

УДК 539.3

## АНАЛІЗ ТЕРМОМЕХАНІЧНОЇ НЕСУМІСНОСТІ ФУЛЕРЕНІВ З ПОЛІМЕРНИМИ МАТРИЦЯМИ КОМПОЗИТІВ

**Н.В. Шлюнь,**

канд. техн. наук, доцент

*Національний транспортний університет,  
вул. М. Омеляновича-Павленка, 1, Київ, 01010*

DOI: 10.32347/2410-2547.2024.112.139-148

На базі методів теорії термопружності досліджені ефекти зародження внутрішньоструктурних термонапружень в полімерних композитах, армованих карбоновими фулеренами. Для сферичної оболонкової моделі фулерену сформульовані диференціальні рівняння його термопружного деформування, зумовленого контактною взаємодією з полімерною матрицею. В замкненій формі побудовані їх розв'язки, що визначають переміщення, деформації та напруження у фракціях системи, викликані зміною її температури. Досліджено вплив несумісності термомеханічних характеристик матриці та зведених (ефективних) значень товщини, модуля пружності і коефіцієнта лінійного термічного розширення оболонки фулерену на термодформування фулерену. Показано, що радіальні прогини стінки фулерену практично дорівнюють їх простим вільним термічним переміщенням, в той час як термонапруження в матриці максимальні на контактній інтерфейсній поверхні та спадають пропорційно кубу радіальної координати.

**Ключові слова:** полімерні композити, фулерени, ефективні характеристики, термомеханічна несумісність.

**1. Вступ.** Фулерени є алотропною формою вуглецю, в яких молекули його атомів поєднані одиничними та подвійними в'язями. Встановлено, що молекули фулеренів можуть мати різні форми та розміри. Найбільш поширені форми фулеренових молекул являють собою порожні сфери, еліпсоїди та циліндричні трубки. Емпірична форма для молекул фулерену позначається  $C_n$ , де  $n$  означає число атомів вуглецю в молекулі. Перші згадування про сферичну молекулу  $C_{60}$  було опубліковано Krotoetal в 1985 р. Пізніше група фулеренів була розширена за рахунок карбонових нанотрбок. Постійно зростаючі вимоги щодо створення легких матеріалів з високою питомою міцністю, жорсткістю та спеціальними фізико-механічними властивостями в автомобільній, аерокосмічній та інших технічних галузях прискорили розвиток та використання нанокмполімерів на основі полімерних та металевих матриць [4, 7, 11]. Їх стали ширше застосовувати також в мікроелектроніці, оптиці та медицині.

Композитні матеріали на основі полімерних матриць, армовані фулеренами, являють собою конструкційні структури, що призначені для функціонування в умовах впливу на них механічних (силових) та температурних факторів. На практиці їх здатність зберігати механічну міцність в умовах експлуатації встановлюється методами механіки суцільних середовищ. Однак для композитів, армованих фулеренами, ці задачі суттєво ускладнюються, так як сітчаста будова наномолекул не є суцільною й їх механічна взаємодія з пружним суцільним середовищем матриці має свої особливості. Для подолання цих особливостей сферичні та циліндричні сітчасті конструкції фулеренів та нанотрбок, які практично не мають товщини (їхня товщина дорівнює розміру одного атома), моделюються суцільними пружними сферичними та циліндричними оболонками [3, 5] зі зведеними (ефективними, еквівалентними) значеннями товщини, модуля пружності, коефіцієнта Пуассона і коефіцієнта лінійного термічного розширення [6]. Із застосуванням такої моделі досліджено пружне деформування, коливання і частотні спектри фулеренів [6, 8-10, 12].

Однією з особливостей застосування полімерних композитів, армованих фулеренами, є можливість їх використання в діапазонах зміни температури від  $-55^{\circ}\text{C}$  до  $+200^{\circ}\text{C}$ , хоча в деяких матеріалах (наприклад, що застосовуються в аерокосмічній техніці) вони можуть експлуатуватися і при більш низьких та більш високих їх значеннях. У цих випадках додатково до силових навантажень вони можуть піддаватися і до термічних впливів, серед яких можна виділити три механізми термодформування та ініціювання термонапружень: зовнішній, внутрішній і термоградієнтний [1]. Відповідно до цієї доктрини, якщо в однорідному пружному

середовищі, яке обмежене поверхнями довільної геометрії й вільне від зовнішніх в'язей, що заважають його вільному деформуванню, температура розподіляється за лінійним законом в якому-небудь напрямку, то термонапруження в ньому дорівнюють нулю. Якщо хоча б одну із цих умов порушено, то в середовищі генеруються термонапруження. При цьому, якщо на граничні поверхні накладені зовнішні в'язі, що заважають її термодформуванню, то механізм зародження термонапружень називається зовнішнім. У випадку, коли середовище є неоднорідним, навіть за відсутності в'язей і постійному полі температур, зароджуються внутрішньоструктурні термонапруження та механізм, що їх викликає називається внутрішнім. Дія градієнтного механізму проявляється при полях температур, що відмінні від лінійних за просторовими координатами.

Серед цих механізмів найменш вивченим являється внутрішній, оскільки, зазвичай внутрішньоструктурні термонапруження та пошкодження, що ним викликаються, є прихованими, на них звертають увагу, коли руйнування охопили значні зони і природа їх виникнення перестала бути прихованою. Найчастіше такі ситуації виникають в композитних матеріалах з термомеханічними несумісними фазами [1]. У зв'язку з тим, що в армованих полімерних композитах фулерени володіють порівняно низьким коефіцієнтом лінійного термічного розширення ( $\alpha \approx 1,0 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ ), а у полімерів вони бувають на порядок більше, і в той же час механічна жорсткість фулеренів набагато перевищує цей показник матриці, можна очікувати, що така несумісність вказаних компонент при суттєвих перепадах температури може призвести до помітних додаткових термонапружень. Мета даної роботи полягає у перевірці можливості прояву внутрішнього механізму ініціювання термонапружень в полімерних композитах, армованих фулеренами.

**2. Оболонкова модель термодформованого фулерену.** Для формування розрахункової моделі термопружного деформування решітчастої конструкції молекули фулерену в полімерній матриці використовуються співвідношення тонких пружних оболонок і теорії термопружності [2]. В природному стані фулерен являє собою багатогранну решітчасту сферичну структуру (рис. 1 (а)) з п'ятикутними чи шестикутними гранями, у вершинах якої знаходяться атоми вуглецю.

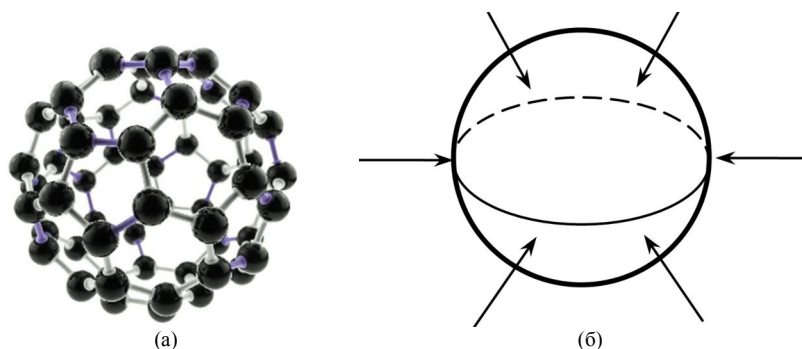


Рис. 1. Геометричні схеми молекули фулерену (а) та її оболонкової моделі (б)

Кодування таких структур здійснюється за числом атомів, починаючи з  $C_{20}$  і продовжуючи до  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ , ...,  $C_{2160}$ , ...,  $C_{4860}$ . Найбільш стійкими та дослідженими є  $C_{60}$  і  $C_{70}$ . Діаметр  $C_{60}$ , що вимірюється між атомами його поверхні, складає 0,71 нм. Зі збільшенням номеру фулерену його діаметр збільшується і може становити декілька нанометрів.

Сферичну оболонкову модель будемо будувати у сферичній системі координат  $Or\varphi\theta$  (рис. 2) з початком у центрі сфери.

Розглянемо випадок, коли навантаження та напружений стан оболонки симетричні відносно осі  $Oz$ . Перерізами  $\varphi = const$ ,  $\theta = const$  виділимо елемент поверхні оболонки товщиною  $h$ , прикладемо до нього зовнішнє нормальне навантаження інтенсивністю  $q_r$ , внутрішні зусилля  $N_\varphi$ ,  $N_\theta$ , згинні моменти  $M_\varphi$ ,  $M_\theta$  та перерізуючу силу  $Q_\theta$  ( $Q_\varphi = 0$ ).

Позначимо  $r_1$  радіус серединної поверхні оболонки і  $s$  координатну лінію, напрямлену вздовж меридіана сфери, на якій координата  $s$  дорівнює довжині дуги меридіана, що вимірюється від деякої нульової точки. Тоді, розглядаючи рівновагу сил та моментів (рис. 3), прикладених до виділеної ділянки поверхні можна написати рівняння [2]

$$\begin{aligned} \frac{dN_\theta}{d\theta} - N_\varphi \cos \theta + Q_\theta &= 0, \\ \frac{dM_\theta}{d\theta} - M_\varphi \cos \theta - Q_\varphi r &= 0, \\ \frac{dN_\theta}{d\theta} - N_\varphi \sin \theta - N_\theta + q_r r &= 0. \end{aligned} \tag{1}$$

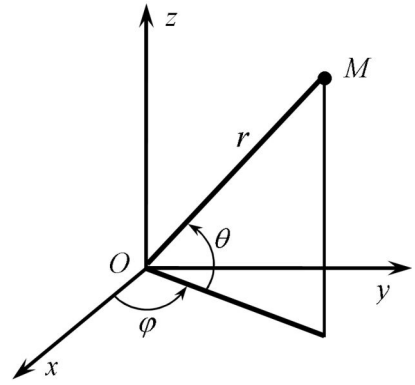


Рис. 2. Схема сферичної системи координат

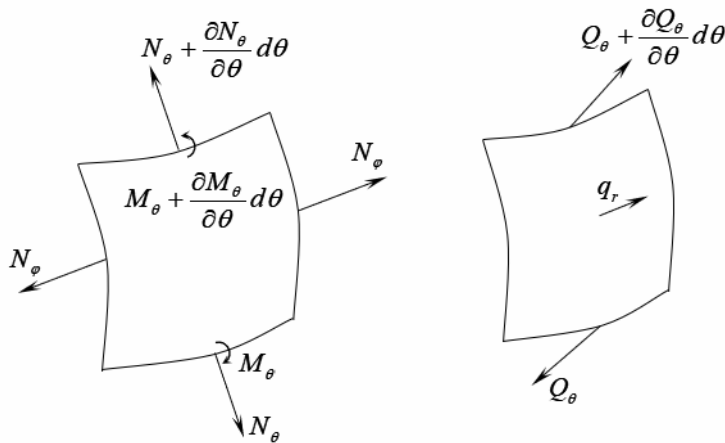


Рис. 3. Схема силових факторів, що діють на оболонковий елемент

Зусилля та моменти, що тут використовуються, визначаються формулами

$$\begin{aligned} N_\theta &= \frac{Eh}{1-\nu^2} [\varepsilon_\theta + \nu\varepsilon_\varphi - (1+\nu)\alpha T], \\ N_\varphi &= \frac{Eh}{1-\nu^2} [\varepsilon_\varphi + \nu\varepsilon_\theta - (1+\nu)\alpha T], \\ M_\theta &= \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} (\kappa_\theta + \nu\kappa_\varphi), \quad M_\varphi = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} (\kappa_\varphi + \nu\kappa_\theta), \end{aligned} \tag{2}$$

де  $E$  – модуль пружності;  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона;  $h$  – товщина оболонки;  $\varepsilon_\theta, \varepsilon_\varphi$  – відносні деформації у відповідних напрямках;  $\kappa_\theta, \kappa_\varphi$  – зміни кривизн;  $\alpha$  – коефіцієнт лінійного термічного розширення;  $T$  – зміна температури.

Для наочності силової моделі оболонки на рис. 4 наведена схема меридіонального перерізу її напівсфери з діючими зусиллями та моментами.

В нашому випадку розглядається деформування оболонки, що викликане

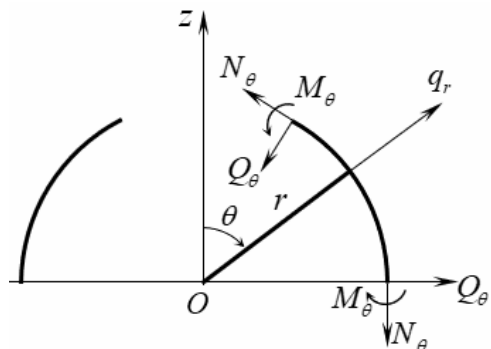


Рис. 4. Схема меридіонального перерізу напівсфери

контактною взаємодією з навколишнім її пружним середовищем при зміні температури  $T$  всієї системи. Тому оболонка знаходиться в мембранному напруженому стані її мембранні переміщення дорівнюють нулю, а радіальні переміщення  $u(\theta, \varphi)$  однакові у всіх точках. У зв'язку з цим

$$\varepsilon_{\theta} = \frac{u}{r}, \quad \varepsilon_{\varphi} = \frac{u}{r}, \quad \kappa_{\theta} = 0, \quad \kappa_{\varphi} = 0. \quad (3)$$

В цих умовах мають місце рівності

$$M_{\theta} = M_{\varphi} = 0, \quad Q_{\theta} = 0. \quad (4)$$

Перші два рівняння системи (1) задовольняються тотожно, а третє рівняння набуває форму

$$-N_{\varphi} \sin \theta - N_{\theta} + q_r r = 0. \quad (5)$$

Щоб не будувати за допомогою рівностей (3) та (5) диференціальні рівняння, розглянемо напівсферу на рис. 4 із замкненим апексом та спроектуємо всі сили на вісь  $Oz$ . Тоді за допомогою (5) та рис. 4 отримаємо

$$-N_{\theta} 2\pi r + q_r \pi r^2 = 0, \quad (6)$$

звідки

$$N_{\theta} = N_{\varphi} = (q_r r)/2. \quad (7)$$

Використовуючи (2) і (3), перетворимо (7) до вигляду

$$N_{\theta} = N_{\varphi} = \frac{Eh}{1-\nu} \left( \frac{u}{r} - \alpha T \right) = \frac{q_r r}{2}. \quad (8)$$

За допомогою (8) знаходимо радіальне переміщення  $u$  сферичної оболонки, що піддана дії рівномірно розподіленого радіального навантаження  $q_r$ , при зміні її температури на величину  $T$ :

$$u = \frac{(1-\nu)q_r r^2}{2Eh} + \alpha r T. \quad (9)$$

Тут необхідно акцентувати увагу на те, що застосування формул теорії суцільних пружних сферичних оболонок (2), (8), (9) до задач деформування фулеренів з дискретною решітчастою структурою, в якій поняття товщини стінки, модуля пружності та коефіцієнта Пуассона матеріалу є умовними, базуються на численних експериментальних прямих та опосередкованих моделюваннях. У зв'язку з цим, в оболонковій моделі фулерену не використовується поняття товщини  $h$  оболонки і модуля пружності  $E$  її матеріалу, а вводиться величина  $Eh$ , яку можна виміряти безпосередньо на реальних мембранних та оболонкових (нанотрубках та наносферах) наноструктурах. Так, для фулеренів визначено  $Eh \approx 3,30 \text{ ТПа}\cdot\text{А}$ ,  $\nu \approx 0,14-0,2$ . Коефіцієнт лінійного термічного розширення фулеренів при кімнатній температурі  $\alpha \approx 1,0 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$ , однак він збільшується зі зростанням температури, а при дуже низьких температурах стає від'ємним.

**3. Термодформування фулерену в матриці полімерного композиту.** При аналізі термодформування фулерену в полімерній матриці будемо вважати її пружним середовищем. Для розрахунку використовуємо сферичну систему координат  $Or\varphi\theta$ . Вважаємо, що сферична

оболонка фулерену 1 радіусу  $r_1$  включена до пружного середовища 2 (рис. 5), розміри якого необмежені.

Термонапружений стан середовища 2 визначається нормальними напруженнями  $\sigma_r^{(2)}$ ,  $\sigma_{\varphi}^{(2)}$ ,  $\sigma_{\theta}^{(2)}$ , які в даному випадку зручно описувати (на відміну від оболонки 1) за допомогою параметрів Ламе  $\lambda_2$  і  $\mu_2$  [2]

$$\sigma_r^{(2)}(r) = (\lambda_2 + 2\mu_2)\varepsilon_r^{(2)} + \lambda_2(\varepsilon_{\varphi}^{(2)} + \varepsilon_{\theta}^{(2)}) - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \quad (10)$$

$$\sigma_{\varphi}^{(2)}(r) = \sigma_{\theta}^{(2)}(r) = \lambda_2 \varepsilon_r^{(2)} + 2(\lambda_2 + \mu_2)\varepsilon_{\varphi}^{(2)} - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T,$$

Відносні деформації  $\varepsilon_r^{(2)}$ ,  $\varepsilon_{\varphi}^{(2)}$ ,  $\varepsilon_{\theta}^{(2)}$ , що тут

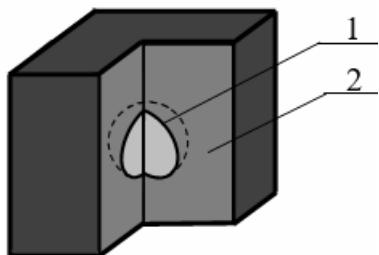


Рис. 5. Схема сферичної оболонки фулерену 1 у пружному середовищі 2

використовуються, виражаються через радіальне переміщення

$$\varepsilon_r^{(2)}(r) = \frac{du_2}{dr}, \quad \varepsilon_\varphi^{(2)}(r) = \varepsilon_\theta^{(2)}(r) = \frac{u_2}{r}, \quad (11)$$

Рівняння термопружної рівноваги елемента середовища 2 представимо у вигляді [2]

$$\frac{d\sigma_r}{dr} + \frac{2\sigma_r - \sigma_\varphi - \sigma_\theta}{r} = 0 \quad (r > r_1), \quad (12)$$

Використовуючи заміни (11), (12), придамо йому форми:

$$\frac{d^2u_2}{dr^2} + \frac{2du_2}{rdr} - \frac{2}{r^2}u_2 = 0 \quad (r > r_1). \quad (13)$$

Рівняння (13) зводиться до вигляду, більш зручного для інтегрування

$$\frac{d}{dr} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 u_2) \right] = 0 \quad (r > r_1). \quad (14)$$

Після двократного інтегрування (14) отримаємо його загальний розв'язок

$$u_2(r) = rC_1 + \frac{1}{r^2}C_2 \quad (r > r_1), \quad (15)$$

де  $C_1$  і  $C_2$  – константи інтегрування.

Таким чином, рівності (9) і (15) визначають загальні розв'язки задач про контактне деформування оболонки фулерену та пружного середовища з центральною симетрією при зміні температури на величину  $T$ . Щоб описати їх спільне деформування, необхідно визначити константи  $q_r$ ,  $C_1$  і  $C_2$  з умов контактної взаємодії тіла 1 та середовища 2 на поверхні  $r = r_1$

$$\begin{aligned} u_1 &= u_2(r_1), \\ q_r &= \sigma_r^{(2)}(r_1), \end{aligned} \quad (16)$$

та умови рівності нулю термонапруження  $\sigma_r^{(2)}(r)$  на нескінченності:

$$\sigma_r^{(2)}(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (17)$$

Для цього виразимо деформації (11) через переміщення (15)

$$\begin{aligned} \varepsilon_r^{(2)}(r) &= C_1 - \frac{2}{r^3}C_2, \\ \varepsilon_\varphi^{(2)}(r) &= \varepsilon_\theta^{(2)}(r) = C_1 + \frac{1}{r^3}C_2 \end{aligned} \quad (18)$$

і підставимо їх у праві частини рівностей (10)

$$\begin{aligned} \sigma_r^{(2)}(r) &= (3\lambda_2 + 2\mu_2)C_1 - \frac{4\mu_2}{r^3}C_2 - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T, \\ \sigma_\varphi^{(2)}(r) &= \sigma_\theta^{(2)}(r) = (3\lambda_2 + 2\mu_2)C_1 + \frac{2\mu_2}{r^3}C_2 - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T. \end{aligned} \quad (19)$$

З умови (17) у зв'язку з (19) маємо

$$(3\lambda_2 + 2\mu_2)C_1 - (3\lambda_2 + 2\mu_2)\alpha_2 T = 0 \quad (20)$$

і

$$C_1 = \alpha_2 T. \quad (21)$$

Для використання першої умови в системі (16) до відповідних символів в рівнянні (9) додамо індекс 1. Тоді, враховуючи (21), отримаємо

$$u_1 = \frac{(1-\nu_1)q_r r_1^2}{2E_1 h_1} + \alpha_1 r_1 T = \alpha_2 r_1 T + \frac{1}{r_1^2}C_2. \quad (22)$$

За допомогою (19) і (21) перепишемо також другу умову системи (16)

$$q_r = -\frac{4\mu_2}{r_1^3}C_2. \quad (23)$$

З рівнянь (22), (23) знаходимо

$$C_2 = (\alpha_1 - \alpha_2)r_1^3T \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right., \quad (24)$$

$$q_r = -4\mu_2(\alpha_1 - \alpha_2)T \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right..$$

Знаючи константи  $C_1$  і  $C_2$ , визначасмо всі функції напружено-деформованого стану матриці 2

$$u_2(r) = r\alpha_2T + \frac{(\alpha_1 - \alpha_2)r_1^3T}{r^2} \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right., \quad (25)$$

$$\varepsilon_r^{(2)}(r) = \alpha_2T - \frac{2(\alpha_1 - \alpha_2)r_1^2T}{r^3} \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right., \quad (26)$$

$$\varepsilon_\varphi^{(2)}(r) = \varepsilon_\theta^{(2)}(r) = \alpha_2T + \frac{(\alpha_1 - \alpha_2)r_1^3T}{r^3} \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right., \quad (27)$$

$$\sigma_r^{(2)}(r) = -\frac{4\mu_2r_1^3(\alpha_1 - \alpha_2)T}{r^3} \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right., \quad (28)$$

$$\sigma_\varphi^{(2)}(r) = \sigma_\theta^{(2)}(r) = \frac{2\mu_2r_1^3(\alpha_1 - \alpha_2)T}{r^3} \left/ \left[ \frac{2(1 - \nu_1)\mu_2r_1}{E_1h_1} + 1 \right] \right..$$

З їх використанням обчислені переміщення  $u_1$  фулерену та термонапруження  $\sigma_r^{(2)}(r_1)$ ,  $\sigma_\varphi^{(2)}(r_1) = \sigma_\theta^{(2)}(r_1)$  в полімерних матрицях при заданому значенні  $T$  зміни температури системи.

**4. Результати досліджень.** Наведемо результати розрахунків термодетформованих станів полімерних матеріалів, армованих фулеренами, зумовлених термомеханічною несумісністю параметрів матриці та арматури. В якості матеріалів матриці виберемо фенолформальдегід, епоксидну смолу, полікарбонат, поліамід, полістирол, поліефір, поліпропілен. Відмітимо, що у загальному випадку їх термомеханічні властивості можуть залежати від їх складу, технології виготовлення та температури, тому в Таблиці 1 подані найбільш характерні значення їх параметрів Ламе  $\lambda$  і  $\mu$ , границь міцності  $[\sigma]_{\text{міц}}$  і коефіцієнтів лінійного термічного розширення  $\alpha$ .

Таблиця 1

Термомеханічні параметри полімерних матеріалів

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

Розміри фулеренів змінюються в широких межах у зв'язку з числом атомів від  $n = 60$  (для найбільш стійкого та вивченого) до  $n = 1 \cdot 10^4$ . При цьому для одношарових фулеренів їх радіуси набувають значення  $r_1 = 0,35; 0,8$  нм і вище, для багатошарових цибулин їх  $r_1$  знаходяться у межах від 2,5 до 5 нм. Хоча у виключних випадках він може досягати значення 50 нм. В наведених обчисленнях вважалось, що  $r_1 = 0,35$  і 0,8 нм,  $E_1h_1 = 330$  Н/м,  $\nu_1 = 0,18$ ,

$\alpha_1 = 1,0 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , температура системи змінювалась на величину  $T = 100^\circ \text{ C}$ . Результати обчислень наведені в Таблиці 2.

Таблиця 2

Значення параметрів термонапружених станів системи

|   | Полімерний матеріал матриці | $r_1$ , нм | $10^3 u_1$ , нм | $q_r$ , МПа | $10^3 N_\varphi$ , Н/м | $10^3 u_2(r_1)$ , нм | $\sigma_r^{(2)}(r_1)$ , МПа | $\sigma_\varphi^{(2)}(r_1)$ , МПа |
|---|-----------------------------|------------|-----------------|-------------|------------------------|----------------------|-----------------------------|-----------------------------------|
| 1 | Фенол-формальдегід          | 0,35       | 0,3519          | 12,45       | 2,179                  | 0,3519               | 12,45                       | -6,226                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8099          | 12,40       | 4,961                  | 0,8099               | 12,40                       | -6,202                            |
| 2 | Епоксидна смола             | 0,35       | 0,3532          | 20,75       | 3,632                  | 0,3532               | 20,75                       | -10,38                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8165          | 20,63       | 8,253                  | 0,8165               | 20,63                       | -10,34                            |
| 3 | Полікарбонат                | 0,35       | 0,3529          | 19,11       | 3,344                  | 0,3529               | 19,11                       | -9,555                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8152          | 19,07       | 7,630                  | 0,8152               | 19,07                       | -9,537                            |
| 4 | Поліамід                    | 0,35       | 0,3539          | 25,39       | 4,443                  | 0,3539               | 25,39                       | -12,69                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8201          | 25,33       | 10,133                 | 0,8201               | 25,33                       | -12,66                            |
| 5 | Полістирол                  | 0,35       | 0,3544          | 28,98       | 5,071                  | 0,3544               | 28,98                       | -14,49                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8230          | 28,90       | 11,56                  | 0,8230               | 28,90                       | -14,45                            |
| 6 | Полефір                     | 0,35       | 0,3577          | 50,62       | 8,859                  | 0,3577               | 50,62                       | -25,31                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8401          | 50,42       | 20,17                  | 0,8401               | 50,42                       | -25,21                            |
| 7 | Поліпропілен                | 0,35       | 0,3536          | 23,90       | 4,182                  | 0,3536               | 23,90                       | -11,95                            |
|   |                             | 0,8        | 0,8190          | 23,88       | 9,551                  | 0,8190               | 23,88                       | -11,94                            |

Для зручності співставлення цих даних позиції матеріалів розташовані в порядку збільшення їх коефіцієнту лінійного термічного розширення, що є основним параметром, який характеризує термомеханічну несумісність арматури та матриці.

Привертає до себе увагу та обставина, що у всіх випадках радіальне переміщення  $u_1$  фулерену практично не залежить від властивостей матеріалу матриці та залишається рівними приблизно 0,00035 і 0,0008 нм, відповідно, для першого та другого значень  $r_1$ . Це зумовлено тим, що механічна жорсткість фулерену набагато більша жорсткості кожного з полімерів, вони не перешкоджають його майже вільному термічному розширенню і його стінка переміщується на величини  $r_1 \alpha_1 T$ , рівних  $0,35 \cdot 1,0 \cdot 10^{-5} \cdot 100$  і  $0,8 \cdot 1,0 \cdot 10^{-5} \cdot 100$  відповідно.

Можна також виділити, що зі збільшенням  $\alpha$  термонапруження  $\sigma_r^{(2)}(r_1)$ ,  $\sigma_\varphi^{(2)}(r_1)$  в полімерній матриці на інтерфейсній поверхні  $r = r_1$  зростають, за виключенням позиції 7, що відрізняється вельми малим коефіцієнтом  $\mu_2$ , що також впливає на сумісність матеріалів. При заданій порівняно невеликій зміні температури  $T = 100^\circ \text{ C}$  ці напруження не досягли своїх граничних значень  $[\sigma]_{\text{міц}}$  (див. Табл. 1), крім можливо позиції 6. Однак при  $T = 200^\circ \text{ C}$  (також допустимого значення для полімерів) і його перевищення заграничні термонапруження можуть виникнути в епоксидній смолі, поліаміді, полістиролі, полефірі та поліпропілені.

Більш повне уявлення про небезпеку заграничних термонапружень може бути сформовано в результаті розгляду функцій (28) їх розподілення в тілі матриці в радіальному напрямі (рис. 6).

Вони спадають обернено пропорційно кубу відстані від центра сфери 1 і виявляються практично невідчутними на відстані  $r_1$  від її поверхні. Тому якщо навіть обчислені величини внутрішньоструктурних термонапружень перевищили їх границі міцності, то викликані ними тріщини мають довжини, що складають лише частку нанометра і вони сконцентровані в нано зоні в околі тіла

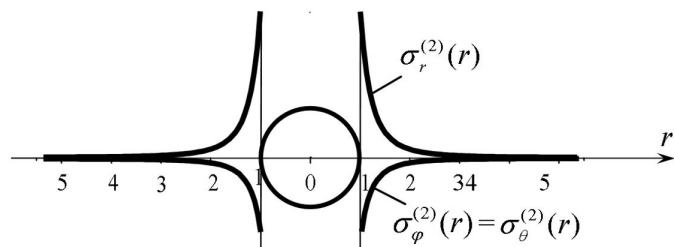


Рис. 6. Функції розподілення термонапружень в матеріалі матриці

фулерену. Крім того в результаті виникнення нанотріщин знімаються деформаційні несумісності і внутрішньоструктурні термонапруження перетворюються на нуль. При цьому, однак, губиться адгезія між тілом матриці та фулереном і його роль в армуванні композита стає нікчемною. В кінці цього аналізу відмітимо, що він наведений на основі уявлень, що використовуються в макропружності і без врахування ефектів пластичності, тим не менш, мабуть, він дозволяє виявити основні особливості механізму виникнення внутрішньоструктурних напружень в неоднорідній системі.

### Висновки

1. Поставлена задача про теоретичне виявлення ефектів зародження внутрішньоструктурних термонапружень полімерних композитах, армованих вуглецевими фулеренами, в умовах зміни температури системи. Для опису процесу термічного деформування решітчастої сферичної наномолекули використовується математична модель тонкої пружної сферичної оболонки зі зведеними характеристиками її товщини, модуля пружності, коефіцієнта Пуассона та коефіцієнта лінійного термічного розширення. Полімерна матриця розглядається як однорідне пружне середовище.

2. За допомогою методів термопружності сформульована система звичайних диференціальних рівнянь термодформування системи, що розглядається, з умовами контактної механічної взаємодії фракцій композиту на інтерфейсній поверхні їх сполучення. В замкненій формі побудовані розв'язки цих рівнянь, які характеризують пружне переміщення, деформації та напруження у фракціях композиту при заданих значеннях їх термомеханічних параметрів.

3. Побудовані розв'язки для різних полімерних матеріалів дозволяють зробити висновок, що суттєва різниця значень термомеханічних характеристик полімерних матриць та армованих фулеренів може призводити до несумісності термічних деформацій в композиті та виникненню в ньому значних внутрішньоструктурних напружень, які з підвищенням температури системи можуть досягати і навіть перевищувати границі міцності її матеріалу. При цьому, однак, зони концентрації цих напружень локалізуються в околах інтерфейсних поверхонь, а глибини проникнення викликаних ними пошкоджень не перевищують одного нанометра.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Гуляєв В.І., Мозговий В.В., Шлюнь Н.В., Засць Ю.О., Білобрицька О.І., Шевчук Л.В. Внутрішньоструктурні термонапруження в композитних матеріалах з термомеханічно несумісними параметрами їх фракцій, Ліра-К, 2023, 302 с.
2. Коваленко А.Д. Основы термоупругости: Киев: Наукова Думка, 1970. 239 с.
3. Ahmad S. Continuum elastic model of fullerenes and the sphericity of the carbon onion shells, The Journal of Chemical Physics, 2002, 116(8), 3396–3400. <https://doi.org/10.1063/1.1446428>
4. Esmaeel Ghavanloo, Hashem Rafii-Tabar, Ayesha Kausar, Georgios I. Giannopoulos, S. Ahmad Fazelzadeh. Experimental and computational physics of fullerenes and their nanocomposites: Synthesis, thermo-mechanical characteristics and nanomedicine applications, Physics Reports, 2023, V. 996, P.1-116. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2022.10.003>.
5. Ghavanloo E., Rafii-Tabar H., Fazelzadeh S.A. New insights on nonlocal spherical shell model and its application to free vibration of spherical fullerene molecules. Int J Mech Sci, 2019, 161–162:105046. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2019.105046>
6. Ghavanloo, E., Izadi, R. & Nayebi, A. Computational modeling of the effective Young's modulus values of fullerene molecules: a combined molecular dynamics simulation and continuum shell model. J Mol Model, 2018, 24, 71. <https://doi.org/10.1007/s00894-018-3623-x>
7. Harada S., Kozako M., Hikita M., Igarashi T. and Kaji H. Preparation of fullerene/epoxy resin composite with fine dispersion and its breakdown strength, International Symposium on Electrical Insulating Materials (ISEIM), Toyohashi, Japan, 2017, pp. 654-656. doi: 10.23919/ISEIM.2017.8166575.
8. Huang, N., Chen, Y., Xie, Y., Yang, W., Li, J., & Guo, H. Stiffening of double-shelled fullerene molecules under uniaxial strains. Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2024, 1–7. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2024.2329740>
9. Jamal-Omidi M., Shayanmehr M., Rafiee R. A study on equivalent spherical structure of buckyball-C60 based on continuum shell model, Lat. Am. J. Solids Struct., 2016, V. 13, no. 5, pp. 1016–1029. doi:10.1590/1679-78252508.
10. Kausar, A. Fullerene Reinforced Polymeric Nanocomposites for Energy Storage – Status and Prognoses. Front. Mater. 2022, 9, 150. <https://doi.org/10.3389/fmats.2022.874169>
11. Lixing Dai, Jun Sun. Mechanical properties of carbon nanotubes-polymer composites. In: Beber MR, Hafez IH, editors. Carbon nanotubes - Current progress of their polymer composites. IntechOpen, 2016. p. 1-41. <https://doi.org/10.5772/62635>
12. Shahriar Dastjerdi, Bekir Akgöz. On the statics of fullerene structures. International Journal of Engineering Science, 2019 142, P. 125-144. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2019.06.002>



## REFERENCES

1. *Gulyayev V.I., Mozgoviy V.V., Shlyun N.V., Zaets Yu.A., Bilobrytska O.I., Shevchuk L.V.* Vnutrishnostrukturni termopnapruzhenia v kompozytnykh materialakh z termomekhanichno nesumisnymy parametramy yikh fraktsii. (Intrastructural thermal stresses in composite materials with thermomechanically incompatible parameters of their fractions.) Lira-K, 2023, 302 pp.
2. Kovalenko A.D. *Osnovy termopruprostoty* (Basics of Thermoelasticity). Kyiv: Naukova Dumka, 1970. 239 p.
3. *Ahmad S.* Continuum elastic model of fullerenes and the sphericity of the carbon onion shells, *The Journal of Chemical Physics*, 2002, 116(8), 3396–3400. <https://doi.org/10.1063/1.1446428>
4. *Esmaeel Ghavanloo, Hashem Rafii-Tabar, Ayesha Kausar, Georgios I. Giannopoulos, S. Ahmad Fazlzadeh.* Experimental and computational physics of fullerenes and their nanocomposites: Synthesis, thermo-mechanical characteristics and nanomedicine applications, *Physics Reports*, 2023, V. 996, P.1-116. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2022.10.003>.
5. *Ghavanloo E., Rafii-Tabar H., Fazlzadeh S.A.* New insights on nonlocal spherical shell model and its application to free vibration of spherical fullerene molecules. *Int J Mech Sci*, 2019, 161–162:105046. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2019.105046>
6. *Ghavanloo, E., Izadi, R. & Nayebi, A.* Computational modeling of the effective Young's modulus values of fullerene molecules: a combined molecular dynamics simulation and continuum shell model. *J Mol Model*, 2018, 24, 71. <https://doi.org/10.1007/s00894-018-3623-x>
7. *Harada S., Kozako M., Hikita M., Igarashi T. and Kaji H.* Preparation of fullerene/epoxy resin composite with fine dispersion and its breakdown strength, *International Symposium on Electrical Insulating Materials (ISEIM)*, Toyohashi, Japan, 2017, pp. 654-656, doi: 10.23919/ISEIM.2017.8166575.
8. *Huang, N., Chen, Y., Xie, Y., Yang, W., Li, J., & Guo, H.* Stiffening of double-shelled fullerene molecules under uniaxial strains. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2024, 1–7. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2024.2329740>
9. *Jamal-omid M., Shayanmehr M., Rafiee R.* A study on equivalent spherical structure of buckyball-C60 based on continuum shell model. *Lat. Am. J. Solids Struct.*, 2016, V. 13, no. 5, pp. 1016–1029. <https://doi.org/10.1590/1679-78252508>
10. *Kausar, A.* Fullerene Reinforced Polymeric Nanocomposites for Energy Storage – Status and Prognoses. *Front. Mater.* 2022, 9, 150. <https://doi.org/10.3389/fmats.2022.874169>
11. *Lixing Dai, Jun Sun.* Mechanical properties of carbon nanotubes-polymer composites. In: Beber MR, Hafez IH, editors. *Carbon nanotubes - Current progress of their polymer composites*. IntechOpen, 2016, p. 1-41. <https://doi.org/10.5772/62635>
12. *Shahriar Dastjerdi, Bekir Akgöz.* On the statics of fullerene structures. *International Journal of Engineering Science*, 2019 142, P. 125-144. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2019.06.002>

Стаття надійшла 11.04.2024

Шльонь Н.В.

#### АНАЛІЗ ТЕРМОМЕХАНІЧНОЇ НЕСУМІСНОСТІ ФУЛЕРЕНІВ З ПОЛІМЕРНИМИ МАТРИЦЯМИ КОМПОЗИТІВ

Унікальні показники міцності та твердості карбонових нанотрубок і фулеренів роблять їх вельми перспективними армуючими домішками в композитні матеріали на основі полімерних та металевих матриць. Встановлено, що навіть порівняно невеликі за масою фулеренові включення можуть суттєво підвищити фізико-механічні показники полімерів. В той же час відносно низькі значення коефіцієнта лінійного термічного розширення карбонових наномолекул призводить до можливості прояву внутрішнього механізму зародження в полімері додаткових концентраторів внутрішньо-структурних термонапружень, зумовлених термомеханічною несумісністю фракцій композиту. Для перевірки такої можливості проведено теоретичне моделювання ефектів термомеханічного деформування неоднорідної структури, що розглядається, при зміні її температури. При цьому фулерен моделюється тонкою пружною сферичною оболонкою зі зведеними (ефективними) параметрами товщини, модуля пружності, коефіцієнта Пуассона і коефіцієнта термічного лінійного розширення, полімерна матриця вважається однорідним пружним середовищем із заданими параметрами термопружності. Сформульована система звичайних диференціальних рівнянь, що описує деформований стан виділеного для обчислення фрагменту, в замкненій формі побудовано її розв'язок для випадку зміни температури на 100°С. В якості матеріалу матриці вибрані фенолформальдегід, епоксидна смола, полікарбонат, поліамід, полістирол, поліефір та поліпропілен, що мають підвищені значення коефіцієнтів термічного розширення. Обчислено значення радіальних переміщень фулеренів при двох значеннях їх радіусів. Показано, що у зв'язку з високим зведеним значенням модуля пружності фулерену термічні прогини його стінки практично не залежать від властивостей навколишньої матриці та дорівнюють його вільним переміщенням. Термонапруження в полімерних матрицях мають найбільші значення в зонах інтерфейсних поверхонь та спадають пропорційно кубу радіальної координати, тому пошкодження, що ними викликані, мають локалізований характер.

**Ключові слова:** полімерні композити, фулерени, ефективні характеристики, термомеханічна несумісність.

Shlyun N.V.

#### ANALYSIS OF THERMO-MECHANICAL INCOMPATIBILITY OF FULLERENES WITH POLYMERIC MATRICES OF COMPOSITES

Unique strength and rigidity properties of carbon nanotubes and fullerenes do them very perspective reinforcing admixtures into composites produced on the basis of polymeric and metallic matrices. It is established that even relatively small their dopes into composites can essentially enlarge physico-mechanical characteristics of polymers. At the same time, comparatively low value of the linear thermal expansion coefficient of carbon nanomolecules results in the possibility of the emergence of the internal mechanism of the additional intrastructural stresses origination in the polymer conditioned due to thermomechanical

incompatibility of the composite fractions. To examine this possibility, the theoretical modelling of the thermomechanical deforming of the considered heterogeneous structures under thermal change action was carried out. In doing so, the fullerenes were simulated as a thin elastic shell with adduced (effective) thickness, elasticity modulus, Poisson's coefficient and linear thermal expansion coefficient, the polymer matrix was supposed to be a homogeneous elastic medium with the prescribed parameters of thermoelasticity. The system of constitutive ordinary differential equations was deduced, which described the thermoelastic stress-strainedstate of the elastic fragment chosen for consideration. These equations solutions were deduced in the closed form for the case when the system temperature changed in 100° C. Fenolformaldegid, epoxy rezin, polycarbonate, polyamide, polystirol, polyester, and polypropylene, possessing increased values of the linear thermal expansion coefficients, were chosen as the matrix materials. With these initial data, the values of the fullerene radial displacements were calculated for two magnitudes of the sphere radius. It is demonstrated that owing to the high value of the fullerene effective elasticity modulus, the thermal deflections of its wall poorly depend on the properties of the encompassing matrix and practically are equal to its free thermal displacements. The thermal stresses of the polymer matrices have the largest values in the zones of the interface surfaces and they decrease proportionally to cube of the radial coordinate, so, the damages provoked by them have localized character.

**Keywords:** polymeric composites, fullerenes, shell model, modified parameters, thermomechanical incompatibility.

УДК 539.3

*Шлюнь Н.В. Аналіз термомеханічної несумісності фулеренів з полімерними матрицями композитів//* Опір матеріалів і теорія споруд: наук.-тех. збірн. – К.: КНУБА, 2024. – Вип. 112. – С. 139-148.

*У статті наведено результати теоретичного моделювання явищ генерування додаткових внутрішньоструктурних термонапружень в полімерних композитах, армованих карбоновими фулеренами, під дією зміни температур в умовах термомеханічної несумісності значень модулів пружності, коефіцієнтів Пуассона та лінійного термічного розширення.*

Іл. 6. Бібліогр. 11 назв.

UDC 539.3

*Shlyun N.V. Analysis of thermo-mechanical incompatibility of fullerenes with polymer matrices of composites//* Strength of Materials and Theory of Structures: Scientific-and-technical collected articles. – K.: KNUBA, 2024. – Issue 112. – P. 139-148.

*The paper presents the theoretical simulation results for the phenomena of origination of additional intrastructural thermo stresses in polymeric composites, reinforced by carbon fullerenes, under action of varying temperature in conditions of thermomechanical incompatibility of the values of elasticity moduli, Poisson's coefficients, and linear thermal expansion coefficients of the system fractions.*

Fig. 6, References 11 items.

**Автор (науковий ступінь, вчене звання, посада):** кандидат технічних наук, доцент, в.о. завідувача кафедри вищої математики, ШЛЮНЬ Наталія Володимирівна

**Адреса робоча:** 01103 Україна, м. Київ, вул. М. Бойчука 42, Національний транспортний університет, ШЛЮНЬ Наталії Володимирівні

**Робочий тел.:**+38(044) 284-71-09

**Мобільний тел.:**+38(097) 593-63-46

**E-mail:** nataliyashlyun@gmail.com

**ORCID ID:** <http://orcid.org/0000-0003-1040-8870>