040-8870>



*Заєць Юлія Олександрівна, кандидат технічних наук, доцент, Національний транспортний університет, кафедра вищої математики, к. 511, вул. Бойчука 42, Київ, Україна, 01103, e-mail: [yzats@gmail.com](mailto:yzats@gmail.com),*

<https://orcid.org/0000-0003-1836-2010>

**Анотація.** Виконано теоретичне дослідження ефектів зародження внутрішньоструктурних термонапружень в полімерних матеріалах, армованих карбонними нанотрубками, що викликані термомеханічною несумісністю цих матеріалів. На базі моделювання нанотрубки пружною циліндричною оболонкою із зведеними значеннями товщини, модуля пружності, коефіцієнта Пуассона і коефіцієнта лінійного термічного розширення побудовані диференціальні рівняння її термопружної взаємодії з епоксидним, поліамідним, фенолформальдегідним, поліефірним, полікарбонатним, полістирольним та поліпропіленовим середовищами в однорідних і неоднорідних полях температури. Знайдені розв'язки цих рівнянь в замкненій формі. Побудовані функції розподілення термонапружень в матричному середовищі та термічних зусиль в стінці нанотрубки. Продемонстровано, що термонапруження в матричному середовищі мають вигляд концентраторів на інтерфейсній поверхні між фазами системи та спадають обернено пропорційно квадрату відстані до осі нанотрубки. Показано, що інтенсивності цих термонапружень зростають зі збільшенням несумісності термомеханічних параметрів фаз системи.

**Ключові слова:** карбонові нанотрубки, полімерні матеріали, термомеханічна несумісність, внутрішньоструктурні термонапруження, математичне моделювання, концентратори напружень.

### Вступ

Науковий та прикладний інтерес до відкритих в кінці минулого століття вуглецевих наноконструкціям зумовлений їх унікальними фізико-механічними характеристиками та значними можливостями практичного дослідження [1,2]. Найбільшими показовими різновидами цих нових структур є фуллерени, що мають замкнену сферичну або сфероїдальну форму, та нанотрубки.

Область досліджень, пов'язана із синтезом, вивченням та використанням вуглецевих нанотрубок (ВНТ), є одним із напрямів сучасної нанотехнології. Можна виділити два основних фактори, що сприяють розвитку таких досліджень. По-перше, це фундаментальний аспект, зумовлений мініатюрними розмірами та унікальними фізико-механічними характеристиками ВНТ. По-друге, завдяки таким властивостям, нанотрубки володіють значним прикладним потенціалом, що притягує до них інтерес зі сторони інженерів, які розвивають нові технології, а також які розробляють нові типи приладів та матеріалів.

Експерименти показують, що нанотрубки являють собою матеріал з рекордно високим значенням модуля Юнга (порядку терапаскаля). Це зумовлено їх досконалою структурою та силою хімічного зв'язку між атомами вуглецю, що складають ВНТ. Високі характеристики міцності ВНТ представляють значний інтерес з точки зору створення нових матеріалів та об'єктів техніки, які володіють підвищеними механічними властивостями. Так, розвинена технологія отримання надміцних волокон, пряжі та тканин із нанотрубок. Ці вироби за своїми механічними характеристиками стоять поза конкуренцією серед інших подібних матеріалів. В теперішній час активно розробляються композити, які являють собою полімерні матриці з додаванням ВНТ [3]. При цьому важливою проблемою є забезпечення спряження поверхонь полімеру та нанотрубки, що забезпечує ефективну передачу силових впливів від полімерної матриці до нанотрубки.

В силу відмічених унікальних фізико-механічних властивостей та завдяки значному потенціалу прикладного дослідження нанотрубки є об'єктом дослідження багатьох наукових організацій. За результатами таких досліджень щорічно публікується сотні наукових статей, загальне число яких складає десятки тисяч.

Вуглецева нанотрубка за своєю структурою являє собою одношарову чи багатшарову циліндричну оболонку діаметром від одного до кількох десятків нанометрів та довжиною від однієї десятої мікрона до півметра. Найбільш простим об'єктом з точки зору аналізу пружних властивостей є одношарова нанотрубка. Одним із характерних параметрів ВНТ являється її кут кіральності, який є кутом орієнтації графітової площини відносно осі нанотрубки. Параметри кіральності надають визначний вплив на електронні характеристики трубки, однак майже ніяк не впливають на її пружні властивості. Тому при аналізі механіки ВНТ кіральність, як правило не враховується.

Як об'єкт теорії пружності одношарова ВНТ може бути представлена у вигляді тонкої циліндричної оболонки або трубчастого стержня. Тому, як правило, повна механічна подібність в поведінці нанотрубок та макроскопічних оболонок на практиці не спостерігається. По-перше, це пов'язано з тим, що ВНТ не має суцільної стінки, а по-друге, вона характеризується товщиною порядку одного атома. У зв'язку з цим представляє значний інтерес вивчити в якій мірі класичні уявлення про механіку та пружні властивості циліндричних оболонок та стержнів можуть застосовуватись до такого фізичного та хімічного об'єкту, як ВНТ. Відповіді на ці питання в теперішній час формуються на основі

порівняльного аналізу експериментальних даних, які отримані з урахуванням результатів модельних розрахунків, виконаних на атомно-молекулярному рівні, та класичних уявленнях теорії пружності [1,2].

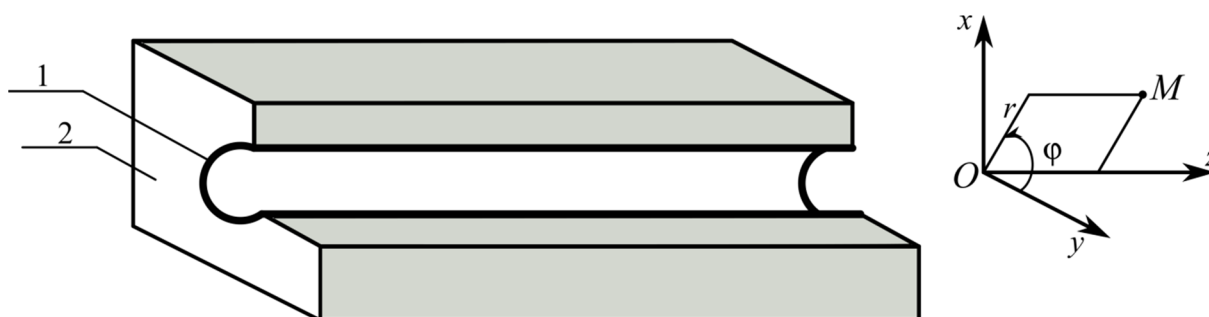
З особливою внутрішньою структурою нанотрубок пов'язаний також ефект їх надвисокої поздовжньої теплопровідності [4]. Так, для одношарової КНТ її значення при  $T = 20^\circ \text{C}$  складає  $\beta = 2800 \div 6000 \text{ В/мК}$ . Вона співставна з цією величиною для алмазу  $\beta = 2200 \text{ В/мК}$ , але значно перевищує коефіцієнти теплопровідності для сталі  $\beta = 235 \text{ В/мК}$  та міді  $\beta = 398 \text{ В/мК}$  [5 - 7].

В той же час відмічається вельми слабка поверхнева теплопередача в композитах від трубки до оточуючої її полімерної матриці через високий інтрефейсний термоопір на молекулярному рівні між ними. Це може призводити до розривності функції температури на контактній поверхні та до її високих градієнтів, що викликають додаткові концентратори термонапруження в системі. Однак цей фактор може грати і позитивну роль, завдяки можливості використання нанотрубки не тільки в якості армуючого елемента, але й у вигляді транспортного каналу для переносу тепла від високотемпературних зон композиту до низькотемпературних без втрати її на шляху прямування.

У зв'язку з відміченим вище, представляють значний науковий та прикладний інтерес питання моделювання додаткових внутрішньоструктурних термонапружень в системі нанотрубка-матриця, що викликані можливою несумісністю їх термомеханічних параметрів та високими градієнтами температури [8 -10,12-14]. Нижче при проведенні дослідження нанотрубка буде розглядатись як пружна циліндрична оболонка, матриця буде моделюватись пружним середовищем.

### Постановка задачі

Нехай нескінченна нанотрубка 1 знаходиться в нескінченному середовищі 2 (рис. 1).



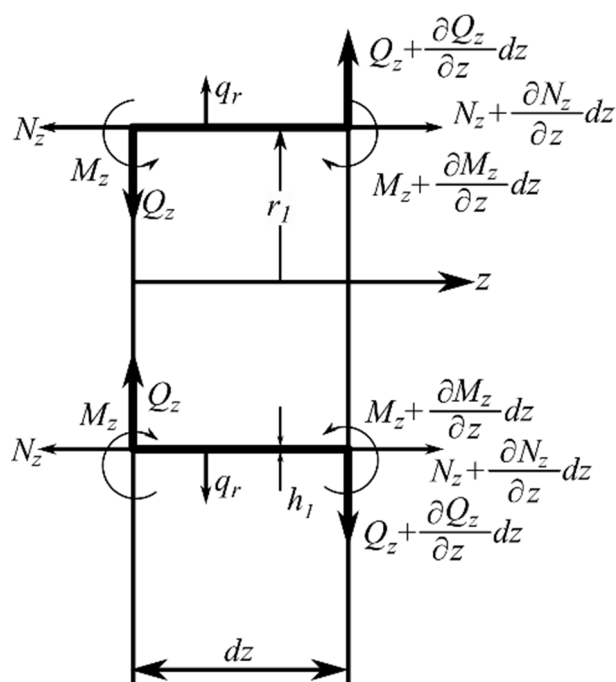
**Рисунок 1** – Геометрична схема системи  
**Figure 1** – Geometric scheme of the system

Дослідимо термонапружений стан системи у двох випадках, коли температура всієї системи змінювалась на величину  $T$  і коли температура трубки змінилась на  $T_1$ , а матриці – на  $T_2$ . Для розрахунку використовуємо циліндричну систему координат  $Or\theta z$ , вісь  $\theta z$  якої співпадає з віссю трубки. Прийнемо, що радіус серединної поверхні трубки дорівнює  $r_1$ , зведена товщина –  $h$ . Для неї зведені значення термомеханічних параметрів складають: модуль пружності  $E_1$ , коефіцієнт Пуассона

$\nu_1$ , коефіцієнт лінійного термічного розширення  $\alpha_1$ . Для матеріалу матриці ці параметри позначимо  $E_2, \nu_2, \alpha_2$ .

Вважаємо, що у вихідному положенні нанотрубка знаходиться у безперервному контакті по зовнішній поверхні з матеріалом матриці та напруження в системі рівні нулю. Потім температури фракцій змінились на величини  $T_1$  і  $T_2$ , відповідно. Потрібно досліджувати осесиметричний термонапружений стан системи, який виникає.

Сформулюємо спочатку на базі теорії циліндричних оболонок рівняння термопружного стану нанотрубки [11]. Для цього умовно виділимо її кільцевий елемент довжиною  $dz$  (рис. 2), прикладемо до нього зовнішні і внутрішні сили та розглянемо їх рівновагу.



**Рисунок 2** – Схема сил та параметрів, що діють на елемент оболонки  
**Figure 2** – Scheme of forces and parameters acting on the shell element

Рівняння рівноваги елемента оболонки при відсутності дотичних сил на її поверхні мають вигляд:

$$\frac{dN_z}{dz} = 0, \quad \frac{dM_z}{dz} - Q_z = 0, \quad \frac{dQ_z}{dz} - \frac{N_\varphi}{r_1} + q_r = 0. \quad (1)$$

Тут  $N_z, N_\varphi$  – мембранні зусилля відповідної орієнтації;  $M_z$  – згинний момент;  $Q_z$  – перерізуюча сила;  $q$  – інтенсивність зовнішнього розподіленого навантаження.

Виключаючи  $Q_z$  з другого та третього рівнянь (1), отримаємо

$$\frac{d^2M_z}{dz^2} - \frac{N_\varphi}{r_1} + q_r = 0. \quad (2)$$

Випишемо співвідношення для мембранних деформацій [11]

$$\varepsilon_z^{(1)} = \frac{N_z - \nu_1 N_\varphi}{E_1 h} + \alpha_1 T, \quad \varepsilon_\varphi = \frac{N_\varphi - \nu_1 N_z}{E_1 h} + \alpha_1 T, \quad (3)$$

зміна кривин

$$\chi_z = \frac{12(M_z - \nu_1 M_\varphi)}{E_1 h^3}, \quad \chi_\varphi = \frac{12(M_\varphi - \nu_1 M_z)}{E_1 h^3}, \quad (4)$$

мембранних зусиль

$$N_z = \frac{E_1 h}{1 - \nu_1^2} [\varepsilon_z + \nu_1 \varepsilon_\varphi - (1 + \nu_1) \alpha_1 T],$$

$$N_\varphi = \frac{E_1 h}{1 - \nu_1^2} [\varepsilon_\varphi + \nu_1 \varepsilon_z - (1 + \nu_1) \alpha_1 T] \quad (5)$$

та моментів

$$M_z = \frac{E_1 h^3}{12(1 - \nu_1^2)} [\chi_z + \nu_1 \chi_\varphi],$$

$$M_\varphi = \frac{E_1 h^3}{12(1 - \nu_1^2)} [\chi_\varphi + \nu_1 \chi_z]. \quad (6)$$

В цих виразах  $\varepsilon_z^{(1)}$ ,  $\varepsilon_\varphi^{(1)}$  і  $\chi_z$ ,  $\chi_\varphi$  – мембранні відносні деформації та зміни кривин середньої поверхні. Для циліндричної оболонки вони визначаються залежностями

$$\varepsilon_z^{(1)} = \frac{dv_1}{dz}, \quad \varepsilon_\varphi = \frac{u_1}{r_1},$$

$$\chi_z = -\frac{d^2 u_1}{dz^2}, \quad \chi_\varphi = 0, \quad (7)$$

де  $u_1$  і  $v_1$  – переміщення елементів середньої поверхні в повздовжньому та радіальному напрямках.

Підставляючи (7) в (5) та (6), отримуємо

$$N_z = \frac{E_1 h}{1 - \nu_1^2} \left[ \frac{dv_1}{dz} + \nu_1 \frac{u_1}{r_1} - (1 + \nu_1) \alpha_1 T \right],$$

$$N_\varphi = \frac{E_1 h}{1 - \nu_1^2} \left[ \frac{u_1}{r_1} + \nu_1 \frac{dv_1}{dz} - (1 + \nu_1) \alpha_1 T \right], \quad (8)$$

$$M_z = -\frac{E_1 h^3}{12(1 - \nu_1^2)} \frac{d^2 u_1}{dz^2}, \quad M_\varphi = -\frac{\nu_1 E_1 h^3}{12(1 - \nu_1^2)} \frac{d^2 u_1}{dz^2}.$$

Ціль даного дослідження полягає в аналізі внутрішньоструктурних термонапружень, які викликані несумісністю термдеформацій нанотрубки та матриці. Тому будемо вважати, що трубка

нескінченної довжини знаходиться в необмеженому середовищі матриці. При цьому виділимо два випадки, коли в системі рівні нулю напруження в осьовому напрямі  $\sigma_z^{(1)}$ ,  $\sigma_z^{(2)}$  (плоский напружений стан) або коли в ній дорівнюють нулю осьові переміщення  $v_1$ ,  $v_2$  (плоска деформація). У цих випадках рівняння (1) зводяться до вигляду

$$N_z = const, \\ -\frac{E_1 h}{r_1(1-\nu_1^2)} \left[ \frac{u_1}{r_1} + \nu_1 \frac{dv_1}{dz} - (1+\nu_1)\alpha_1 T \right] + q_r = 0. \quad (9)$$

Величина  $q_r$  контактного тиску, що сюди входить, визначається з умови сумісності радіальних переміщень.

При дослідженні термонапруженого стану середовища матриці зручно поряд з параметрами пружності  $E_2$ ,  $\nu_2$  застосовувати також параметри Ляме  $\lambda_2$  і  $\mu_2$ , за необхідності переходячи від однієї системи до іншої. В циліндричній системі координат  $Or\theta z$  плоска осесиметрична термонапружена рівновага пружного середовища 2 описується рівнянням [11]

$$\frac{d\sigma_r^{(2)}}{dr} + \frac{\sigma_r^{(2)} - \sigma_\phi^{(2)}}{r} = 0. \quad (10)$$

Тут  $\sigma_r^{(2)}(r)$ ,  $\sigma_\phi^{(2)}(r)$  – функції радіальних та колових напружень вздовж відповідних координатних осей. Виразимо їх разом з  $\sigma_z^{(2)}(r)$  через компоненти відносних деформацій  $\varepsilon_r^{(2)}(r)$ ,  $\varepsilon_\phi^{(2)}(r)$ ,  $\varepsilon_z^{(2)}(r)$

$$\begin{aligned} \sigma_r^{(2)}(r) &= (\lambda_2 + 2\mu_2)\varepsilon_r^{(2)} + \lambda_2(\varepsilon_\phi^{(2)} + \varepsilon_z^{(2)}) - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_\phi^{(2)}(r) &= (\lambda_2 + 2\mu_2)\varepsilon_\phi^{(2)} + \lambda_2(\varepsilon_r^{(2)} + \varepsilon_z^{(2)}) - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_z^{(2)}(r) &= (\lambda_2 + 2\mu_2)\varepsilon_z^{(2)} + \lambda_2(\varepsilon_r^{(2)} + \varepsilon_\phi^{(2)}) - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T. \end{aligned} \quad (11)$$

де деформації обчислюються через радіальні переміщення  $u_2(r)$ :

$$\varepsilon_r^{(2)}(r) = \frac{du^{(2)}}{dr}, \quad \varepsilon_\phi^{(2)}(r) = \frac{u^{(2)}}{r}. \quad (12)$$

Розглянемо спочатку плоский деформований стан. Тоді

$$\varepsilon_z^{(2)}(r) = 0 \quad (13)$$

і рівняння (11) зводяться до форми:

$$\begin{aligned}\sigma_r^{(2)}(r) &= (\lambda_2 + 2\mu_2)\varepsilon_r^{(2)} + \lambda_2\varepsilon_\varphi^{(2)} - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_\varphi^{(2)}(r) &= (\lambda_2 + 2\mu_2)\varepsilon_\varphi^{(2)} + \lambda_2\varepsilon_r^{(2)} - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_z^{(2)}(r) &= \lambda_2(\varepsilon_r^{(2)} + \varepsilon_\varphi^{(2)}) - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T.\end{aligned}\quad (14)$$

За допомогою (14) та (12) перетворимо рівняння (10) до остаточного вигляду:

$$\frac{d^2 u^{(2)}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du^{(2)}}{dr} - \frac{1}{r^2} u^{(2)} = 0. \quad (15)$$

Воно має розв'язок

$$u^{(2)}(r) = rC_1 + \frac{1}{r}C_2, \quad (16)$$

де  $C_1$ ,  $C_2$  – константи інтегрування. Вони знаходяться з умов контактної взаємодії середовища 2 з оболонкою 1 і прямування напруження  $\sigma_r^{(2)}(r)$  до нуля при  $r \rightarrow \infty$ .

Як правило, в теорії оболонок, вважаємо, що взаємодія фрагментів 1 і 2 системи відбувається на серединній поверхні  $r = r_1$ . В цьому випадку маємо

$$q_r = \sigma_r^{(2)}(r_1), \quad (17)$$

$$u_1 = u^{(2)}(r_1), \quad (18)$$

$$\sigma_r^{(2)}(r) \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty. \quad (19)$$

Враховуючи (16) випишемо співвідношення

$$\begin{aligned}\varepsilon_r^{(2)}(r) &= C_1 - \frac{1}{r^2}C_2, & \varepsilon_\varphi^{(2)}(r) &= C_1 + \frac{1}{r^2}C_2, \\ \sigma_r^{(2)}(r) &= 2(\lambda_2 + \mu_2)C_1 - 2\mu_2 \frac{1}{r^2}C_2 - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_\varphi^{(2)}(r) &= 2(\lambda_2 + \mu_2)C_1 + 2\mu_2 \frac{1}{r^2}C_2 - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_z^{(2)}(r) &= \lambda_2 C_1 - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T.\end{aligned}\quad (20)$$

Тоді з умов (19) випливає

$$C_1 = \frac{(3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(\lambda_2 + \mu_2)}\alpha_2 T. \quad (21)$$

В цьому випадку рівняння (17), (18) набувають форму

$$\frac{E_1 h}{r_1 (1 - \nu_1^2)} \left[ \frac{u_1}{r_1} - (1 + \nu_1) \alpha_1 T \right] = -\frac{2\mu_2}{r_1^2} C_2, \quad (22)$$

$$u_1 = \frac{r_1 (3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T + \frac{1}{r_1} C_2. \quad (23)$$

Ця система має розв'язок

$$u_1 = \left[ \frac{E_1 h}{r_1 (1 - \nu_1)} \alpha_1 T + \frac{\mu_2 (3\lambda_2 + 2\mu_2)}{(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T \right] / \left[ \frac{E_1 h}{r_1^2 (1 - \nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1} \right], \quad (24)$$

$$C_2 = - \left[ \frac{E_1 h}{(1 - \nu_1^2)} \cdot \frac{(3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T - \frac{E_1 h}{(1 - \nu_1)} \alpha_1 T \right] / \left[ \frac{E_1 h}{r_1^2 (1 - \nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1} \right] \quad (25)$$

Враховуючи (21) зведемо напруження (20) до вигляду

$$\begin{aligned} \sigma_r^{(2)}(r) &= -\frac{2\mu_2}{r^2} C_2, \\ \sigma_\phi^{(2)}(r) &= \frac{2\mu_2}{r^2} C_2, \\ \sigma_z^{(2)}(r) &= \lambda_2 C_1 - (3\lambda_2 + 2\mu_2) \alpha_2 T. \end{aligned} \quad (26)$$

Тоді

$$\begin{aligned} \sigma_r^{(2)}(r) &= \frac{2E_1 h \mu_2}{r^2 (1 - \nu_1)} \frac{\left[ \frac{(3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(1 + \nu_1)(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T - \alpha_1 T \right]}{\frac{E_1 h}{r_1^2 (1 - \nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1}}, \\ \sigma_\phi^{(2)}(r) &= -\frac{2E_1 h \mu_2}{r^2 (1 - \nu_1)} \frac{\left[ \frac{(3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(1 + \nu_1)(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T - \alpha_1 T \right]}{\frac{E_1 h}{r_1^2 (1 - \nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1}}, \\ \sigma_z^{(2)}(r) &= \frac{\lambda_2 (3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T - (3\lambda_2 + 2\mu_2) \alpha_2 T. \end{aligned} \quad (27)$$

Підкреслимо, що наведені співвідношення отримані з припущенням, що прирости температури  $T$  однакові у всій системі.

#### Аналіз результатів обчислень для випадку однорідного температурного поля

При виборі значень термомеханічних параметрів  $E_1$ ,  $\nu_1$ ,  $h$  і  $\alpha_1$  для оболонкової моделі решітчастої стінки нанотрубки необхідно врахувати, що на практиці їх експериментальне визначення методами молекулярної механіки проводяться шляхом співставлення частот та форм повздовжніх,

радіальних, згинних та крутильних коливань реального нанотрубчастого зразка і його теоретичної моделі у вигляді циліндричної оболонки або порожнього циліндра такої ж довжини. Одним з таких параметрів є товщина  $h$  оболонки, яка характеризується тим, що товщина стінки реальної нанотрубки дорівнює розміру одного атома вуглецю. У зв'язку з цим, в експериментах та обчисленнях часто використовують узагальнені оболонкові характеристики: згинна оболонкова жорсткість  $D = Eh^3/12(1-\nu^2)$  і мембранна жорсткість  $K = Eh$ . Зазвичай вважається [1], що при  $E=1$  ТПа,  $K = Eh = 360$  Н/м,  $\nu = 0,2$ . У зв'язку з цим, покладемо, що в нашому випадку  $E_1h = 360$  Н/м,  $\nu_1 = 0,2$ ,  $\alpha_1 = 1,0 \cdot 10^{-5} \text{ C}^{-1}$ . Радіус нанотрубки може набувати значення від 0,5 до декількох десятків нанометрів.

Оскільки при створенні композитів з додаванням вуглецевих нанотрубок найбільш активно обговорюються структури з полімерними матрицями, нижче для аналізу термомеханічної сумісності нанотрубки і середовища 2 вибрані полімерні матеріали, наведені в Табл.1. Відмітимо, що їх термомеханічні властивості можуть залежати від їхнього складу, технології виготовлення та температури, тому в Табл.1 подані найбільш характерні значення термомеханічних параметрів цих матеріалів

**Таблиця 1** – Термомеханічні параметри вибраних полімерних матеріалів  
**Table 1** – Thermomechanical parameters of selected polymer materials

№ п.п	Полімерний матеріал	$\lambda$ , ГПа	$\mu$ , ГПа	$[\sigma]_{міц}$ , МПа	$10^5 \alpha \text{ C}^{-1}$
1	Епоксидна смола	2,8	1,3	40-80	5
2	Поліамід	3,76	1,06	50-90	7
3	Фенелформальдегід	1,18	1,56	48	3
4	Поліефір	4,73	1,84	10-129	7,9
5	Полікарбонат	2,25	0,87	66	6,5
6	Полістирол	2,58	1,21	46	7
7	Поліпропілен	2,40	0,46	31-41	14

Використовуючи ці величини, за допомогою формул (16), (18), (8), (27) обчислені значення  $u_1$ ,  $N_\phi$ ,  $N_z$ ,  $\sigma_r^{(2)}(r_1)$ ,  $\sigma_\phi^{(2)}(r_1)$ ,  $\sigma_z^{(2)}(r_1)$  для комбінації нанотрубки з матеріалами наведеними в Табл.1. При цьому вважалось, що  $r_1 = 5$  нм, зміна температури  $T = 50^\circ \text{ C}$ . Результати обчислень показані в Табл. 2.

Аналіз значень радіальних термомеханічних переміщень  $u_1(r_1)$  стінки нанотрубки дозволяє зробити висновок, що у зв'язку з великою радіальною жорсткістю нанотрубки основна доля значення  $u_1$  викликана простим термічним розширенням  $u_T = (1 + \nu_1)\alpha_1 T$ , яке складає  $u_T = 0,0006$  нм при  $r_1 = 1$  нм та  $u_T = 0,003$  нм при  $r_1 = 5$  нм. Малі перевищення цих величин, що можна спостерігати в Табл.2, навіть при великих значеннях коефіцієнтів  $\alpha_2$  полімерів порівняно з коефіцієнтом  $\alpha_1$  нанотрубки пояснюється високими значеннями  $E_1$  карбонової стінки.

Як свідчать формули (27), термонапруження  $\sigma_r^{(2)}(r)$ ,  $\sigma_\phi^{(2)}(r)$  в матриці дорівнюють одне одному за модулем, мають різні знаки та спадають обернено пропорційно  $r^2$ . Остання властивість

погоджується з принципом Сен-Венана про характер спадання в пружних тілах напружень, викликаних самозрівноваженою системою сил. Важливо відзначити також, що при порівняно помірній зміні температури на  $T = 50^\circ \text{C}$  максимальні додаткові внутрішньоструктурні термонапруження  $\sigma_r^{(2)}(r_1)$ ,  $\sigma_\phi^{(2)}(r_1)$  в матриці далекі від граничних значень  $[\sigma]_{\text{мат}}$ , наведених у Табл. 1. Однак їхній вклад в загальний напружений стан системи може бути відчутним при спільній дії з загальними експлуатаційними навантаженнями. Тому в загальному випадку прояв цих термонапружень бажано враховувати.

**Таблиця 2** – Значення параметрів термонапруженого стану системи при однорідному полі температур

**Table 2** – Values of the parameters of the thermal stress state of the system at a uniform temperature field

№ п.п.	Полімерний матеріал матриці	$r_1$ нм	$10^4 u_1$ нм	$10^2 N_\phi$ Н/м	$N_z$ Н/м	$\sigma_r^{(2)}(r_1)$ МПа	$\sigma_\phi^{(2)}(r_1)$ , МПа	$\sigma_z^{(2)}(r_1)$ МПа
1	Епоксидна смола	1	6,190	0,7125	-0,1785	7,113	-7,113	-18,11
		5	40,32	8,372	-0,1633	6,912	-6,912	-18,11
2	Поліамід	1	6,241	0,8989	-0,1782	8,994	-8,994	-28,61
		5	35,86	4,397	-0,1712	8,291	-8,291	-28,61
3	Фенолформальдегід	1	6,101	0,3784	-0,1792	3,784	-3,784	-7,839
		5	32,44	1,832	-0,1763	3,663	-3,663	-7,839
4	Поліефір	1	6,463	1,736	-0,1765	17,67	-17,67	-45,75
		5	41,16	8,933	-0,1638	16,74	-16,74	-45,75
5	Полікарбонат	1	6,176	0,6619	-0,1792	6,619	-6,619	-17,64
		5	34,33	3,249	-0,1654	6,499	-6,499	-17,64
6	Полістирол	1	5,734	0,9836	-0,1780	9,837	-9,837	-23,56
		5	36,39	4,795	-0,1704	9,591	-9,591	-23,56
7	Поліпропілен	1	6,228	0,8551	-0,2156	8,611	-8,611	-32,99
		5	35,66	4,243	-0,1715	8,486	-8,486	-32,99

**Термонапружений стан системи при неоднорідному температурному полі.**

Як зазначено вище, карбонові нанотрубки поряд з особливими механічними властивостями, володіють також специфічною фізичною властивістю вкрай високої теплопровідності в осьовому напрямі та занадто низькою тепловіддачею з її бічної поверхні. У зв'язку з цією особливістю можливі ситуації, коли на деяких ділянках нанотрубки при інтенсивних теплових потоках вздовж осі температура трубки і матриці не встигає вирівнятись і виявляється розривною. В термопружності такий випадок є менш сприятливим і має бути розглянутим додатково.

Нехай  $T_1$  – температура нанотрубки,  $T_2$  – температура матриці. Тоді при моделюванні термопружного деформування системи у всіх співвідношеннях, що включають доданки з множниками  $\alpha_1 T$  та  $\alpha_2 T$ , їх можна замінити множниками  $\alpha_1 T_1$  і  $\alpha_2 T_2$ , відповідно. В результаті після аналогічних послідовних перетворень замість (21), (25) отримаємо рівності

$$C_1 = \frac{(3\lambda_2 + 2\mu_2)}{2(\lambda_2 + \mu_2)} \alpha_2 T_2,$$

$$C_2 = -\frac{\frac{E_1 h}{(1-\nu_1^2)} C_1 - \frac{E_1 h}{(1-\nu_1)} \alpha_1 T_1}{\frac{E_1 h}{r_1^2(1-\nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1}}. \quad (28)$$

Аналогічні зміни отримають вирази (8) для обчислення зусиль в оболонці нанотрубки

$$N_\varphi = \frac{E_1 h}{1-\nu_1^2} \left[ \frac{u_1}{r_1} - (1+\nu_1) \alpha_1 T_1 \right],$$

$$N_z = \frac{E_1 h}{1-\nu_1^2} \left[ \nu_1 \frac{u_1}{r_1} - (1+\nu_1) \alpha_1 T_1 \right], \quad (29)$$

і вирази (11) для обчислення напружень в матричному середовищі 2

$$\sigma_r^{(2)}(r) = \frac{2E_1 h \mu_2}{r^2(1-\nu_1)} \left[ \frac{C_1}{(1+\nu_1)} - \alpha_1 T_1 \right] \left/ \left[ \frac{E_1 h}{r_1^2(1-\nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1} \right], \right.$$

$$\sigma_\varphi^{(2)}(r) = -\frac{2E_1 h \mu_2}{r^2(1-\nu_1)} \left[ \frac{C_1}{(1+\nu_1)} - \alpha_1 T_1 \right] \left/ \left[ \frac{E_1 h}{r_1^2(1-\nu_1^2)} + \frac{2\mu_2}{r_1} \right], \right. \quad (30)$$

$$\sigma_z^{(2)}(r) = \lambda_2 C_1 - (3\lambda_2 + 2\mu_2) \alpha_2 T_2.$$

В якості прикладу розглянемо випадок, коли приріст температури середовища 2 склав  $T = 50^\circ \text{C}$ , а температура нанотрубки в наслідок слабкої теплопередачі через її бічну поверхню змінилась тільки на  $T_1 = 25^\circ \text{C}$ . При цьому зупинимось на випадках поліамідної, поліефірної і поліпропіленової матриць, для яких прирости напружень в Табл.2 виявились найбільшими. Результати обчислень наведені в Табл. 3.

**Таблиця 3** – Значення параметрів термонапруженого стану системи при неоднорідному полі температур

**Table 3** – Values of the parameters of the thermal stress state of the system at a non-uniform temperature field

№ п.п.	Полімерний матеріал матриці	$r_1$ нм	$10^4 u_1$ нм	$10^2 N_\varphi$ Н/м	$N_z$ Н/м	$\sigma_r^{(2)}(r_1)$ МПа	$\sigma_\varphi^{(2)}(r_1)$ МПа	$\sigma_z^{(2)}(r_1)$ МПа
1	Поліамід	1	3,256	0,9624	-0,088	9,604	-9,604	-14,92
		5	21,28	4,706	-0,0805	9,412	-9,412	-14,92
2	Поліефір	1	3,493	1,848	-0,1073	18,48	-18,48	-45,17
		5	26,85	8,896	-0,086	17,79	-17,79	-45,17
3	Поліпропілен	1	3,236	0,8844	-0,088	8,844	-8,844	-32,99
		5	20,84	4,350	-0,081	8,759	-8,759	-32,99

Зауважимо, що як і варто було очікувати, двократне зменшення температури нанотрубки призвело до майже двократного зменшення її радіальних переміщень  $u_1$ . При цьому колові зусилля  $N_\varphi$  змінились несуттєво, а термонапруження  $\sigma_r^{(2)}(r_1)$ ,  $\sigma_\varphi^{(2)}(r_1)$  в середовищі матриці зросли від 4% до 14%.

### Висновки

1. На базі методів термопружності поставлена задача про зародження внутрішньоструктурних термонапружень в полімерних матеріалах, що армовані карбоновими нанотрубками в умовах зміни в них однорідних і неоднорідних полів температур. Для опису термодформування нанотрубки використовується модель циліндричної оболонки зі зведеними параметрами товщини, модуля пружності, коефіцієнта Пуасона і коефіцієнта лінійного термічного розширення, полімерна матриця розглядається як пружне середовище. Сформульована система розв'язувальних рівнянь, побудовані її розв'язки в замкненій формі.

2. Обчислені внутрішньоструктурні термонапруження в матриці, що складаються з епоксидної смоли, поліаміду, фенолформальдегіду, полієфіру, полікарбонату, полістирола і поліпропілену. Розглянуто два випадки, коли температура всієї системи змінилась на  $50^\circ\text{C}$  і коли температура стінки нанотрубки змінилась на  $25^\circ\text{C}$ , а матеріал матриці додатково нагрівся на  $50^\circ\text{C}$ . В обох випадках найбільші значення радіальних і колових термонапружень в матриці реалізуються на інтерфейсній поверхні, вони однакові за абсолютною величиною, мають різні знаки та спадають обернено пропорційно квадрату радіуса. При цьому термонапруження, орієнтовні в осьовому напрямі, значно перевищують радіальні та колові термонапруження. У всіх випадках обчислені термонапруження, хоча і є помітними, менші ніж їх граничні значення і лише іноді наближаються до них.

3. Виконані дослідження свідчать про те, що в наслідок несумісності термомеханічних параметрів карбонових нанотрубок і полімерних матеріалів при зміні температур фаз композиту на їх основі використання нанотрубок в якості арматури може призводити не тільки до збільшення механічної міцності системи, але також і до зародження на інтерфейсних поверхнях додаткових концентраторів внутрішньоструктурних термонапружень, які при спільній дії з експлуатаційними навантаженнями можуть викликати локальні нанопошкодження.

### Перелік посилань

1. Gupta S.S, Bosco F., Batra R.C. Wall thickness and elastic moduli of single-walled carbon nanotubes from frequencies of axial, torsional and inextensional modes of vibration. *Computational Materials Science*. 2010. 47. pp. 1049-1059.
2. Monteiro A.O, Cachim P.B., Costa P.M. Mechanics of filled carbon nanotubes. *Diamond and Related Materials*. 2014. 44. pp. 11-25.
3. Dai L, Sun J. Mechanical properties of carbon nanotubes-polymer composites. Open access peer-reviewed chapter in the book *Carbon Nanotubes - Current Progress of their Polymer Composites*. 2016.
4. Zhidong Han, Alberto Fina. Thermal conductivity of carbon nanotubes and their polymer nanocomposites: A review/ *Progress in Polymer Science*. 2011, V.36, №7, pp. 914-944. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2010.11.004>
5. Han Z., Fina A. Thermal conductivity of carbon nanotubes and their polymer nanocomposites: A Review. *Progress in Polymer Science*. 2011. V. 36 (7). pp. 914-944.
6. Kwon YK., Kim P. Unusually high thermal conductivity in carbon nanotubes. Chapter in the book *High Thermal Conductivity Materials*. Springer, New York, NY. pp. 227-265.

7. Wang P., Xiang R., Maruyama S. Chapter two - thermal conductivity of carbon nanotubes and assemblies. *Advances in Heat Transfer*, Elsevier. 2018. V. 50. pp. 43-122.
8. Шлюнь Н.В., Заєць Ю.О. Про внутрішній механізм термопошкоджень в армованих композитах з термомеханічною несумісністю їх фаз. *Вісник Національного транспортного університету. Серія «Технічні науки»*. Науковий журнал. Київ. 2022. Вип. 3(53). – С. 427-432.
9. Elwardany M., Planche J.-P., King G. Universal and practical approach to evaluate asphalt binder resistance to thermally-induced damage. *Construction and Building Materials*. 2020, V.255, pp. 1-18.
10. Elwardany M.D., King G., Planche J.P., Rodezno C., Christensen D., Fertig Ill R.S., Kuhn K.H., Bhuiyan F.H. Internal restraint damage mechanism for age-induced pavement surface damage. *Asphalt Paving Technol. J. Assoc. Asphalt Paving Technol.* 2019, V.88.
11. Коваленко А.Д. Основы термоупругости. Киев, Наукова думка, 1970. 307 с.
12. Гуляев В.І., Мозговий В.В., Шлюнь Н.В., Заєць Ю.О., Білобрицька О.І., Шевчук Л.В. Внутрішньоструктурні термонапруження в композитах з термомеханічно несумісними параметрами їх фракцій. Київ, Ліра-К, 2023. 302 с.
13. Gulyayev V.I., Mozgovyi V.V., Shlyun N.V., Shevchuk L.V., Bilobrytska O.I. Negative thermomechanical effects in granular composites with incompatible thermomechanical parameters of their components. *International Review of Mechanical Engineering*. 2022. 16(4). pp. 188–197. <https://doi.org/10.15866/ireme.v16i4.21996>.
14. Qian D., Wagner G.J., Liu W.K., Yu M.F., Ruoff R. S. Mechanics of carbon nanotubes. *Applied Mechanics Reviews*. 2002. 55(6). pp. 495-532.

#### THERMOMECHANICAL DEFORMATION OF CARBON NANOTUBES IN POLYMER MATRIXES

Nataliia Shlyun, Ph.D., Associate Prof., National Transport University, Kyiv, Ukraine

<https://orcid.org/0000-0003-1040-8870>

Julia Zaiets, Ph.D., Associate Prof. National Transport University, Kyiv, Ukraine

<https://orcid.org/0000-0003-1836-2010>

**Annotation:** A theoretical study of the effects of nucleation of intrastructural thermal stresses in polymer materials reinforced with carbon nanotubes, caused by thermomechanical incompatibility of materials, was performed. Differential equations of its thermoelastic interaction with epoxy, polyamide, phenol-formaldehyde, polyester, polycarbonate, polystyrene, and polypropylene media in uniform and non-uniform temperature fields were constructed on the basis of modeling of a nanotube with an elastic cylindrical shell with aggregated values of thickness, modulus of elasticity, Poisson's ratio, and coefficient of linear thermal expansion. The solutions of these equations are found in closed form. The distribution functions of thermal stresses in the matrix medium and thermal forces in the nanotube wall are constructed. It was demonstrated that the thermal stresses in the matrix medium have the form of concentrators on the interface surface between the phases of the system and decrease inversely proportional to the square of the distance to the axis of the nanotube. It is shown that the intensities of these thermal stresses increase with increasing incompatibility of the thermomechanical parameters of the system phases.

**Key words:** carbon nanotubes, polymer materials, thermomechanical incompatibility, intrastructural thermal stresses, mathematical modeling, stress concentrators.

### References

1. Gupta S.S, Bosco F., Batra R.C. Wall thickness and elastic moduli of single-walled carbon nanotubes from frequencies of axial, torsional and inextensional modes of vibration. *Computational Materials Science*. 2010. 47. pp. 1049-1059.
2. Monteiro A.O, Cachim P.B., Costa P.M. Mechanics of filled carbon nanotubes. *Diamond and Related Materials*. 2014. 44. pp. 11-25.
3. Dai L, Sun J. Mechanical properties of carbon nanotubes-polymer composites. Open access peer-reviewed chapter in the book *Carbon Nanotubes - Current Progress of their Polymer Composites*. 2016.
4. Zhidong Han, Alberto Fina. Thermal conductivity of carbon nanotubes and their polymer nanocomposites: A review/ *Progress in Polymer Science*. 2011, V.36, №7, pp. 914-944. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2010.11.004>
5. Han Z., Fina A. Thermal conductivity of carbon nanotubes and their polymer nanocomposites: A Review. *Progress in Polymer Science*. 2011. V. 36 (7). pp. 914-944.
6. Kwon YK., Kim P. Unusually high thermal conductivity in carbon nanotubes. Chapter in the book *High Thermal Conductivity Materials*. Springer, New York, NY. pp. 227-265.
7. Wang P., Xiang R., Maruyama S. Chapter two - thermal conductivity of carbon nanotubes and assemblies. *Advances in Heat Transfer*, Elsevier. 2018. V. 50. pp. 43-122.
8. Шлюнь Н.В., Заєць Ю.О. Про внутрішній механізм термопошкоджень в армованих композитах з термомеханічною несумісністю їх фаз. *Вісник Національного транспортного університету. Серія «Технічні науки»*. Науковий журнал. Київ. 2022. Вип. 3(53). – С. 427-432.
9. Elwardany M., Planche J.-P., King G. Universal and practical approach to evaluate asphalt binder resistance to thermally-induced damage. *Construction and Building Materials*. 2020, V.255, pp. 1-18.
10. Elwardany M.D., King G., Planche J.P., Rodezno C., Christensen D., Fertig Ill R.S., Kuhn K.H., Bhuiyan F.H. Internal restraint damage mechanism for age-induced pavement surface damage. *Asphalt Paving Technol. J. Assoc. Asphalt Paving Technol*. 2019, V.88.
11. Коваленко А.Д. Основы термоупругости. Киев, Наукова думка, 1970. 307 с.
12. Гуляев В.І., Мозговий В.В., Шлюнь Н.В., Заєць Ю.О., Білобрицька О.І., Шевчук Л.В. Внутрішньоструктурні термонапруження в композитах з термомеханічно несумісними параметрами їх фракцій. Київ, Ліра-К, 2023. 302 с.
13. Gulyayev V.I., Mozgovyi V.V., Shlyun N.V., Shevchuk L.V., Bilobrytska O.I. Negative thermomechanical effects in granular composites with incompatible thermomechanical parameters of their components. *International Review of Mechanical Engineering*. 2022. 16(4). pp. 188–197. <https://doi.org/10.15866/ireme.v16i4.21996>.
14. Qian D., Wagner G.J., Liu W.K., Yu M.F., Ruoff R. S. Mechanics of carbon nanotubes. *Applied Mechanics Reviews*. 2002. 55(6). pp. 495-532.