

مطالعه خمش هیدروژل‌های حساس به پی‌اچ در تیر دارای خواص گرادیان ترکیبی

امروزه هیدروژل‌ها با توجه به پاسخ منحصر بفرد خود به تحریک‌های خارجی، توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده‌اند. این مواد در اثر تحریک محیطی آب جذب کرده و متورم می‌شوند. هیدروژل‌های گرادیان ترکیبی حساس به پی‌اچ به علت کاربردهای متنوع در صنعت از اهمیت خاصی برخوردار می‌باشند. بنابراین، رفتار مکانیکی این مواد در حین تغییر پی‌اچ، با تعریف یک تابع انرژی متشکل از چهار بخش انرژی کشیدگی شبکه و انرژی‌های ترکیب و انرژی تفکیک در نظر گرفته شده است. با فرض تغییر مشخصات هیدروژل در راستای ضخامت حل نیمه تحلیلی برای خمش این مواد در شرایط کرنش صفحه‌ای ارائه گردیده است. در این میان برای ارزیابی صحت روش ارائه شده، نتایجی از قبیل شعاع، تنش شعاعی و مماسی، میزان زاویه خمیدگی و انحنای خمیدگی حاصل از این روش را با نتایج خروجی از روش اجزا محدود در بازه پی‌اچ ۲ تا ۸ مورد مقایسه قرار داده شده است. همچنین وجود پیوستگی در تنش‌های شعاعی و مماسی که پیش‌تر در ساختارهای چندلایه دیده نمی‌شد، از دیگر مزایای تیر گرادیان ترکیبی می‌باشد.

محمد شجاعی فرد^۱

کارشناسی ارشد

مصطفی باغانی^۲

استادیار

واژه‌های راهنما: مواد گرادیان ترکیبی، هیدروژل حساس به پی‌اچ، خمش یک سازه، حل نیمه تحلیلی، مدل‌سازی اجزا محدود.

۱- مقدمه

هیدروژل‌های هوشمند شبکه‌ای از پلیمرها هستند که با قرارگیری در محیط آبی در پاسخ به محرک‌های خارجی توانایی جذب حجم زیادی از مایع را دارند. هیدروژل‌های هوشمند با اعمال تغییر در محرک‌های خارجی از قبیل دما [۷-۱]، پی‌اچ [۴، ۸]، نور [۹]، غلظت گلوکز [۱۰] و بارگذاری مکانیکی [۱۱، ۱۲] مقادیر متفاوتی آب جذب کرده و متورم می‌شوند. با توجه به رفتار مکانیکی این مواد در پاسخ به محرک‌های خارجی، در کاربردهای متعددی از جمله سنسورها و فعال‌کننده‌ها [۱۳-۱۵]، سویچ‌ها در میکروشیرها [۳]، صنعت دارورسانی [۱۷]، ساخت بافت‌های نرم در کاربردهای بیومکانیکی [۱۸]، لنزهای طبی [۱۹] و ساختارهای خودساخته [۲، ۲۰] مورد استفاده قرار می‌گیرند.

^۱ کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران m.shojaeifard@ut.ac.ir

^۲ نویسنده مسئول، استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران baghani@ut.ac.ir

تاریخ دریافت: ۹۷/۰۸/۲۸، تاریخ پذیرش: ۹۸/۰۴/۱۵

در میان انواع مختلف هیدروژل، هیدروژل‌های حساس به پی اچ یکی از پرکاربردترین انواع هیدروژل‌ها بشمار می‌آیند که محققان زیادی را بخود جذب کرده‌اند [۴، ۸]. برای بکارگیری هیدروژل‌های حساس به پی اچ در موارد مختلف، نیازمند بررسی چارچوب‌های مختلف مدل‌سازی رفتار تورمی این مواد است. در اغلب مطالعات برای مدل‌سازی رفتار تورمی هیدروژل‌ها، با بکارگیری مدل استاتیک- مکانیک فلوری، تابع انرژی معرفی شده را به صورت جمعی از بخش‌های انرژی همچون بخش انرژی کشیدگی پلیمرها و انرژی ترکیب معرفی می‌کنند. با توجه به نوع تحریک هیدروژل به عنوان مثال برای دما [۱، ۷]، پی اچ [۴، ۸] و نور [۹] بخش‌های مختلف انرژی نیز به آن اضافه می‌گردد. در این راستا، مارکومب و همکارانش [۸] با ارائه مدل ساختاری برای هیدروژل‌های حساس به پی اچ، به بررسی رفتار مکانیکی این مواد پرداختند. در این مدل ساختاری تابع انرژی کل به صورت مجموع بخش انرژی کشیدگی پلیمرها، انرژی ترکیب و انرژی جداسازی گروه‌های یونی می‌باشد. این مدل با توجه توانایی برای پیش بینی رفتار هیدروژل‌های حساس به پی اچ، بارها در مطالعات دیگر مورد استفاده قرار گرفته است.

امروزه یکی از روش‌های پرکاربرد برای طراحی سنسورها و شیرها استفاده از ساختارهای خم‌شونده می‌باشد. برای طراحی چنین ساختارهای هوشمندی می‌توان از تحریک‌های خارجی غیرخطی و یا ساختارهای لایه‌ای استفاده کرد تا بتوان خمش مورد نیاز را بر روی سازه مشاهده کرد. برای این منظور، بررسی دقیق بر روی چنین ساختارهای خم‌شونده، از کنار هم قرار دادن مواد متنوعی از قبیل الاستومر و هیدروژل‌ها استفاده شده است [۱۴، ۲۱]. در این بین عبداللهی و همکارانش [۲۲] با مطالعه ساختار دولایه‌ای تشکیل شده از الاستومر و هیدروژل حساس به دما و حل نیمه تحلیلی برای رفتار مکانیکی این مواد مدلی ارائه نموده اند که به خوبی با جواب شبیه‌سازی‌های اجزا محدود مطابقت داشته است. آن‌ها با کاهش دما از مقدار ۳۲۰ تا ۲۸۸ توانستند بخوبی رفتار تغییرشکل بزرگ این ساختار دولایه‌ای را بررسی کنند. خمش در این سازه‌ی دو لایه بعلت تورم لایه‌ی هیدروژلی و عدم تورم لایه‌ی الاستومری است.

در پژوهشی دیگر عبداللهی و همکارانش به بررسی رفتار خمش ساختار سه لایه‌ای هیدروژل-الاستومر-هیدروژل پرداختند [۲۳]. در این مطالعه‌ی مدل‌سازی رفتار سه لایه، با در نظر گرفتن دو هیدروژل متفاوت برای این ساختار هوشمند، حرکت خمشی در دو جهت مختلف از طریق حل نیمه تحلیلی و اجزا محدود مورد بررسی قرار گرفته است.

از دیگر روش‌های طراحی سنسورها به غیر از استفاده از ساختارهای چندلایه‌ای، بکارگیری ساختارهای دارای خواص گرادیان ترکیبی است. گووندیرن و همکارانش در طی آزمایش‌های تجربی پشت سر هم از طریق نفوذ مواد با روش تابش، به ساخت هیدروژل‌ها با خواص گرادیان ترکیبی پرداختند. آن‌ها با بررسی هیدروژل‌های دارای خواص گرادیان ترکیبی توانستند رفتار ناپایداری‌های سطحی این مواد را بخوبی مورد ارزیابی قرار دهند. همچنین با تغییر میزان لینک‌های متقابل پلیمری در راستای ضخامت انواع متفاوتی از رفتار ناپایداری‌های سطحی حاصل در این مواد را مورد مطالعه قرار دادند [۲۴-۲۶]. استفاده از هیدروژل‌های گرادیان ترکیبی در بسیاری دیگر از مطالعات پیشین نیز مورد مطالعه قرار گرفته است [۲۷-۳۰].

این مواد بر خلاف ساختارهای دولایه‌ای و سه‌لایه‌ای دارای فیلد تنش و جابجایی پیوسته هستند که در طراحی سنسورها از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است.

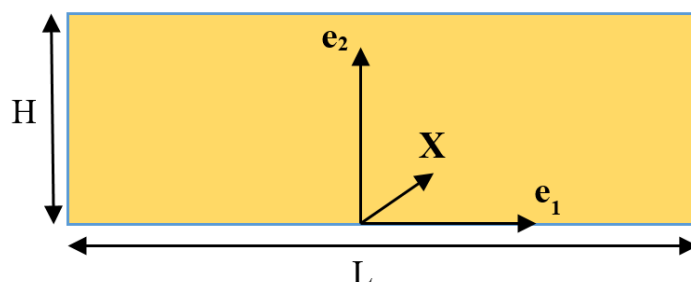
در این پژوهش، با در نظر گرفتن تابع انرژی مدل ساختاری مارکومب و همکارانش رفتار خمشی یک تیر هیدروژل حساس به پی اچ گرادیان ترکیبی مورد مطالعه قرار گرفته است. در تیر هیدروژلی گرادیان ترکیبی، لینک‌های متقابل پلیمری در راستای ضخامت تغییر می‌کنند. در این مدل ساختاری انرژی کشیدگی پلیمرها، انرژی ترکیب و انرژی جداسازی گروه‌های یونی در نظر گرفته شده است. در دستگاه اولیه، ساختار تک لایه‌ای هیدروژل گرادیان ترکیبی، به صورت تیر صاف و در دستگاه کارتزین فرض شده است که بعد از تغییر پی اچ بدلیل متغیر بودن میزان نسبت تورم در نقاط مختلف تیر، این تحریک باعث خمش تیر شده که در این حالت دستگاه استوانه‌ای برای تیر در نظر گرفته شده است. در نهایت روش حل نیمه تحلیلی جهت مطالعه رفتار مکانیکی خمش تیر گرادیان ترکیبی این ساختار ارائه می‌گردد.

۲- هیدروژل گرادیان ترکیبی حساس به پی اچ

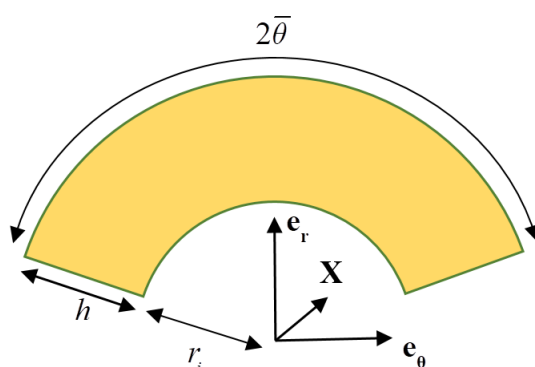
در این پژوهش خمش تیر هیدروژل حساس به پی اچ گرادیان ترکیبی ناشی از اعمال محرک خارجی تغییر پی اچ مورد بررسی قرار گرفته است. از این رو در زیر بخش‌های آتی به ترتیب فرضیات هندسی و مکانیکی حاکمه بر مسئله تیر تحت خمش در شرایط کرنش صفحه‌ای و سپس تابع انرژی آزاد هیدروژل حساس به پی اچ مورد مطالعه قرار گرفته است.

۲-۱- روابط مولفه‌های کرنش و تنش

همان‌گونه که در شکل (۱) قابل مشاهده است، یک لایه هیدروژل حساس به پی اچ گرادیان ترکیبی در نظر گرفته شده است که در راستای ضخامت تیر مشخصات بصورت تابعی از ارتفاع ضخامت تغییر می‌کنند. در دستگاه اولیه که تحریک خارجی هنوز اعمال نشده است، تیر در حالت مستطیل صاف می‌ماند (شکل (۱)). سپس با اعمال تغییر پی اچ، تیر گرادیان ترکیبی خم می‌شود. این پدیده ناشی از وجود تفاوت در لینک‌های متقابل پلیمری است، زیرا میزان نرمی و تورم در نواحی مختلف در راستای ضخامت متفاوت است که این امر باعث خمش تیر می‌شود. با توجه به تغییر شکل تیر به صورت دایروی، برای بررسی رفتار هیدروژل در حالت ثانویه، دستگاه مختصات استوانه‌ای در این وضعیت نظر گرفته شده است. قابل ذکر است که تمامی فرمولیشن ارائه شده با در نظر گرفتن فرض وضعیت کرنش صفحه‌ای برقرار می‌باشد.



شکل ۱- وضعیت اولیه تیر هیدروژل گرادیان ترکیبی حساس به پی اچ



شکل ۲- وضعیت تغییرشکل یافته تیر هیدروژل گرادیان ترکیبی حساس به پی‌اچ

با توجه به شکل (۱)، راستاهای X_1 و X_2 که راستای درون صفحه را تشکیل می‌دهند به ترتیب در راستای طول و ضخامت تیر بوده و راستای X_3 راستای خارج صفحه در نظر گرفته شده است. بردار موقعیت فرضی طبق دستگاه مختصات کارتزین در حالت اولیه به صورت زیر تعریف می‌گردد.

$$\mathbf{X} = X_1 \mathbf{e}_1 + X_2 \mathbf{e}_2 + X_3 \mathbf{e}_3 \quad (1)$$

که در این رابطه داریم:

$$\begin{cases} X_1 \in [-L/2, L/2] \\ X_2 \in [0, H] \\ X_3 \in [-\infty, \infty] \end{cases} \quad (2)$$

که به ترتیب در آن L و H ، طول و ضخامت لایه‌ی هیدروژل گرادیان ترکیبی حساس به پی‌اچ می‌باشد. در تیر مورد بررسی، مقدار لینک‌های متقابل پلیمری $N = N(X_2)$ از ویژگی‌هایی است که در راستای ضخامت تیر متغیر می‌باشد و باعث بروز ویژگی‌های متفاوت در این راستا می‌گردد. این تغییر لینک‌های متقابل پلیمری در راستای ضخامت باعث خمش تیر هیدروژلی گرادیان ترکیبی می‌گردد. همچنین همان‌طور که در شکل (۲) قابل مشاهده است، حالت ظنهایی تغییرشکل یافته‌ی لایه هیدروژلی بصورت مقطعی از دایره بوجود می‌آید. بنابراین بردار موقعیت در حالت تغییرشکل یافته را در مختصات استوانه‌ای بصورت زیر قابل تعریف می‌باشد.

$$\mathbf{X} = r \mathbf{e}_r + \theta \mathbf{e}_\theta + z \mathbf{e}_z \quad (3)$$

که داریم:

$$\begin{cases} r \in [r_1, r_2] \\ \theta \in [-\bar{\theta}, \bar{\theta}] \\ z \in [-\infty, \infty] \end{cases} \quad (4)$$

که در این رابطه شعاع‌های داخلی و خارجی به صورت r_1 و r_2 تعریف شده‌اند و $\bar{\theta}$ نصف زاویه خمش تیر می‌باشد. با توجه به نگاشت بین دو مختصات قابل مشاهده است که صفحه‌ی گذرنده از راستای X_2 دقیقاً بر صفحه r و صفحه‌ی گذرنده از راستای X_1 دقیقاً بر صفحه θ می‌افتد. بنابراین با در نظر گرفتن $\theta = \theta(X_1)$ ، $r = r(X_2)$ و $z = X_3$ ، تانسور گرادیان تغییرشکل برای لایه هیدروژل گرادیان ترکیبی حساس به پی اچ بصورت زیر قابل تعریف است [۳۱].

$$\mathbf{F}_{11} = \frac{dr}{dX_2}, \mathbf{F}_{22} = r \frac{2\bar{\theta}}{L}, \mathbf{F}_{33} = 1 \quad (5)$$

که در این رابطه شعاع در حالت تغییرشکل یافته به صورت r قابل تعریف می‌باشد. کشیدگی‌های اصلی در مختصات استوانه‌ای با توجه به تانسور گرادیان تغییرشکل برای لایه هیدروژل گرادیان ترکیبی حساس به پی اچ بصورت زیر تعریف می‌گردد.

$$\lambda_r = \frac{dr}{dX_2}, \quad \lambda_\theta = r \frac{2\bar{\theta}}{L}, \quad \lambda_z = 1 \quad (6)$$

۲-۲- تابع انرژی آزاد هیدروژل حساس به پی اچ

برای بررسی رفتار تورم هیدروژل حساس به پی اچ در این بخش، به مطالعه مدل ساختاری مارکومب و همکارانش [۸] پرداخته شده است. بر اساس این مدل ساختاری، تابع انرژی آزاد هلمهولتز از ترکیب بخش‌های متفاوت رفتاری هیدروژل حساس به پی اچ بدست آمده است. این انرژی از بخش‌های انرژی کشیدگی پلیمرها، انرژی ترکیب و انرژی تفکیک گروه‌های یونی تشکیل شده است.

$$W_{\mathbf{F}, C_+, C_{H^+}, C_-} = W_{net} \mathbf{F} + W_{sol} \mathbf{F} + W_{ion} \mathbf{F}, C_+, C_{H^+}, C_- + W_{dis} \mathbf{F}, C_+, C_{H^+}, C_- \quad (7)$$

انرژی کشش شبکه پلیمری در این مدل ساختاری بصورت زیر تعریف می‌گردد.

$$W_{net} \mathbf{F} = \frac{1}{2} N k_B T \left[I - 3 - 2 \log J \right] \quad (8)$$

که در این رابطه N ، T ، K_B و I به ترتیب چگالی زنجیرهای پلیمری، دمای مطلق و ثابت بولتزمن و پایای اول تانسور گرادیان تغییرشکل می‌باشد. همچنین انرژی آزاد ترکیب سیال به صورت زیر قابل تعریف است.

$$W_{sol} \mathbf{F} = \frac{k_B T}{\nu} \left[J - 1 \log \left(1 - \frac{1}{J} \right) - \frac{\chi}{J} \right] \quad (9)$$

که در این رابطه ν ، J و $\chi(J, T)$ حجم یک مولکول سیال، پایای سوم تانسور گرادیان تغییرشکل و پارامتر بی بعد است که بصورت زیر بیان می‌گردند.

$$\chi(J, T) = X_0 + \frac{X_1}{J} \quad (10)$$

که

$$X_0 = A_0 + B_0 T, \quad X_1 = A_1 + B_1 T, \quad J = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \quad (11)$$

و A_0, A_1, B_0, B_1 پارامترهای مادی می‌باشد. همچنین انرژی ناشی از تقابل یون‌های متحرک و سیال به صورت زیر قابل بیان است.

$$W_{ion} \mathbf{F}, C_m = KT \left\{ \sum_m C_m \left[\log \frac{C_m}{J c_m^{ref}} - 1 \right] \right\} \quad (12)$$

که در این رابطه m یون‌های متحرک می‌باشد که شامل یون‌های هیدروژن، یون‌های مثبت و منفی می‌باشد. همچنین مقدار مرجع غلظت یون‌های متحرک می‌باشد. انرژی ناشی از جداسازی یون‌های اسیدی به صورت زیر قابل بیان است.

$$W_{dis} \mathbf{F}, C_m = KT \left[C_{A^-} \log \left(\frac{C_{A^-}}{C_{A^-} + C_{AH}} \right) + C_{AH} \log \left(\frac{C_{AH}}{C_{A^-} + C_{AH}} \right) \right] + \gamma C_{A^-} \quad (13)$$

که در این رابطه، زیروندهای AH و A به ترتیب مربوط به گروه‌های اسیدی و گروه‌های ثابت می‌باشند. همچنین پارامتر γ مقدار آنتالپی افزایش یافته در حالت جداسازی گروه‌های اسیدی می‌باشد. با فرض خنثی بودن ژل از نظر الکتریکی، روابط زیر بین غلظت‌های یون‌های موجود در مسئله برقرار است.

$$C_{H^+} + C_+ = C_{A^-} + C_- , \quad C_{A^-} + C_{AH} = f/v \quad (14)$$

که در این رابطه f تعداد گروه‌های اسیدی متصل به شبکه پلیمری می‌باشد که به مونومر تفکیک شده است. حال با توجه به انرژی آزاد تعریف شده که مجموع تمامی انرژی‌های فوق‌الذکر است، تنش کوشی به صورت زیر قابل تعریف است.

$$\sigma_i = \frac{\lambda_i}{J} \frac{\partial W}{\partial \lambda_i} \text{ for } (i = 1, 2, 3) \quad (15)$$

با استفاده از رابطه بالا، تنش کوشی به صورت زیر محاسبه می‌گردد.

$$\sigma_i = KT \left[N X_2 / J \lambda_i^2 - 1 + \frac{1}{v} \left[\log \frac{1 - 1/J}{1 + 1/J + \chi/J^2} \right] - \sum_m c_m - c_m^{ref} \right] \quad (16)$$

که c_m بیان‌کننده‌ی غلظت یون m در حالت جاری می‌باشد. برای ساده‌سازی روابط بالا بر حسب C_+ و C_{H^+} ، روابط دونان به صورت زیر در نظر گرفته شده است.

$$\frac{C_+}{c_+^{ref}} = \frac{C_{H^+}}{c_{H^+}^{ref}} , \quad \frac{C_-}{c_-^{ref}} = \left(\frac{C_{H^+}}{c_{H^+}^{ref}} \right)^{-1} \quad (17)$$

که از تعادل تفکیک شیمیایی داریم:

$$\frac{c_{H+}(c_{H+} + c_+ - c_-)}{(f/v)(\det \mathbf{F})^{-1} - (c_{H+} + c_+ - c_-)} = N_A K_a \quad (18)$$

که در این رابطه $N_A = 6.023 \times 10^{23}$ عدد آووگادرو و K_a ثابت تفکیک یونی می‌باشد. با بازنویسی روابط بالا بر حسب C_{H+} داریم:

$$A_1 c_{H+}^3 + A_2 c_{H+}^2 + A_3 c_{H+} + A_4 = 0 \quad (19)$$

که

$$\begin{aligned} A_1 &= v^3 \left(1 + c_+^{ref} / c_{H+}^{ref}\right) \\ A_2 &= v^5 A_1 N_A K_a c_{H+}^{ref} c_-^{ref} \\ A_3 &= -v^3 c_{H+}^{ref} c_-^{ref} - v^2 N_A K_a f / J \\ A_4 &= -v^3 N_A K_a c_{H+}^{ref} c_-^{ref} \end{aligned} \quad (20)$$

با محاسبه تنش‌های اصلی بر حسب شعاع و مشتق شعاع نسبت به راستای X_2 و زاویه خمیدگی، روابط زیر قابل بیان هستند.

$$\frac{\sigma_r v}{KT} = \frac{1}{\lambda_0^6 \bar{\theta}^2 r^2 r'^2} \left[\begin{aligned} &-4\lambda_0^6 \bar{\theta}^2 r^2 r'^2 \ln(1 - L/2\lambda_0^3 \bar{\theta} r r') + \chi L^2 + \\ &-2Nv \lambda_0^3 r' L \bar{\theta} r - 2L\lambda_0^3 r' \bar{\theta} r + 2LNv r'^3 r \lambda_0^5 \bar{\theta} \end{aligned} \right] - \Pi_{ion} \quad (21)$$

$$\frac{\sigma_\theta v}{KT} = \frac{1}{\lambda_0^6 \bar{\theta}^2 r^2 r'^2 L} \left[\begin{aligned} &4\lambda_0^6 r'^2 L \bar{\theta}^2 r^2 \ln(1 - L/2\lambda_0^3 r' \bar{\theta} r) + \chi L^3 + \\ &+ 8Nv r' r^3 \lambda_0^5 \bar{\theta}^3 + 2L^2 Nv r' r \lambda_0^3 \bar{\theta} + 2L^2 \lambda_0^3 \bar{\theta} r' r \end{aligned} \right] - \Pi_{ion} \quad (22)$$

که در آن

$$\Pi_{ion} = c_{H+} + \frac{c_+^{ref} c_{H+}^{ref}}{c_{H+}} + \frac{c_{H+} c_-^{ref}}{c_{H+}^{ref}} - c_{H+}^{ref} - c_-^{ref} - c_+^{ref} \quad (23)$$

می‌باشد.

۳- حل نیمه تحلیلی تورم هیدروژل حساس به پی اچ در حال خمش

برای محاسبه مجهولات موجود در روابط تنش قسمت قبل، مجموعه معادلاتی حاکم که بر تیر هیدروژلی گرادیان ترکیبی حساس به پی اچ برقرار است بکار برده شده است. اولین معادله، برقراری معادله تعادل برای سازه هوشمند می‌باشد. معادله‌ی تعادل موجود در این تیر بصورت زیر می‌باشد.

$$\frac{\partial \sigma_r / \partial X_2}{\partial r / \partial X_2} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} = 0 \quad (24)$$

همچنین نیرو و تنش خالص در راستای مماسی برابر صفر می‌باشد. بنابراین داریم:

$$\int_0^H \sigma_\theta X_2 \frac{dr X_2}{dX_2} dX_2 = 0 \quad (25)$$

$$\int_0^H r X_2 \sigma_\theta X_2 \frac{dr X_2}{dX_2} dX_2 = 0 \quad (26)$$

که با برقراری روابط ذکر شده، یک معادله غیرخطی بدست می‌آید که نیاز اعمال شرط مرزی متناسب مسئله مورد نظر است.

$$B_1 r'' + B_2 r'^5 + B_3 r'^4 + B_4 r'^3 + B_5 r'^2 = 0 \quad (27)$$

که

$$B_1 = c_{H^+}^{ref} c_{H^+} \left[Nv \left(2L^2 r'^4 r^2 \lambda_0^6 \bar{\theta}^2 + 2L^2 r'^2 r^2 \lambda_0^6 \bar{\theta}^2 + L^3 r'^3 r \lambda_0^5 \bar{\theta} \right) + \right. \\ \left. r L^3 r \lambda_0^3 \bar{\theta} (1 - Nv - 2\chi) + L^4 \chi \right]$$

$$B_2 = (8Lr^2 \lambda_0^9 \bar{\theta}^3) \left[\begin{aligned} & c_{H^+}^{ref} c_{H^+} \ln(1 - L/2\lambda_0^3 r' \bar{\theta} r) + c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^{ref} c_{H^+} + \\ & -c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^2 + -c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^2 + c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^2 - c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^{ref} + \\ & + c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^{ref} c_{H^+} - L\lambda_0^{-1} \bar{\theta}^{-1} c_{H^+}^{ref} c_{H^+} N' / 4 \end{aligned} \right]$$

$$B_3 = 4L^2 r \lambda_0^6 \bar{\theta}^2 \left[\begin{aligned} & + c_{H^+}^{ref} c_{H^+} \ln(1 - L/2\lambda_0^3 r' \bar{\theta} r) + c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^2 + \\ & -c_{H^+}^{ref} c_{H^+} c_{H^+}^{ref} + 0.5Nv c_{H^+}^{ref} c_{H^+} + c_{H^+}^{ref} c_{H^+} + \\ & c_{H^+}^2 c_{H^+}^{ref} - c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^2 + c_{H^+}^{ref} c_{H^+}^2 - c_{H^+}^{ref} c_{H^+} c_{H^+}^{ref} + \\ & 2c_{H^+}^{ref} c_{H^+} Nv r^2 \lambda_0^2 \bar{\theta}^2 - c_{H^+}^{ref} c_{H^+} L\lambda_0^{-1} \bar{\theta}^{-1} N' / 4 \end{aligned} \right] \quad (28)$$

$$B_4 = c_{H^+}^{ref} c_{H^+} \left[-4LNv r^2 \lambda_0^5 \bar{\theta}^3 + L^3 \lambda_0^3 \bar{\theta} (Nv - 1) + 4L^2 r^2 \lambda_0^6 \bar{\theta}^2 N' \right]$$

$$B_5 = +L^3 r \lambda_0^3 \bar{\theta} c_{H^+}^{ref} c_{H^+} N'$$

با توجه به مسئله خمش هیدروژل حساس به پی‌اچ فرضیات متناسب مورد استفاده در این پژوهش را می‌توان در چند مورد بررسی کرد. ابتدا با توجه به فرض استفاده از هیدروژل گرادیان ترکیبی، در این لایه‌ی هیدروژل لینک‌های متقابل پلیمری $N = N(X_2)$ در راستای ضخامت همانند دیگر مطالعات انجام شده به صورت زیر در نظر گرفته شده است.

$$Nv X_2 = Nv_B + Nv_T - Nv_B X_2/H \quad (29)$$

که در این رابطه Nv_B و Nv_T به ترتیب لینک‌های متقابل پلیمری در سطح بالا و پایین لایه هیدروژل حساس به پی‌اچ می‌باشند. برای بدست آوردن فیلد تنش و جابه‌جایی در لایه هیدروژلی، از روش ۳ مرحله‌ای Lobatto IIIa formula که توسط کیرزنکا و همکارانش ارائه گردیده استفاده شده است [۳۲]. برای این منظور، با توجه به این که در سطح داخلی و خارجی استوانه حاصله تنش شعاعی وجود ندارد، بنابراین شرایط مرزی بصورت زیر برقرار می‌شود:

$$\begin{cases} \text{inner surface} \Rightarrow \sigma_r|_{X_2=0} = 0 \\ \text{outer surface} \Rightarrow \sigma_r|_{X_2=H} = 0 \end{cases} \quad (30)$$

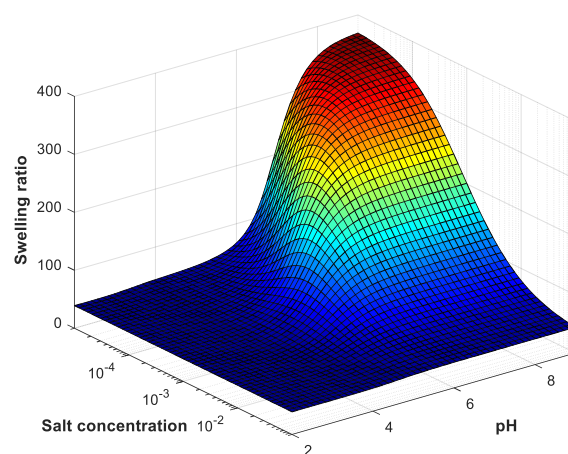
برای این منظور در مرحله نخست شرایط اولیه حدس زده شده و با برقراری معادله غیر خطی حاصله و اعمال شرایط مرزی بالا، میزان زاویه و شعاع و مشتق شعاع در حالت تغییرشکل یافته بدست می‌آیند. با تکرار این روش تکراری تا آنجا که میزان خطا به کمتر از مقدار تعیین شده برسد، جواب مورد نظر بوست می‌آید. در انتها با جایگذاری مجهولات بدست آمده در روابط تنش و کرنش، فیلد تنش و کرنش در هر بخش محاسبه می‌گردد.

۴- نتایج روش نیمه تحلیلی و مدل سازی اجزا محدود

برای بررسی رفتار تورمی هیدروژل حساس به پی اچ، در این قسمت نتایج حاصل از حل نیمه تحلیلی با نتایج حاصل از روش اجزا محدود که با نوشتن کد سابروتین UHYPER انجام گرفته است را مورد بررسی قرار دادیم. پارامترهای بکارگیری شده در این قسمت در جدول (۱) ذکر شده‌اند.

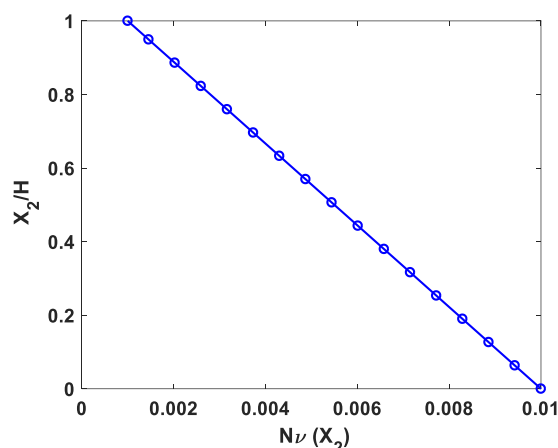
جدول ۱- پارامترهای مادی هیدروژل حساس به پی اچ در معادلات ساختاری

$k_B [J/K]$	Nv_B	Nv_T	$L [m]$	$H [m]$
۱,۳۸e-۲۳	۰,۰۱	۰,۰۰۱	۰,۰۳	۰,۰۱
$\nu [m^3]$	A_0	A_1	$B_0 [1/K]$	$B_1 [1/K]$
۳e-۲۹	-۱۲,۹۴۷	۱۷,۹۲	۰,۰۴۴۹ ۶	-۰,۰۵۶۹

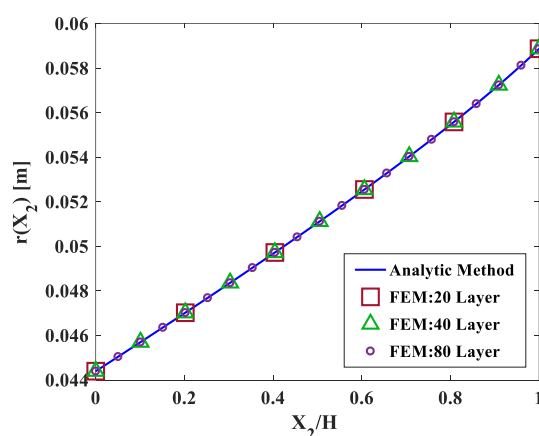


شکل ۳- نتایج نسبت تورم حاصل از مسئله تورم آزاد هیدروژل حساس به پی اچ

در مرحله نخست، برای ارزیابی صحت کد سابروتین UHYPER مسئله‌ی تورم آزاد هیدروژل حساس به پی‌اچ با فرض لینک متقابل پلیمری برابر با $Nv = 0.01, 0.005, 0.001$ مورد بررسی قرار گرفته است. همان‌طور که در شکل زیر قابل مشاهده است، نسبت تورم با استفاده از مدل‌سازی اجزا محدود برای هیدروژل حساس به پی‌اچ به صورت نمودار سه بعدی بر اساس مقادیر مختلف پی‌اچ و غلظت نمک ارائه شده است. شکل (۳) بخوبی دقت بالای انطباق داده‌های ارائه شده در پژوهش [۸] و نتایج داده‌های کد سابروتین ارائه شده را نشان می‌دهد. بعد از اطمینان از صحت سابروتین هیدروژل حساس به پی‌اچ ارائه شده، صحت روش حل نیمه تحلیلی با مقایسه نتایج آن با حل اجزا محدود مسئله مشابه مورد ارزیابی قرار گرفته است. در این راستا، خمش تیر متشکل از هیدروژل حساس به پی‌اچ با در نظر گرفتن تغییرات لینک‌های متقابل پلیمری در راستای ضخامت تیر مورد مطالعه قرار گرفته است. قابل ذکر است با افزایش ارتفاع در راستای ضخامت میزان لینک‌های متقابل پلیمری کاهش می‌یابد. در شکل (۴) تابعیت مقادیر لینک‌های متقابل پلیمری با تغییر ارتفاع در راستای ضخامت بخوبی دیده می‌شود.

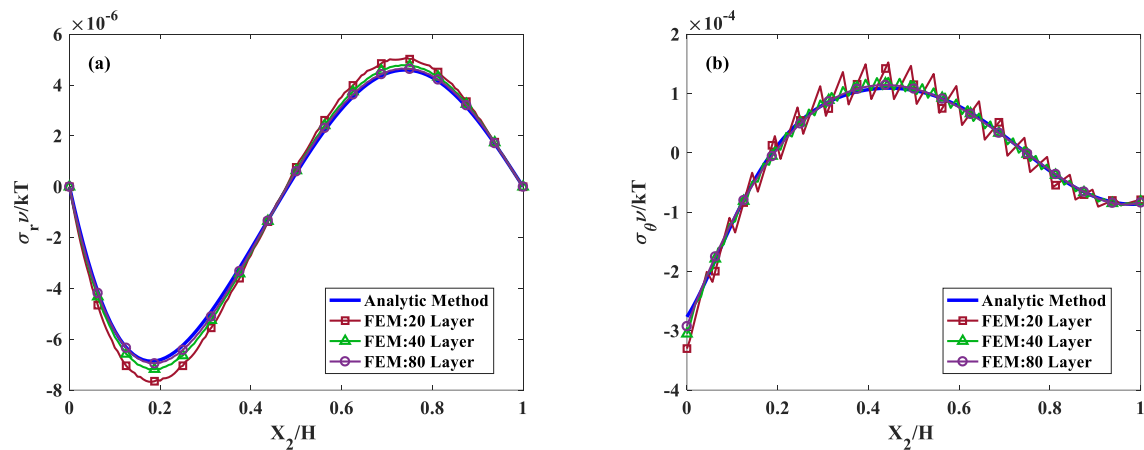


شکل ۴- مقادیر لینک‌های متقابل پلیمری با تغییر ارتفاع در راستای ضخامت

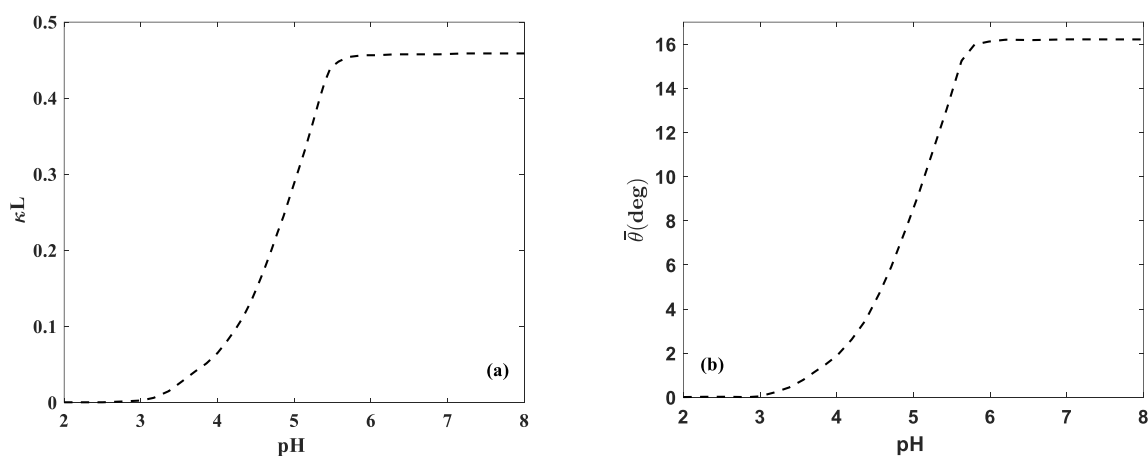


شکل ۵- مقادیر شعاع در هیدروژل‌های گرادینان ترکیبی با تغییر پی‌اچ بین ۲ تا ۸ با تغییر ارتفاع در راستای ضخامت

در این پژوهش با تغییر پی اچ از ۲ تا ۸، بعلت عدم یکنواختی ویژگی‌های هیدروژل حساس به پی اچ در راستای ضخامت، تیر مورد نظر در یک سو دچار خمیدگی می‌شود. با توجه به حل نیمه تحلیلی ارائه شده، می‌توان تغییرات شعاع در راستای ضخامت در طی این فرایند را محاسبه کرد. برای ارزیابی روش نیمه تحلیلی مورد بحث، مقادیر شعاع بوسیله روش حل اجزا محدود در مسئله مشابه بررسی شده است. در شکل (۵) دقت بالای محاسبات با در نظر گرفتن تعداد لایه‌های متفاوت ۴۰، ۲۰، ۱۰ و ۸۰ برای مدل‌سازی تیر هیدروژل گرادیان ترکیبی در مقایسه با نتایج روش حل نیمه تحلیلی قابل مشاهده است. همچنین برای تکمیل ارزیابی صحت حل مورد مطالعه، علاوه بر جابه‌جایی، تنش‌های شعاعی و مماسی را از طریق روش حل نیمه تحلیلی و اجزا محدود برای تعداد لایه‌های ۱۰، ۲۰، ۴۰ و ۸۰ مورد مقایسه قرار گرفته است. همان‌طور که در شکل (۲) قابل نمایش است، با افزایش تعداد لایه‌های مدل‌سازی شده در تیر در حل اجزا محدود، تنش‌های شعاعی و مماسی با دقت بالایی به سمت حل نیمه تحلیلی همگرا می‌شوند. بعد از در نظر گرفتن ۸۰ لایه میزان همگرایی به شدت افزایش یافته و انطباق خوبی قابل مشاهده است.



شکل ۶- مقادیر تنش (a) شعاعی و (b) مماسی در هیدروژل گرادیان ترکیبی با تغییر پی اچ بین ۲ تا ۸



شکل ۷- مقادیر (a) زاویه خمیدگی و (b) انحنای خمیدگی در هیدروژل گرادیان ترکیبی با تغییر پی اچ بین ۲ تا ۸

همچنین با توجه به اهمیت زیاد میزان زاویه خمیدگی و انحنای خمیدگی در طراحی سنسورها و شیرهای هوشمند، این دو فاکتور نیز در دو روش مورد بحث مورد مطالعه قرار گرفته است که در شکل زیر زاویه خمیدگی و انحنای خمیدگی در بازه پی‌اچ ۲ تا ۸ قابل مشاهده می‌باشد.

۵- بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش با توجه به رفتار منحصر بفرد هیدروژل‌های حساس به پی‌اچ گرادیان ترکیبی، که به طور چشمگیری در کاربردهایی از قبیل طراحی سنسورها، عملگرها و شیرها قابل استفاده می‌باشند، به مطالعه تورم این مواد با تغییر پی‌اچ در بازه ۲ تا ۸ پرداخته شده است. تیر مستقیم هیدروژلی حساس به پی‌اچ گرادیان ترکیبی با توجه به وجود تفاوت مقادیر لینک‌های متقابل پلیمری در راستای ضخامت تیر، در اثر تحریک خارجی، شروع به خمش می‌کند. این امر بعلاوه تفاوت در میزان تورم نقاط مختلف تیر در راستای عرضی می‌باشد. قابل ذکر است با تغییر پی‌اچ در مسیر عکس مرحله اول می‌توان تیر خمیده را به حالت اول خود بازگردانید. در این پژوهش با ارائه روش حل نیمه تحلیلی برای این مواد، رفتار خمش آن‌ها را در شرایط کرنش صفحه‌ای مورد مطالعه قرار داده است.

برای بررسی صحت روش مورد بحث، با استفاده از روش حل اجزا محدود و نوشتن سابروتین UHYPER برای این مواد، نتایج حاصل از هر دو روش مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به انطباق بالای نتایج از قبیل شعاع، تنش شعاعی و تنش مماسی، میزان زاویه خمیدگی و انحنای خمیدگی می‌توان دریافت که حل ارائه شده، بخوبی رفتار این مواد را پیش‌بینی می‌کند. در حل اجزا محدود برای مدلسازی تیر گرادیان ترکیبی، تیر را در راستای ضخامت به تعداد لایه‌هایی تقسیم کرده که در آن مشخصات هر لایه ثابت و با بقیه لایه‌ها متفاوت می‌باشد. با افزایش تعداد لایه‌ها می‌توان به حالت مشابه با حل نیمه تحلیلی دست یافت. در این راستا حل اجزا محدود برای تعداد لایه‌های متفاوت ۱۰، ۲۰، ۴۰ و ۸۰ مورد بررسی قرار گرفته است. که در تعداد لایه‌های بالاتر تطابق بسیار خوبی بین حل نیمه تحلیلی و اجزا محدود مشاهده می‌شود.

مراجع

- [1] Chester, S.A., and Anand, L., "A Thermo-mechanically Coupled Theory for Fluid Permeation in Elastomeric Materials: Application to Thermally Responsive Gels", *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, Vol. 59, No. 10, pp. 1978-2006, (2011).
- [2] Guo, W., Li, M., and Zhou, J., "Modeling Programmable Deformation of Self-folding All-polymer Structures with Temperature-sensitive Hydrogels", *Smart Materials Structures*, Vol. 22, No. 11, pp. 115028, (2013).
- [3] Mazaheri, H., Baghani, M., Naghdabadi, R., and Sohrabpour, S., "Inhomogeneous Swelling Behavior of Temperature Sensitive PNIPAM Hydrogels in Micro-valves: Analytical and Numerical Study", *Smart Materials Structures*, Vol. 24, No. 4, pp. 045004, (2015).

- [4] Mazaheri, H., Baghani, M., Naghdabadi, R., and Sohrabpour, S., "Coupling Behavior of the pH/temperature Sensitive Hydrogels for the Inhomogeneous and Homogeneous Swelling", *Smart Materials Structures*, Vol. 25, No. 8, pp. 085034, (2016).
- [5] Mazaheri, H., Baghani, M., and Naghdabadi, R., "Inhomogeneous and Homogeneous Swelling Behavior of Temperature-sensitive Poly (N-isopropylacrylamide) Hydrogels", *Journal of Intelligent Material Systems Structures*, Vol. 27, No. 3, pp. 324-336, (2016).
- [6] Morimoto, T., and Ashida, F., "Temperature-responsive Bending of a Bilayer Gel", *International Journal of Solids Structures*, Vol. 56, pp. 20-28, (2015).
- [7] Cai, S., and Suo, Z., "Mechanics and Chemical Thermodynamics of Phase Transition in Temperature-sensitive Hydrogels", *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, Vol. 59, No. 11, pp. 2259-2278, (2011).
- [8] Marcombe, R., Cai, S., Hong, W., Zhao, X., Lapusta, Y., and Suo, Z., "A Theory of Constrained Swelling of a pH-sensitive Hydrogel", *Soft Matter*, Vol. 6, No. 4, pp. 784-793, (2010).
- [9] Toh, W., Ng, T.Y., Hu, J., and Liu, Z., "Mechanics of Inhomogeneous Large Deformation of Photo-thermal Sensitive Hydrogels", *International Journal of Solids Structures*, Vol. 51, No. 25-26, pp. 4440-4451, (2014).
- [10] Li, H., and Luo, R., "Modeling the Influence of Initial Geometry on the Equilibrium Responses of Glucose-sensitive Hydrogel", *Journal of Intelligent Material Systems Structures*, Vol. 22, No. 8, pp. 715-722, (2011).
- [11] Chester, S.A., and Anand, L., "A Coupled Theory of Fluid Permeation and Large Deformations for Elastomeric Materials", *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, Vol. 58, No. 11, pp. 1879-1906, (2010).
- [12] Doi, M., "Gel Dynamics", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 78, No. 5, pp. 052001, (2009).
- [13] Guenther, M., Gerlach, G., and Wallmersperger, T., "Non-linear Effects in Hydrogel-based Chemical Sensors: Experiment and Modeling", *Journal of Intelligent Material Systems Structures*, Vol. 20, No. 8, pp. 949-961, (2009).
- [14] Ionov, L., "Biomimetic Hydrogel Based Actuating Systems", *Advanced Functional Materials*, Vol. 23, No. 36, pp. 4555-4570, (2013).
- [15] Richter, A., "*Hydrogels for Actuators*", in *Hydrogel Sensors and Actuators*, Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 221-248, (2009).
- [16] Chávez, J.P., Voigt, A., Schreiter, J., Marschner, U., Siegmund, S., and Richter, A., "A New Self-excited Chemo-fluidic Oscillator Based on Stimuli-responsive Hydrogels: Mathematical Modeling and Dynamic Behavior", *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 40, No. 23-24, pp. 9719-9738, (2016).
- [17] Hoffman, A.S., "Hydrogels for Biomedical Applications", *Advanced Drug Delivery Reviews*, Vol. 64, pp. 18-23, (2012).

- [18] Sharabi, M., D., Varssano, R., Eliasy, Y., Benayahu, D., Benayahu, and Haj-Ali, R., "Mechanical Flexure Behavior of Bio-inspired Collagen-reinforced Thin Composites", *Composite Structures*, Vol. 153, pp. 392-400, (2016).
- [19] Zeng, X., Li, C., Zhu, D., Cho, H.J., and Jiang, H., "Tunable Microlens Arrays Actuated by Various Thermo-responsive Hydrogel Structures", *Journal of Micromechanics Microengineering*, Vol. 20, No. 11, pp. 115035, (2010).
- [20] Guan, J., H. He, D.J., Hansford, and Lee, L.J., "Self-folding of Three-dimensional Hydrogel Microstructures", *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 109, No. 49, pp. 23134-23137, (2005).
- [21] Hu, Z., Zhang, X., and Li, Y., "Synthesis and Application of Modulated Polymer Gels", *Science*, Vol. 269, pp. 525-527, (1995).
- [22] Abdolahi, J., Baghani, M., Arbabi, N., and Mazaheri, H., "Analytical and Numerical Analysis of Swelling-induced Large Bending of Thermally-activated Hydrogel Bilayers", *International Journal of Solids Structures*, Vol. 99, pp. 1-11, (2016).
- [23] Abdolahi, J., Baghani, M., Arbabi, N., and Mazaheri, H., "Finite Bending of a Temperature-sensitive Hydrogel Tri-layer: An Analytical and Finite Element Analysis", *Composite Structures*, Vol. 164, pp. 219-228, (2017).
- [24] Guvendiren, M., Burdick, J.A., and Yang, S., "Kinetic Study of Swelling-induced Surface Pattern Formation and Ordering in Hydrogel Films with Depth-wise Crosslinking Gradient", *Soft Matter*, Vol. 6, No. 9, pp. 2044-2049, (2010).
- [25] Guvendiren, M., Burdick, J.A., and Yang, S., "Solvent Induced Transition from Wrinkles to Creases in Thin Film Gels with Depth-wise Crosslinking Gradients", *Soft Matter*, Vol. 6, No. 22, pp. 5795-5801, (2010).
- [26] Guvendiren, M., S., Yang, and Burdick, J.A., "Swelling Induced Surface Patterns in Hydrogels with Gradient Crosslinking Density", *Advanced Functional Materials*, Vol. 19, No. 19, pp. 3038-3045, (2009).
- [27] Wu, Z., Bouklas, N., and Huang, R., "Swell-induced Surface Instability of Hydrogel Layers with Material Properties Varying in Thickness Direction", *International Journal of Solids Structures*, Vol. 50, No. 3-4, pp. 578-587, (2013).
- [28] Wu, Z., Bouklas, N., Liu, Y., and Huang, R., "Onset of Swell-induced Surface Instability of Hydrogel Layers with Depth-wise Graded Material Properties", *Mechanics of Materials*, Vol. 105, pp. 138-147, (2017).
- [29] Wu, Z., Meng, J., Liu, Y., Li, H., and Huang, R., "A State Space Method for Surface Instability of Elastic Layers with Material Properties Varying in Thickness Direction", *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 81, No. 8, pp. 081003, (2014).
- [30] Roccabianca, S., Gei, M., and Bigoni, D., "Plane Strain Bifurcations of Elastic Layered Structures Subject to Finite Bending: Theory Versus Experiments", *IMA Journal of Applied Mathematics*, Vol. 75, No. 4, pp. 525-548, (2010).

- [31] Kierzenka, J., and Shampine, L.F., "A BVP Solver that Controls Residual and Error", Journal of Numerical Analysis, Industrial and Applied Mathematics, Vol. 3, No. 1-2, pp. 27-41, (2008).

فهرست نمادهای انگلیسی

- r : شعاع تیر در نقاط مختلف
 X_2 : راستای ضخامت تیر
 L : طول تیر
 r_1 : شعاع داخلی تیر
 r_2 : شعاع خارجی تیر
 J : پایای سوم تانسور گرادیان تغییرشکل
 k_B : ثابت بولتزمن
 N_V : مقادیر لینک‌های متقابل پلیمری
 T : دما
 A_0, A_1, B_0, B_1 : پارامتر مادی
 C : غلظت یون مورد نظر
 f : تعداد گروه‌های اسیدی متصل به شبکه پلیمری که به مونومر تفکیک شده‌اند
 N_a : عدد آووگادرو
 K_a : ثابت تفکیک یونی

نمادهای یونانی

- $\bar{\theta}$: نصف زاویه خمیدگی
 χ : پارامتر بی‌بعد ترکیب
 λ : نسبت تورم
 v : حجم یک مولکول سیال
 γ : مقدار آنتالپی افزایش یافته در حالت تفکیک گروه‌های اسیدی

زیرنویس

- r : راستای شعاعی
 θ : راستای مماسی
 z : راستای درون صفحه
 AH : گروه‌های اسیدی
 A : گروه‌های ثابت
 H^+ : گروه یون هیدروژن
 $+$: گروه یون مثبت
 $-$: گروه یون منفی

بالانویس

- ref : وضعیت مرجع

Abstract

Today, hydrogels have attracted many researchers due to individual response to exterior stimuli. According to environmental stimuli, these materials absorb huge amount of water and swell. Due to the vast application of the functionally graded pH-sensitive hydrogels, investigation of their mechanical behavior during changing of pH is very important. In this regard, the energy density is decomposed additively to energy of the network stretching, energy of mixing and energy of dissociation. Considering the variation of properties along thickness, the semi analytical solution is presented under plane strain condition. Verifying the accuracy of presented method, the result of this method is compared with the finite element method including radius, radial and tangential stresses, bending curvature and bending semi – angle between pH=2 to 8. In addition, the continuity of stresses and deformation is one of the benefits of using functionally graded hydrogel instead of multi-layer ones.