

همگن سازی و تحلیل انتقال حرارت نانوکامپوزیت پلی اتیلن تقویت شده با نانولوله های کربنی هلیکال

هدف از این پژوهش، مدل سازی هدایت حرارتی کامپوزیت پایه پلی اتیلن تقویت شده با نانولوله های کربنی هلیکال با استفاده از روش اجزا محدود می باشد. نانولوله های کربنی هلیکال به شکل تصادفی با توزیع یکنواخت با نسبت منطری، درصد حجمی، شکل ها و جهت گیری های مختلف توسط کد پایتون با استفاده الگوریتم مونتہ کارلو در آباکوس ایجاد شدند. نتایج نشان می دهد که با افزایش درصد حجمی، نسبت منطری و شعاع نانوذرات هلیکال، مقدار ضریب رسانش حرارتی افزایش می یابد که این افزایش برای درصد حجمی ۰/۷۱٪، به مقدار ۹/۳۵٪ بیشترین عامل تاثیرگذار و برای قطر نانولوله کربنی هلیکال با مقدار ۱٪ افزایش در ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت، کمترین تاثیر را دارد.

ابراهیم یارعلی^۱

دانشجوی کارشناسی ارشد

مجید بنی اسدی^۲

دانشیار

مصطفی باغانی^۳

دانشیار

واژه های راهنما: رسانش حرارتی موثر، نانولوله های کربنی هلیکال، اجزا محدود، نانوکامپوزیت، توزیع همسانگرد نانوذرات

۱- مقدمه

افزودن نانوذرات مانند نانوصفحات گرافن، نانولوله های کربنی^۴ (CNT)، نانولوله های کربنی هلیکال^۵ (CCNT)، نانوذرات رس و نانوذرات اکسید فلزی به ماتریس، معمولاً سبب افزایش خواص الکتریکی، مکانیکی، مقاومت مادی، مغناطیسی، نوری می شود. استفاده از نانوذرات CCNT، به دلیل شکل هندسی خاص آن ها، نسبت سطح به حجم قابل توجه و خواص مکانیکی و حرارتی بالایی که دارند، سبب افزایش خواص حرارتی و مکانیکی و همچنین مقاومت تخریب و شکست نانوکامپوزیت خواهد شد [۴-۱]. از میان نانولوله های کربنی، با توجه به ساختار هندسی نانولوله های کربنی هلیکال که دارای خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی نانولوله های کربنی هستند، اخیراً مورد توجه محققان قرار گرفته است.

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران ebrahim.me20@gmail.com

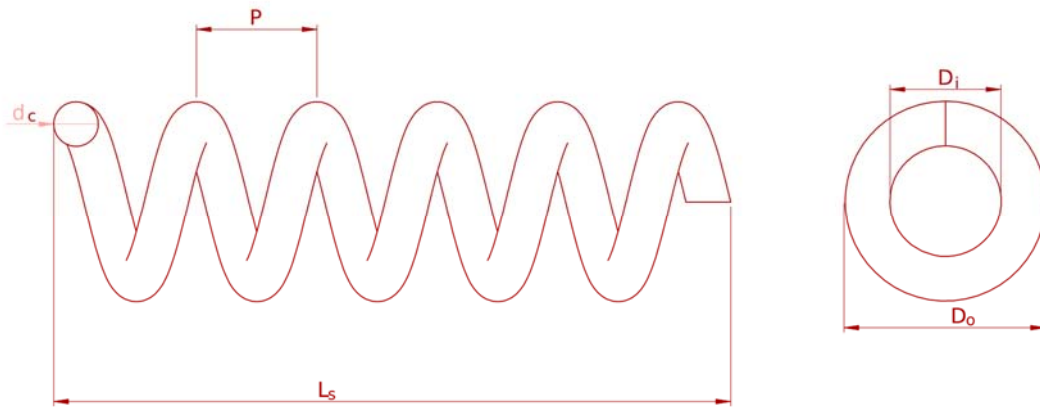
^۲ دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران m.baniassadi@ut.ac.ir

^۳ نویسنده مسئول، دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران baghani@ut.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۸/۱۲، تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۰/۰۳

^۴ Carbon nanotube

^۵ Coiled carbon nanotube



شکل ۱- شماتیک هندسی CCNT و پارامترهای هندسی آن

CCNTها در سال (۱۹۹۰) توسط دانلاپ^۱ و آیتاح^۲ پیش‌بینی شدند [۵, ۶] و در اوایل سال (۱۹۵۰) ساختارهای هلیکال نانولوله‌های کربنی توسط داویس^۳ مشاهده شدند [۷]؛ همچنین در سال (۱۹۹۴) به صورت تجربی و آزمایشگاهی توسط املینکس^۴ [۸] مشاهده شد. با توجه خواص گفته شده از CCNT، امروزه کاربردهای وسیعی در جاذب‌های امواج الکترومغناطیسی، سنسورها، تشدید کننده‌ها، فنرهای مکانیکی در مقیاس نانو، القاگرهای الکتریکی و ژنراتور تیرهای مغناطیسی دارند [۹]. شکل هندسی CCNT همانند فنر، دارای پیچ (P)، زاویه مارپیچ، طول آزاد (L_s)، قطر خارجی و قطر لوله (d_c) است که در شکل (۱) قابل مشاهده است. نانولوله‌های کربنی و نانولوله‌های کربنی هلیکال موادی ناهمسانگرد می‌باشند اما در بسیاری از تحقیقات [۱۰, ۱۱] و همچنین در این پژوهش، همسانگرد فرض می‌شوند. با توجه به این توضیح کوتاه در مورد CCNTها، در ادامه مروری بر پژوهش‌های قبلی ارائه می‌شود. با استفاده از روش اجزا محدود، خواص الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری CCNT و همچنین تاثیر پارامترهای هندسی CCNT، تعداد، نسبت منطری، نسبت حجمی و فاز میانی توسط خانی و همکاران، بررسی و بدست آمد [۱۲]. آن‌ها مشاهده کردند که در یک نسبت حجمی به سطح ثابت، مقاومت نانوکامپوزیت تقویت شده با CNT، بهتر از CCNT است. همچنین برای مطالعه خواص موثر گرمایی نانوکامپوزیت پلیمری شامل نانوذرات CNT، با در نظر گرفتن المان نماینده حجم^۵ (RVE) و تحلیل کوپل مکانیکی و حرارتی، تاثیر پارامترهای مختلف هندسی، نسبت منطری، درصد حجمی و نرخ بارگذاری بر ضریب رسانش نانوکامپوزیت پلیمری با استفاده از روش اجزا محدود توسط مهدوی و همکاران بررسی شد [۱۳]. نتایج آن‌ها نشان داد که بارگذاری مکانیکی سبب بهبود ضریب رسانش حرارتی موثر و افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاصل می‌شود. شکریه و همکاران با ساخت یک RVE شامل نانوذرات CNT به روش عددی، تاثیر طول RVE را بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت حاصل بررسی کردند و نتایج آن‌ها نشان داد که در یک درصد حجمی ثابت، طول یا عرض RVE، تاثیر بسزایی در مدول الاستیسیته طولی

¹ B. I. Dunlap

² S. Itoh

³ W. Davis

⁴ S. Amelinckx

⁵ Representative volume element

نانوکامپوزیت حاصل دارد [۱۴]. سپس بنی‌اسدی و همکاران، روش محیط‌های پیوسته آماری را برای بدست آوردن خواص موثر حرارتی ارائه دادند، آن‌ها از توابع احتمال دونقطه‌ای و سه‌نقطه‌ای استفاده کردند و اندرکنش میان نانوذرات هم در نظر گرفته شد [۱۵]. برای در نظر گرفتن اثر فاز میانی بر روی خواص حرارتی و مکانیکی نانوکامپوزیت، مرتضوی و همکاران [۱۶] با استفاده از یک مدل سه بعدی اجزا محدود، تاثیر این لایه را برای نانوذرات کروی، دیسکی و نانولوله‌های کربنی، بررسی کردند و مشاهده کردند که فاز میانی، بیشترین تاثیر را برای نانوذرات کروی دارد. برای بررسی تاثیر شکل هندسی نانوذرات CCNT در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری و توانایی جذب انرژی آن، یوسفی و همکاران، با استفاده روش المان محدود و با در نظر گرفتن ناحیه چسبنده بین نانوذرات و پلیمر پایه، این کار را انجام دادند و نهایتاً نشان دادند که چقرمگی نانوکامپوزیت تقویت شده با CCNT بیشتر از نانوکامپوزیت تقویت شده با CNT است [۲]. صادقی و همکاران به صورت تجربی با اضافه کردن نانوذرات CNT در رفتار خواص شبه‌استاتیکی برش پانچ در چند لایه‌های کامپوزیتی شیشه/اپوکسی را بررسی کردند و مشاهده کردند که با افزایش ۵٪ درصد وزنی CNT چندجداره، مدول نمونه حدود ۳۱٪ افزایش می‌یابد اما تاثیر بسزایی در کل انرژی جذب شده نمونه نداشت [۱۷].

آشنای قاسمی و همکاران به صورت تجربی خواص مکانیکی پلی‌پروپیلن در حضور نانوصفحات گرافن و پلی‌ولفین الاستومر در زمان‌های ساخت متفاوت را در آزمون کشش و ضربه بررسی کردند و مشاهده کردند که الاستومر موجب کاهش مدول یانگ می‌شود و افزایش گرافن باعث افزایش مدول و کاهش کرنش شکست می‌شود. [۱۸]. اخیراً، یارعلی و همکاران [۱۹] در یک کار عددی با روش المان محدود، تاثیر نانوذرات CCNT در پلیمر حافظه‌دار بر پایه آکریلات را بررسی کردند. آن‌ها به صورت یک مطالعه پارامتری، تاثیر درصد حجمی، نسبت منظری، تعداد حلقه و جهت‌گیری نانوذرات CCNT را در تنش موثر، بازیابی کرنش و بازیابی تنش نانوکامپوزیت پلیمر حافظه‌دار بررسی کردند. آن‌ها گزارش دادند که تاثیر جهت‌گیری نانوذرات و طول فنری آن‌ها (نسبت منظری) بیشترین تاثیر را در تنش موثر بازیابی و کرنش موثر بازیابی نانوکامپوزیت پلیمر حافظه‌دار دارد. ترن^۱ [۲۰] در یک کار تحلیلی، یک تقریب ساده برای بدست آوردن ضریب رسانش حرارتی موثر کامپوزیت چندفازی در حالت دو و سه بعدی ارائه دادند که حتی درصد حجمی‌های بالای نانوذرات را نیز پیش‌بینی می‌کند. نهایتاً نتایج تئوری مدل ایشان با نتایج آزمایشگاهی و المان محدود دیگران، همپوشانی خوبی داشت. همچنین برای بررسی کردن جهت فیبر در کامپوزیت تقویت شده با فیبر، جوانبخت و همکاران [۲۱] به کمک روش المان محدود، تاثیر درصد حجمی و جهت‌گیری فیبر را بر ضریب رسانش حرارتی کامپوزیت حاصل بررسی کردند. نهایتاً آن‌ها مشاهده کردند که با افزایش بیشترین مقادیر اصلی تانسور چرخش، فیبرها وادار به جهت‌گیری در راستای جریان حرارتی می‌شوند. با توجه به مروری بر پژوهش‌های قبلی، تاکنون پژوهشی که تاثیر نانوذرات CCNT در ضریب رسانش حرارتی موثر نانوکامپوزیت‌ها را بررسی کند، در منابع گزارش نشده است. بنابراین، در این پژوهش، با استفاده از نانوذرات CCNT در کامپوزیت پایه پلی‌میری پلی‌اتیلن، ضریب رسانش حرارتی موثر آن به روش اجزا محدود سه‌بعدی بدست می‌آید. در این تحقیق فرض اتصال کامل بین نانوذرات و پلیمر در نظر گرفته شده است و همچنین از مقاومت الکتریکی بین نانوذرات و ماتریس صرف نظر شده است. در ابتدا با استفاده از یک برنامه نوشته شده در نرم‌افزار پایتون و متلب، نانوذرات CCNT توسط

¹ Tran

الگوریتم مونته کارلو به صورت همسانگرد در RVE پخش می‌شود، سپس با بدست آمدن طول مناسب RVE، به صورت مطالعه پارامتری، تاثیر درصد حجمی، نسبت منظری (نسبت طول فبری به قطر نانوذره، L_s/D_0)، تعداد حلقه و ... نانوذرات CCNT روی ضریب رسانش حرارتی یک نانوکامپوزیت بر پایه پلی اتیلن بررسی می‌شود.

۲- مبنای تئوریک رسانش گرمایی

با در نظر گرفتن یک ماده همسانگرد که انتقال حرارت در آن وابسته به دما است، معادله‌ی پایه‌ای انتقال حرارت آن به صورت زیر است:

$$+Q = \rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) \quad (1)$$

به طوریکه q_x ، q_y و q_z برابر با مولفه‌های جریان حرارتی بر واحد سطح، $Q = Q(x, y, z, t)$ (W/m^3) نرخ تولید حرارت داخلی بر واحد حجم، ρ (kg/m^3) چگالی مادی، C ($J/kg \cdot K$) ظرفیت حرارتی، T (K) دما و t (s) زمان است. طبق قانون فوریه، با قرار دادن مولفه‌های جریان حرارتی در رابطه ۱، می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q = \rho C \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

که در آن k ($W/m \cdot K$) ضریب رسانش حرارتی است. در این پژوهش، فرض می‌شود گرمای تولیدی وجود ندارد ($Q=0$)، انتقال حرارت پایدار است؛ یعنی $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$ و همچنین شرط مرزی دمایی ثابت در یک طرف RVE و اعمال شار حرارتی در طرف دیگر اعمال می‌شود. حال با توجه به اینکه RVE مورد بحث، نانوکامپوزیت پلی اتیلن شامل نانوذرات هلیکال CCNT است، بنابراین برای محاسبه ضریب رسانش موثر RVE از رابطه‌ی ۳ استفاده می‌شود [۱۳]:

$$k_{eff} \times \frac{\Delta T}{L} = q_{eff} \quad (3)$$

به طوریکه ΔT (K) اختلاف دمایی بین دو سطح RVE پس از تحلیل، L (m) طول RVE پس از تحلیل و q_{eff} (W/m^2) شار معادل عبوری بین دو سطح موردنظر از RVE است. که مقدار شار حرارتی موثر q_{eff} از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$q_{eff} = \frac{\sum_{i=1}^N q_i v_i}{V} \quad (4)$$

که V (m^3) حجم کل RVE، q_i شار عبوری از هر المان و v_i حجم هر المان است و N تعداد المان‌ها است. همچنین قابل ذکر است که در این پژوهش، فرض می‌شود که مقاومت حرارتی بین نانوذرات و ماتریس، صفر است. المان نماینده حجم در قسمت بعدی، توضیح داده شده است.

۳- بازسازی المان نماینده حجم نانوکامپوزیت و تعیین اندازه آن

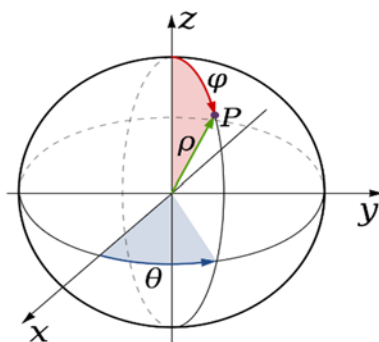
در این قسمت ابتدا RVE به صورت سه بعدی و با پراکنده کردن نانوذرات در آن، بازسازی می‌شود. سپس با مشخص کردن ویژگی و خواص مکانیکی و حرارتی ماتریس و نانوذرات، اندازه مطلوب RVE بدست می‌آید.

۳-۱- بازسازی المان نماینده حجم

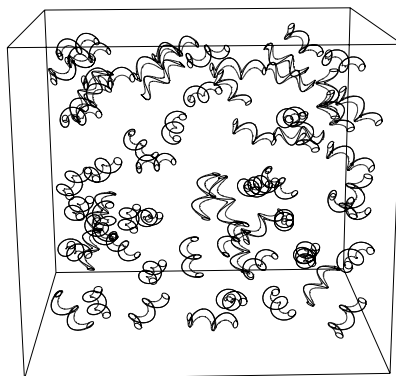
در این پژوهش، RVE به صورت یک المان سه بعدی مکعبی در نظر گرفته شد، در واقع RVE کوچکترین اندازه‌ای از ماده ناهمگنی است که به کمک آن می‌توان خواص موثر کل ماده بالک را اندازه گرفت [۲۲]. برای پخش کردن نانوذرات CCNT در داخل RVE مذکور، با استفاده از الگوریتم مونته کارلو، ابتدا توسط یک برنامه MATLAB، مختصات نانوذرات در یک فایل متنی تولید شده، سپس با استفاده از برنامه Python، نانوذرات CCNT به صورت همگن در RVE پخش شدند. برای محاسبه جهت نانوذرات، زوایای دستگاه مختصات کروی بردار طولی نانوذرات، توسط الگوریتم مونته کارلو به صورت زیر تعریف می‌شوند [۲۲]:

$$\begin{cases} \theta = 2\pi a \\ \varphi = \cos^{-1}(2b - 1) \end{cases} \quad (10)$$

به طوریکه θ و φ زوایای دستگاه مختصات کروی بردار طولی نانوذرات هستند که در شکل زیر نشان داده شده است و همچنین ضرایب a و b دو عدد تصادفی بین صفر و یک هستند. یک نمونه از توزیع نانو ذرات CCNT در RVE با درصد حجمی ۰/۴۲۶٪، نسبت طول RVE به CCNT، برابر با ۵ و ۶۵ ذره CCNT به صورت زیر است.



شکل ۲- مختصات کروی بردار طولی نانوذرات [۲۳]



شکل ۳- نمونه‌ای از ساختار RVE شامل CCNT با ۰/۴۲۶٪ حجمی و نسبت طول RVE به CCNT برابر با ۵

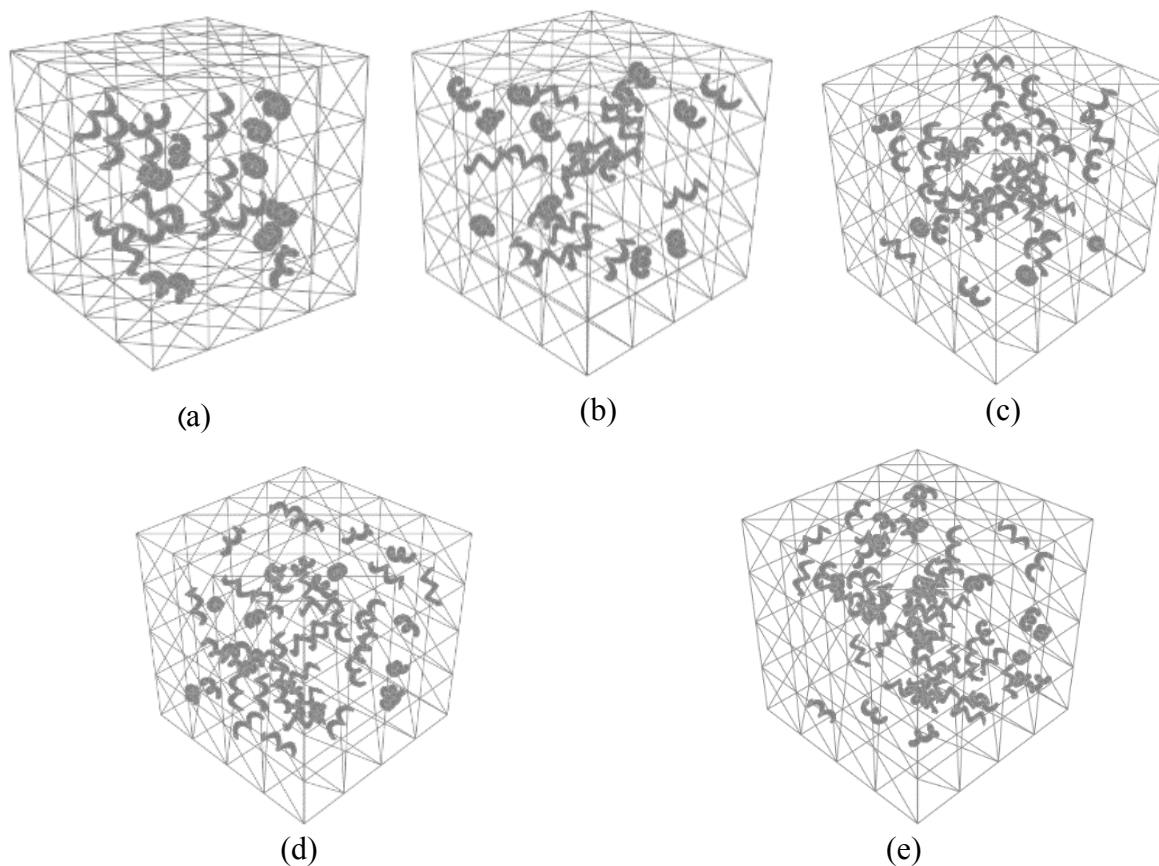
۳-۳- تعیین اندازه RVE

برای ساخت RVE، به عنوان نماینده حجم همگن یک ماده ناهمگن، پس از توزیع مطلوب نانوذرات در آن، باید اندازه آن نیز به درستی تعیین شود، یعنی خواص موثر ماده، به اندازه نمونه وابسته نباشد. برای این کار، پنج اندازه مختلف RVE با درصد حجمی ۰/۴۲۶٪ نانوذرات در اندازه‌های ۹۰۰، ۱۰۰، ۱۱۰۰، ۱۱۹۱/۱ و ۱۲۹۱/۴ (با نسبت منظری و درصد حجمی مساوی) مطابق شکل (۳) ایجاد شدند. همچنین با توجه به اینکه الگوریتم مونته‌کارلو یک الگوریتم تصادفی است، هر کدام از تحلیل‌ها، سه بار تکرار شد و مقادیر ارائه شده در این پژوهش، میانگینی از سه ضریب انتقال حرارت تکرار شده است تا مقداری که بدست می‌آید، خطای کمتری داشته باشد. همچنین انحراف معیار تکرار هر یک از داده‌ها نیز در اشکال (۵) و (۶) نشان داده شده است. همچنین همانطور که گفته شد، شرایط مرزی مساله، در یک طرف نمونه مدل‌سازی شده، با اعمال شار حرارتی و در طرف مقابل آن، اعمال دمای ثابت است؛ وقتی که شار اعمال می‌شود، با توجه به وجود نانوذرات در نانوکامپوزیت، قابل ذکر است که در دو طرف RVE یک صفحه بسیار نازک و سبک با ضریب رسانش حرارتی بسیار بالا نیز قرار داده شد که توزیع شار حرارتی در داخل نانوکامپوزیت، یکنواخت‌تر اعمال شود. همچنین تماس بین نانوذرات و ماتریس پایه از نوع پیوند کامل در نظر گرفته شد. برای مش‌بندی RVE، به دلیل وجود نانوذرات با شکل هندسی پیچیده‌ای که دارند، از نوع مش آزاد^۱ انتخاب می‌شود؛ بنابراین از المان خطی هرمی چهارگانه‌ای C3D4 برای RVE و از روش جاروب^۲ برای نانوذرات CCNT، از المان‌های شش وجهی C3D8R استفاده می‌شود. قابل توجه است برای اینکه هم دقت حل عددی بالا برود و هم حجم محاسباتی کمتر شود، از رشد مش نیز استفاده شده است؛ یعنی نواحی دور از محل نانوذرات CCNT دارای مش درشت‌تر ولی نواحی نزدیک نانوذرات CCNT مش خیلی ریزتری دارند و مجموعاً حداقل تعداد المان‌های مش RVE برابر با ۵۰۰۰۰۰ و نانوذره CCNT برابر با ۵۰۰۰۰ است. در این پژوهش، اندازه‌های مختلف RVE در یک درصد حجمی نانوذرات CCNT و در یک مش‌بندی مساوی تحلیل شد تا بتوان اندازه مناسب RVE را بدست آورد. سپس ضریب رسانش حرارتی برای هر ۵ مورد اندازه‌گیری شد که طبق نتایج ذکر شده در شکل (۴) مشاهده می‌شود که در اندازه ۱۰۰۰ برای RVE، جواب‌ها مستقل از اندازه RVE هستند؛ بنابراین اندازه ۱۰۰۰ نانومتر برای RVE در نظر گرفته می‌شود.

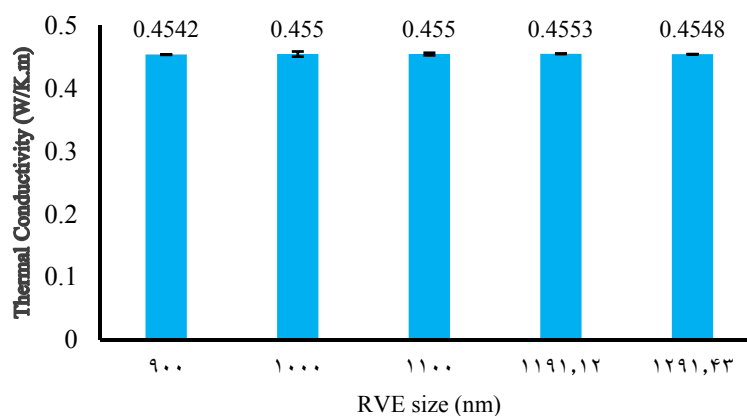
همچنین مطالعه استقلال نتایج از مش و صحنه‌سنجی پژوهش نیز انجام شد. برای این کار، با توجه به در دسترس نبودن نتایج تجربی و عددی ضریب هدایت حرارتی کامپوزیت تقویت‌شده با نانوذرات CCNT، از یک حالت خاص آن استفاده می‌شود؛ یعنی در حالتی که گام CCNT برابر بی‌نهایت است (یعنی معادل با CNT). بنابراین از نتایج کار مهدوی و همکاران [۱۳] استفاده می‌شود.

¹ Free

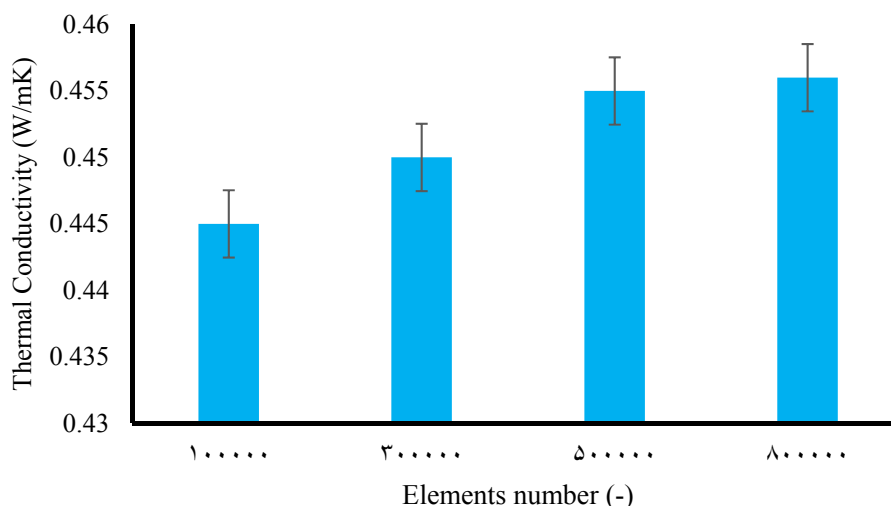
² Sweep



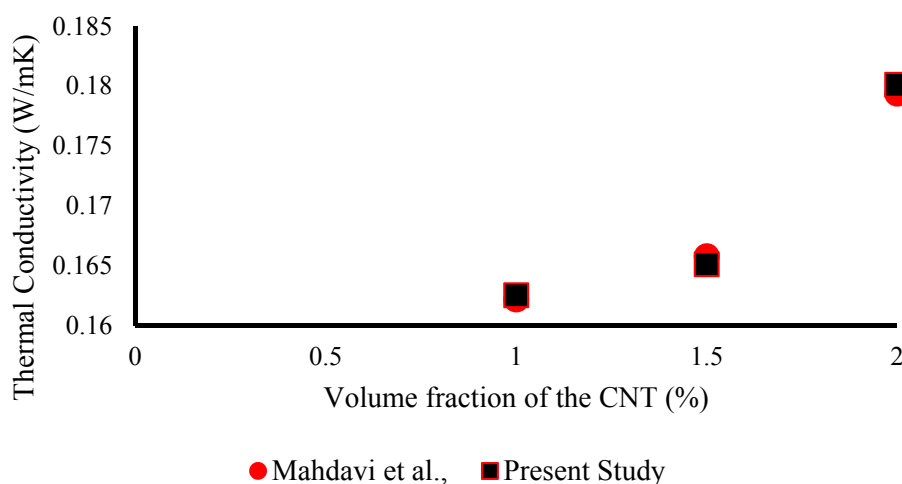
شکل ۳- توزیع نانو ذرات در RVE برای بدست آوردن اندازه مطلوب RVE. (a) اندازه ۹۰۰ نانومتر برای RVE و ۲۲ ذره CCNT، (b) اندازه ۱۰۰۰ نانومتر برای RVE و ۳۰ ذره CCNT، (c) اندازه ۱۱۰۰ نانومتر برای RVE و ۴۰ ذره CCNT، (d) اندازه ۱۱۹۱/۱ نانومتر برای RVE و ۵۱ ذره CCNT، (e) اندازه ۱۲۹۱/۴ نانومتر برای RVE و ۶۵ ذره CCNT.



شکل ۴- نمودار ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت برای مقادیر مختلف اندازه RVE



شکل ۵- مطالعه استقلال از مش برای RVE مورد نظر با اندازه ۱۰۰۰۰ نانومتر



شکل ۶- صحه سنجی پژوهش حاضر با استفاده از کار عددی انجام شده توسط مهدوی و همکاران [۱۳]

همانطور که از شکل (۵) مشخص است به ازای تعداد ۵۰۰۰۰۰ المان، مقادیر ضریب رسانش حرارتی به W/mK ۰/۴۵۵ همگرا می شود. همچنین نتایج صحه سنجی نیز در شکل (۶) ارائه شده است. که مشاهده می شود که نتایج پژوهش حاضر (با استفاده از نانوذرات CNT) با پژوهش مهدوی و همکاران [۱۳] تطابق خوبی دارد.

۴-ارائه نتایج

در این قسمت، تاثیر پارامترهای مختلف شامل، درصد حجمی نانوذرات، اندازه آن ها و جهت پخش شدن آن ها روی ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت مورد نظر بحث می شود. مشخصات نانوذرات در جدول (۱) موجود است.

جدول ۱- مشخصات هندسی نانوذرات و نامگذاری آنها

نوع	طول (نانومتر)	پیچ (نانومتر)	شعاع (نانومتر)	قطر داخلی (نانومتر)
CCNT1	۲۰۰	۱۰۰	۱۵	۲۰
CCNT2	۵۸-۴۰۰	۱۰۰	۱۵	۲۰
CCNT3	۲۰۰	۱۵۰	۱۵	۲۰-۶۰
CCNT4	۲۰۰	۱۵۰	۱۵-۳۰	۲۴

۴-۱- تاثیر درصد حجمی CCNT بر ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت

برای مشاهده تاثیر درصد حجمی نانوذرات CCNT روی ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت، چهار درصد حجمی مختلف نانوذرات CCNT از نوع CCNT1 ساخته شد سپس نمودار حاصل از نتایج اجزا محدود به صورت شکل (۷) بدست آمد که همانطور که قابل مشاهده است با افزایش درصد حجمی نانوذرات، مقدار ضریب رسانش حرارتی پیوسته افزایش می یابد؛ به گونه ای که با درصد حجمی ۰/۷۱٪ نانوذرات CCNT، مقدار ضریب رسانش حرارتی، ۹/۳۵ درصد، افزایش می یابد. با توجه به اینکه ضریب رسانش حرارتی CCNT مورد استفاده در این پژوهش حدود ۲۵۰ برابر پلی اتیلین است، بنابراین هرچه درصد حجمی نانوذرات CCNT بیشتر شود، طبیعتاً ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت حاصل بیشتر می شود.

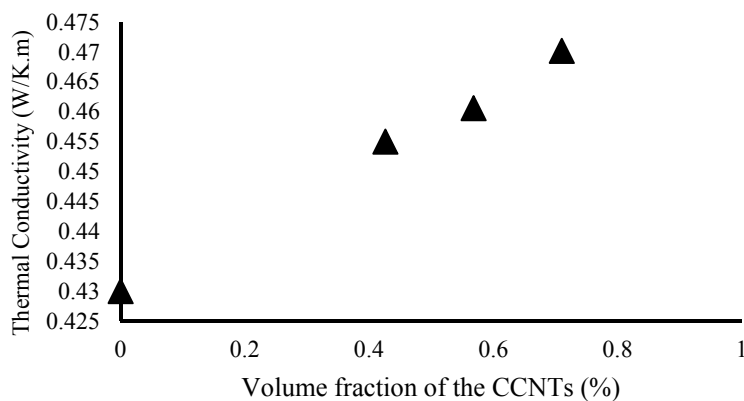
۴-۲- تاثیر طول آزاد CCNT بر ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت

برای مشاهده تاثیر طول آزاد (فنری) نانوذرات CCNT، چهار طول مختلف برای نانوذرات از نوع CCNT2 و با درصد حجمی ۰/۴۲۴٪ انتخاب شد و با انجام تحلیل اجزا محدود آن، نمودار ضریب رسانش نانوکامپوزیت به صورت شکل (۹) بدست آمد. که همانطور که قابل مشاهده است، با افزایش طول CCNT، مقدار ضریب رسانش حرارتی با شیب کمی افزایش می یابد، به گونه ای که طول ۴۰۰ نانومتر نسبت به طول ۱۵۸ نانومتر، مقدار ضریب رسانش حرارتی، فقط به میزان ۱/۳٪ افزایش می یابد. با افزایش طول فنری نانوذره CCNT، سطح تماس بین نانوذره و ماتریس پایه بیشتر می شود و طبیعتاً منجر به افزایش ضریب رسانش نانوکامپوزیت حاصل می شود.

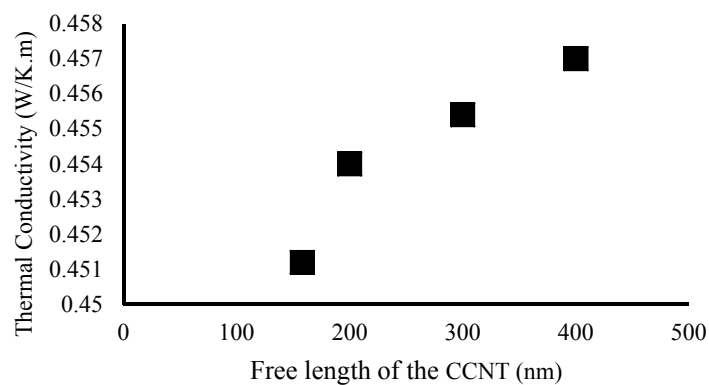
۴-۳- تاثیر قطر داخلی CCNT بر ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت

برای مشاهده تاثیر قطر داخلی نانوذرات CCNT، چهار قطر مختلف CCNT از نوع CCNT3 و با درصد حجمی ۰/۴۵۲٪ انتخاب شد و با انجام تحلیل اجزا محدود آن، نمودار ضریب رسانش نانوکامپوزیت به صورت شکل (۹) بدست آمد. همانطور که مشاهده می شود، با افزایش قطر داخلی CCNT، مقدار ضریب رسانش حرارتی نیز افزایش می یابد به گونه ای که مقدار ضریب رسانش حرارتی در قطر ۶۰ نانومتر نسبت به ۲۰ نانومتر به میزان ۱/۲ نانومتر افزایش یافته است که این نتایج نشان می دهد که تاثیر تغییرات قطر خارجی و یا داخلی CCNT روی ضریب رسانش حرارتی، بسیار کم است (حدود یک درصد افزایش).

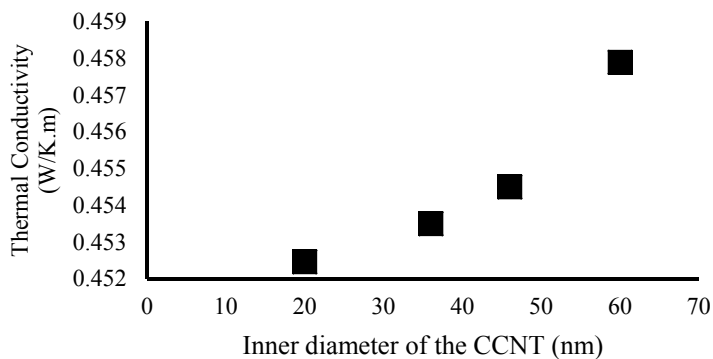
همانند تاثیر طول فنری CCNT، با افزایش قطر داخلی نانوذره CCNT (با ثابت ماندن بقیه پارامترهای هندسی آن) سطح تماس بین نانوذره و ماتریس پایه بیشتر می شود و نتیجتاً سبب افزایش ضریب رسانش حرارتی می شود.



شکل ۷- نمودار تغییرات ضریب رسانش حرارتی نسبت به درصد حجمی نانو ذرات



شکل ۸- نمودار تغییرات ضریب رسانش حرارتی نسبت به طول آزاد نانو ذرات



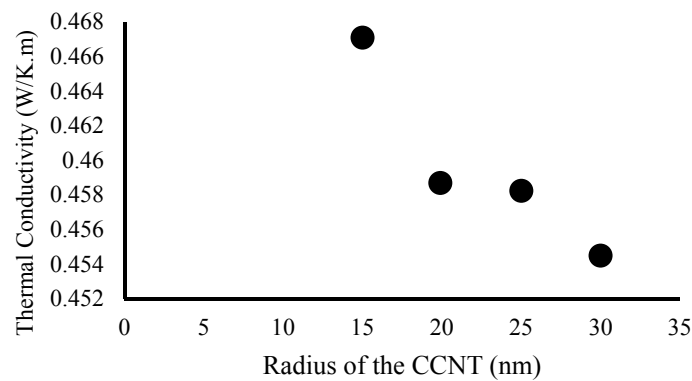
شکل ۹- نمودار تغییرات ضریب رسانش حرارتی نسبت به تغییرات قطر داخلی CCNT

۴-۴- تاثیر شعاع CCNT بر ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت

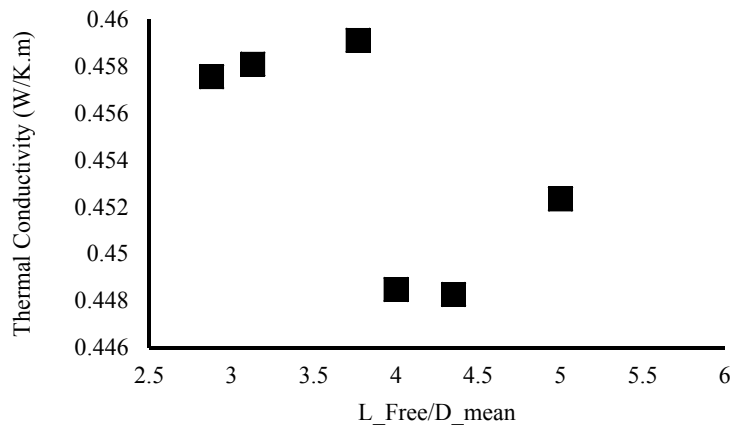
برای مشاهده تاثیر شعاع نانوذرات CCNT، چهار شعاع مختلف CCNT از نوع CCNT4 و با درصد حجمی ۶۲۲٪/۰ انتخاب شد. همانطور که از شکل (۱۰) قابل مشاهده است، مقدار ضریب رسانش حرارتی با افزایش شعاع CCNT، کاهش می‌یابد به گونه‌ای که از شعاع ۱۵ به شعاع ۳۰ نانومتر، مقدار ضریب رسانش حرارتی ۲۷٪/۰ کاهش می‌یابد. تاثیر افزایش شعاع CCNT با فرض ثابت بودن سایر پارامترهای هندسی، دقیقاً برعکس تاثیر قطر داخلی یا خارجی CCNT عمل می‌کند و بنابراین سبب کاهش ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت حاصل می‌شود.

۴-۵- تاثیر نسبت طول آزاد به قطر اصلی CCNT بر ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت

برای ملموس شدن تاثیر نانولوله‌های کربنی هلیکال، پارامتری که می‌تواند این را به خوبی نشان دهد، نسبت طول آزاد (فنری) CCNT به قطر اصلی (D_{mean}) است که این کار برای نسبت‌های بین ۲/۸۸ تا ۵ با درصد حجمی ۴۲۷۲٪/۰ انجام گرفت که نتایج حاصل از این کار در شکل (۱۲) نشان داده شده است.



شکل ۱۰- نمودار تغییرات ضریب رسانش حرارتی نسبت به شعاع CCNT



شکل ۱۱- نمودار تغییرات ضریب رسانش حرارتی نسبت به L_{Free}/D_{mean}

جدول ۲- تاثیر جهت پخش شدن نانوذرات CCNT بر ضریب رسانش نانوکامپوزیت حاصل

نوع	ضریب رسانش حرارتی (W/mK)
ماتریس پایه	۰/۴۳۰
توزیع همسانگرد	۰/۴۵۵
توزیع غیرهمسانگرد در راستای شار حرارتی	۰/۴۸۹
توزیع غیرهمسانگرد عمود بر راستای شار حرارتی	۰/۴۱۰

هرچه نسبت طول فنری به قطر اصلی CCNT افزایش پیدا کند، به این معنی است که CCNT از لحاظ هندسی، مشابه CNT می شود. طبق نمودار شکل (۱۲) مشاهده می شود که بین نسبت های ۳/۵ و ۴، ضریب رسانش حرارتی افت شدیدی پیدا می کند ولی بعد از آن هرچه این نسبت بیشتر می شود، ضریب رسانش پیوسته افزایش پیدا می کند.

۴-۶- تاثیر جهت پخش شدن نانوذرات CCNT بر ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت

در این قسمت، به منظور مشاهده تاثیر پخش همسانگرد و غیرهمسانگرد نانوذرات CCNT در ماتریس پایه پلی اتیلن، سه نوع RVE با درصد حجمی ۰/۴۲۶٪ از نوع CCNT1 به صورت های همسانگرد، غیرهمسانگرد در راستای شار و غیرهمسانگرد عمود بر راستای شارژ ساخته شد و مورد شبیه سازی قرار گرفتند. نتایج حاصل از شبیه سازی در جدول (۲) گزارش شده است. همانطور که از جدول (۲) مشخص است، وقتی که نانوذرات CCNT در جهت شار قرار می گیرند، با توجه به اینکه ضریب رسانش نانوذرات CCNT حدود ۲۵۰ برابر بیشتر از ماتریس پایه است، بنابراین ضریب رسانش حرارتی کل نسبت به حالت توزیع همسانگرد، بیشتر است. قابل توجه است که اگر نانوذرات CCNT عمود بر جهت شار حرارتی به صورت غیرهمسانگرد پخش شوند، تاثیری معکوس را روی ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت خواهند داشت و انتقال حرارت کامپوزیت حاصل را با نه تنها بهبود نمی بخشد بلکه بدتر می کند.

۵- جمع بندی و نتیجه گیری

در این پژوهش، تاثیر افزودن نانوذرات لوله های کربنی هلیکال به پلی اتیلن و بدست آوردن خواص حرارتی (ضریب رسانش حرارتی) نانوکامپوزیت حاصل بررسی شد. روش انجام پژوهش به کمک حل عددی اجزا محدود و همچنین توزیع نانوذرات نیز به کمک الگوریتم مونته کارلو و با استفاده از برنامه های MATLAB و Python انجام شد. پس از ساخت RVE های مورد نظر و انجام تحلیل های حرارتی روی آن ها، نتایج نشان داد که ضریب رسانش حرارتی، با افزایش درصد حجمی نانوذرات، طول فنری آن ها و شعاع خارجی و یا داخلی آن ها، ضریب رسانش حرارتی نیز افزایش می یافت. اما وزن افزایش هر یک از این پارامترها متفاوت است به گونه ای که پارامتر درصد حجمی، بیشترین تاثیر را در افزایش ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت به میزان ۱۰٪ و قطر خارجی یا داخلی نانوذرات و همچنین طول فنری نانوذرات نیز کمترین میزان تاثیر در افزایش ضریب رسانش حرارتی نانوکامپوزیت به میزان ۱٪ را داشت. تنها پارامتری که با افزایش آن، ضریب رسانش حرارتی کاهش می یابد،

شعاع CCNT است که همانطور که مشاهده شد، با افزایش شعاع از ۱۵ به ۳۰ نانومتر، ضریب رسانش حرارتی به میزان ۲/۷٪ کاهش می‌یابد. همچنین با بدست آوردن ضریب رسانش حرارتی نسبت به تغییرات نسبت طول آزاد CCNT به قطر آن، مشاهده شد که هر چه این نسبت بیشتر شود (یعنی نانولوله‌های کربنی هلیکال به سمت نانولوله‌های کربنی میل پیدا کنند) مقدار ضریب رسانش سیر صعودی- نزولی- صعودی پیدا می‌کند. به علاوه، تاثیر جهت پخش شدن نانوذرات CCNT نیز بررسی شد که نتایج نشان داد ضریب رسانش حرارتی برای توزیع غیرهمسانگرد در جهت شار حرارتی بیشتر از توزیع همسانگرد نانوذرات CCNT است.

مراجع

- [1] Raghubanshi, H., Dikio, E. D., and Naidoo, E. B., "The Properties and Applications of Helical Carbon Fibers and Related Materials: A Review, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 44, pp. 23-42, (2016).
- [2] Yousefi, E., Sheidaei, A., Mahdavi, M., Baniassadi, M., Baghani, M., and Faraji, G., "Effect of Nanofiller Geometry on the Energy Absorption Capability of Coiled Carbon Nanotube Composite Material", Composites Science and Technology, Vol. 153, pp. 222-231, (2017).
- [3] Sharma, R., Yadav, A. K., Panwar, V., and Kar, K. K., "Viscoelastic Properties of Coil Carbon Nanotube-coated Carbon Fiber-reinforced Polymer Nanocomposites, Journal of Reinforced Plastics and Composites, Vol. 34, No. 12, pp. 941-950, (2015).
- [4] Gertsman, V.Y., Hoffmann, M., Gleiter, H., and Birringer, R., "The Study of Grain Size Dependence of Yield Stress of Copper for a Wide Grain Size Range", Acta Metallurgica et Materialia, Vol. 42, No. 10, pp. 3539-3544, (1994).
- [5] Itoh, S., and Ihara, S., "Toroidal Forms of Graphitic Carbon. II. Elongated Tori", Physical Review B, Vol. 48, No. 11, pp. 8323, (1993).
- [6] Dunlap, B. I., "Connecting Carbon Tubules", Physical Review B, Vol. 46, No. 3, pp. 1933, (1992).
- [7] Davis, W., Slawson, R., and Rigby, G., "An Unusual form of Carbon", Nature, Vol. 171, No. 4356, pp. 756, (1953).
- [8] Amelinckx, S., Zhang, X., Bernaerts, D., Zhang, X., Ivanov, V., and Nagy, J., "A Formation Mechanism for Catalytically Grown Helix-shaped Graphite Nanotubes", Science, Vol. 265, No. 5172, pp. 635-639, (1994).
- [9] Zhang, M., and Li, J., "Carbon Nanotube in Different Shapes", Materials Today, Vol. 12, No. 6, pp. 12-18, (2009).
- [10] Ju, S. P., Lin, J. S., Chen, H. L., Hsieh, J. Y., Chen, H. T., Weng, M. H., Zhao, J. J., Liu, L. Z., and Chen, M. C., "A Molecular Dynamics Study of the Mechanical Properties of a Double-walled Carbon Nanocoil", Computational Materials Science, Vol. 82, pp. 92-99, (2014).

- [11] Volodin A., Ahlskog, M., Seynaeve, E., Van Haesendonck, C., Fonseca, A., and Nagy, J., "Imaging the Elastic Properties of Coiled Carbon Nanotubes with Atomic Force Microscopy", *Physical Review Letters*, Vol. 84, No. 15, pp. 3342, (2000).
- [12] Khani, N., Yildiz, M., and Koc, B., "Elastic Properties of Coiled Carbon Nanotube Reinforced Nanocomposite: A Finite Element Study", *Materials & Design*, Vol. 109, pp. 123-132, (2016).
- [13] Mahdavi, M., Yousefi, E., Baniassadi, M., Karimpour, M., and Baghani, M., "Effective Thermal and Mechanical Properties of Short Carbon Fiber/Natural Rubber Composites as a Function of Mechanical Loading", *Applied Thermal Engineering*, Vol. 117, pp. 8-16, (2017).
- [14] Mehrdad Shokrieh, M., Mosalmani, R., and Soveity, S., "An Investigation on Effects of Aspect Ratio of Representative Volume Element on Elastic Modulus of a Carbon Nanotubes Reinforced Polymer", *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 9, pp. 107-116, (2014).
- [15] Baniassadi, M., Laachachi, A., Makradi, A., Belouettar, S., Ruch, D., Muller, R., Garmestani, H., Toniazzo, V., and Ahzi, S., "Statistical Continuum Theory for the Effective Conductivity of Carbon Nanotubes Filled Polymer Composites", *Thermochimica Acta*, Vol. 520, No. 1-2, pp. 33-37, (2011).
- [16] Mortazavi, B., Bardon, J., and Ahzi, S., "Interphase Effect on the Elastic and Thermal Conductivity Response of Polymer Nanocomposite Materials: 3D Finite Element Study", *Computational Materials Science*, Vol. 69, pp. 100-106, (2013).
- [17] Sadeghi, M., and Pol, M. H., "Experimental Investigation of the Effect of the Addition of Carbon Nanotubes on the Quasi-static Punch Shear Penetration of the Laminated Glass/Epoxy Composite", *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 12, pp. 416-424, (2016).
- [18] Ashenai Ghasemi, F., Ghasemi, I., and Basiri, M., "Experimental Analysis of Mechanical Properties of Polypropylene in Presence of Graphene Nano Plates and Polyolfine Elastomer in Different Manufacturing Times", *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 11, pp. 225-232, (2016).
- [19] Yarali, E., Baniassadi, M., and Baghani, M., "Numerical Homogenization of Coiled Carbon Nanotube Reinforced Shape Memory Polymer Nanocomposites", *Smart Materials and Structures*, Vol. 28, No. 3, pp. 035026, 2019/02/14, (2019).
- [20] Tran, B. V., "A Simple Model to Predict Effective Conductivity of Multicomponent Matrix-based Composite Materials with High Volume Concentration of Particles", *Composites Part B: Engineering*, Vol. 173, pp. 106997, (2019).
- [21] Javanbakht, Z., Hall, W., and Öchsner, A., "Effective Thermal Conductivity of Fiber Reinforced Composites under Orientation Clustering", *Engineering Design Applications*, Vol. 92, pp. 507-519, Springer, (2019).

- [22] Yves, R., Ahzi, S., Baniassadi, M., and Garmestani, H., "*Applied RVE Reconstruction and Homogenization of Heterogeneous Materials*", John Wiley & Sons, (2016).
- [23] Mazrouei, M., Jokar, H., Baniassadi, M., Abrinia, K., and Haghghi-Yazdi, M., "Evaluating the Effect of Mechanical Loading on the Effective Thermal Conductivity of CNT/polymer Nanocomposites", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, Vol. 11, No. 8, pp. 1738-1744, (2014).

فهرست نمادهای انگلیسی

ρ : چگالی

C : ظرفیت حرارتی

T : دما

t : زمان

k : ضریب رسانش حرارتی

Q : نرخ تولید حرارت داخلی بر واحد حجم

q_x, q_y, q_z : مولفه‌های نرخ جریان حرارتی بر واحد سطح

L : طول RVE

q_{eff} : شار معادل عبوری بین دو سطح موردنظر از RVE

V : حجم کل RVE

V_i : حجم هر المان

q_i : شار عبوری از هر المان

Abstract

The purpose of this study is modeling the effective thermal conductivity of coiled carbon nanotube (CCNT) reinforced polyethylene nanocomposite through finite element approach. Coiled carbon nanotubes are distributed using Monte Carlo algorithm in a uniform manner with different aspect ratios, volume fractions, geometries and distributions of nanoparticles in polyethylene via developing script codes. Using finite element method, thermal analysis is conducted. According to the results, it is shown that increasing the volume fraction, aspect ratio, inner or outer diameter of the CCNTs, thermal conductivity coefficient is increased. Which for 0.71% volume fraction of the CCNTs, thermal conductivity of the nanocomposite increases by 9.35%. While inner or outer diameter of the CCNT, has a slight effect on the thermal conductivity of the nanocomposite by 1%. By increasing the radius of the CCNTs from 15 to 30 nm, thermal conductivity coefficient of the nanocomposite decreases by 2.7%.