

پیش‌بینی عددی ویژگی‌های الاستیک کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله کربنی با روش چندمقیاسی

سینا عالمی پروین^۱، اصغر محمدپور فتاحی^۲

۱ کارشناس ارشد مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران
۲ استادیار، دانشکده فنی و مهندسی، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران، a.fattahi@iaut.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۳۹۶/۰۲/۰۳

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۶/۱۲/۰۵

چکیده

هدف اصلی این پژوهش بررسی مدول الاستیک طولی نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر در نسبت‌های حجمی و منطری متفاوت با شبیه‌سازی المان محدود است. برای این منظور، یک المان حجمی سه‌فازی برای مدلسازی رفتار نانوکامپوزیت به‌کار گرفته شد و از المان‌های فزری غیرخطی برای مدلسازی اتصالات محیط فاز واسط استفاده و نیروی مؤثر بین نانولوله و رزین براساس پتانسیل لنارد - جونز تعیین شد. پس از ارزیابی و صحت‌سنجی مدل، مدول الاستیک و ضریب پواسون نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر در نسبت‌های حجمی و منطری متفاوت استخراج گردید. با افزایش نسبت‌های حجمی و منطری نانولوله، مقدار مدول الاستیک المان حجمی کامپوزیت افزایش و ضریب پواسون کاهش یافت. در نسبت‌های منطری و حجمی یکسان، مدول الاستیک کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های آرمچیر و ضریب پواسون کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های زیگزاگ بیشتر می‌باشد. همین‌طور نتایج تحقیق نشان می‌دهد که مدول الاستیک کامپوزیت مستقل از مدول الاستیک فاز واسط است.

واژگان کلیدی

نانولوله کربنی، نانوکامپوزیت، لنارد جونز، چندمقیاسی، واندروالسی

۱. مقدمه

مشاهدات تجربی [۳-۶] و شبیه‌سازی‌های عددی و محاسباتی [۷-۱۰] نشان می‌دهند که با افزودن این تقویت‌کننده‌ها به پلیمرهایی که عموماً دارای مدول برشی و الاستیسیته کمتری هستند، خواص مکانیکی آنها از جمله سختی، چقرمگی و مدول برشی افزایش می‌یابد. بهبود خواص کامپوزیت توسط نانولوله کربنی به ساختار اتمی نانولوله کربنی بستگی دارد. ساختار اتمی

خصوصیات مکانیکی برجسته نانولوله‌های کربنی آنها را برای استفاده به‌عنوان نسل جدید تقویت‌کننده‌های تقویت‌کننده متمایز می‌کند. عوامل بسیار زیادی بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت تقویت‌شده با نانولوله کربن تأثیرگذار است. ساختار نانولوله، وجود پیوند واندروالسی در محیط فاز واسط، ابعاد آن، جهت‌گیری نانولوله، نحوه پخش در محیط زمینه از جمله این عوامل است [۱-۲].

نانولوله کربنی، که متشکل از کربن‌های هیبرید شده SP^2 می‌باشد، از ایجاد پیوند قوی و مستحکم کووالانسی بین نانولوله و رزین ممانعت می‌کند، لذا انتقال بار از محیط رزین به نانولوله از طریق برهم‌کنش‌های ضعیف واندروالس صورت می‌پذیرد. برخی از پژوهشگران با استفاده از فرایند عامل‌دار کردن^۱ نانولوله کربنی، به ایجاد پیوند کووالانسی بین نانولوله و رزین اطراف پرداختند [۱۱-۱۲]. در این فرایند برخی از پیوندهای کربن - کربن روی ساختار نانولوله کربن تخریب می‌شوند. با ایجاد پیوندهای کووالانسی جانبی بین نانولوله کربن و رزین اطراف، پدیده انتقال بار از رزین به نانولوله کربن افزایش و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت ارتقا می‌یابد [۱۳-۱۴].

عامل‌دار کردن نانولوله کربن با وجود افزایش سطح انتقال بار از رزین به نانولوله کربن، سبب ایجاد تخریب در ساختار نانولوله کربنی شده، این امر خود افت خواص مکانیکی نانولوله کربن را به دنبال خواهد داشت. از طرفی علاوه بر این موضوع، تقریباً تولید نانولوله کربن با ساختاری بدون عیب و سالم غیرممکن می‌باشد که این امر ناشی از فرایند رشد و تولید آنها می‌باشد. لذا مطالعه تأثیر آسیب‌های ذاتی ناشی از فرایند تولید و همچنین آسیب‌های القاشده در اثر عامل‌دار کردن نانولوله کربنی در ساختار اتمی نانولوله کربن اهمیت ویژه‌ای دارد. گفتنی است در مقیاس‌های بالاتر همانند ماکرو، از بین رفتن هندسه مشخص نانولوله کربن (نسبت منطری بالا) در اثر تجمع خوشه‌ای و یا اثر کلوخه شدگی^۲ بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن تأثیر بسزایی دارد [۱۵-۱۶]. با توجه به پیچیدگی و هزینه‌های بالای روش‌های آزمایشگاهی و دسترسی به مواد اولیه در مقیاس نانو، تحقیقات در این حوزه با تکیه بر روش‌های مدل‌سازی در بین محققان حائز اهمیت است. اساساً این تحقیقات به دو روش مدل‌سازی اتمی و محیط پیوسته از نوع تحلیلی و عددی تقسیم می‌شوند [۱۷]. حجم بالای محاسبات مدل‌سازی اتمی و محدود بودن آنها در طول بسیار کوچک و زمان کوتاه سبب شده است تا استفاده از روش‌های مدل‌سازی محیط پیوسته رونق خاصی پیدا کنند. از طرف دیگر مدل‌سازی محیط پیوسته برخی محدودیت‌هایی دارد از جمله دقت کم و عدم امکان مدل‌سازی نانومواد به شکل جزئی‌تر و دقیق‌تر و اعمال نیروهای بین مولکولی می‌باشد. بنابراین روشی به نام چندمقیاسی که ترکیبی از دو روش فوق می‌باشد، ابداع شد. در این پژوهش از روش چندمقیاسه برای

مدلسازی نانوکامپوزیت با دو نوع تقویت‌کننده نانولوله کربن آرمچیر^۳ و زیگزاگ^۴ استفاده شده است.

۲. ساختار نانولوله کربنی

نانولوله کربنی یک ورقه گرافنی^۵ لوله‌شده است که به صورت استوانه‌ای درآمده است و در آن سه اتم کربن به سه اتم کربن دیگر با پیوند کووالانسی متصل است. خصوصیات نانولوله‌های کربن به چگونگی لوله‌شدن ورقه گرافنی، طول و قطر آنها بستگی دارد. تشخیص نوع نانولوله کربنی به ساختار اتمی آن و کایرالیته^۶ آن وابسته است. بردار کایرالیته با رابطه ۱ توصیف می‌شود [۱۸].

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1)$$

که در آن، n و m نشان‌دهنده تعداد شش‌ضلعی‌ها به ترتیب در جهت بردارهای واحد \vec{a}_1 و \vec{a}_2 می‌باشد. در شکل ۱، زاویه θ معرف زاویه کایرال است و بین صفر تا 30° درجه تغییر می‌کند. با توجه به مقدار زاویه θ می‌توان نانولوله‌های متفاوتی که به آرمچیر، زیگزاگ و کایرال^۷ مرسوم هستند به دست آورد. زاویه کایرال برای نانولوله‌های مذکور به ترتیب برابر با 30° ، صفر و بین صفر و 30° می‌باشد (شکل ۲). با در دست داشتن مقادیر n و m می‌توان مقدار θ را طبق رابطه ۲ محاسبه کرد:

$$\sin\theta = \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}} \quad (2)$$

شاخص کایرال برای نانولوله کربنی زیگزاگ به صورت $(n,0)$ و حالت آرمچیر به صورت (n,n) نشان داده می‌شود و کایرال هم به صورت (n,m) که $n \neq m$ می‌باشد.

۳. مدلسازی المان محدود

۳-۱. مدلسازی نانولوله کربنی

با توجه به محدودیت‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۸ از محیط پیوسته استفاده و نانولوله به صورت مشبک^۹ شبیه‌سازی می‌شود. همان‌گونه که قبلاً ذکر شد، نانولوله کربن را می‌توان به صورت یک ورق گرافن پیچیده تصور کرد. لذا مختصات اتم‌های کربن از نگاشت مختصات اتم‌های کربن در ورق گرافن با استفاده از رابطه ۳ به دست می‌آید [۱۹].

$$(X, Y, Z) = \left[R \cos\left(\frac{x}{R}\right), R \cos\left(\frac{x}{R}\right), y \right] \quad (3)$$

در رابطه ۳، X ، Y و Z مختصات اتم‌های کربن در ساختار نانولوله کربن می‌باشند که از ورود مختصات اتم‌های کربن در ساختار گرافن (x, y) در نگاشت ۲ به دست می‌آیند. مختصات اتم‌های نانولوله کربنی در قالب مختصات گره‌های مدل المان

است. مثلاً برای سطح $Z=0$ در جهت بارگذاری محدود شده و برای سطح مقابل واقع در $Z=L$ جابه‌جایی مورد نظر اعمال می‌شود. با به‌دست آوردن پارامترهای مورد نظر در سطح مقیدشده می‌توان مدول الاستیک را به‌دست آورد.

۳-۳. فاز واسط بین زمین و نانولوله کربن

اهمیت ایجاد المان حجمی دقیق و کاربردی، نمایش فاز واسط مناسب بین زمین و نانولوله کربنی است. روش‌های متنوعی برای توصیف سازوکار و اندازه نیروی تبادل‌شده بین نانولوله و پلیمر زمینه اتخاذ شده است. خواص سطحی بین نانولوله کربن و زمینه پلیمری مبهم مانده‌اند. محققان طیف گسترده‌ای از تنش‌های برشی را گزارش کرده‌اند. برای این منظور چهار روش در دسترس است: اول اینکه می‌توان فرض کرد هیچ پیوند شیمیایی بین نانولوله کربن و زمینه پلیمری وجود ندارد که در چنین موردی نیروهای واندروالسی راه‌حل می‌باشند. وینسنزو لردی و همکارش پیشنهاد ایجاد یک پوشش ماریچ مانند را اطراف نانولوله کربن را برای افزایش سازوکار بین نانولوله کربن و زمینه جدایش کامل^{۱۳} داده‌اند که به‌صورت تجربی انجام و در شکل ۳ نشان داده شده است [۲۱]. در روش دوم فرض شده است پیوند شیمیایی قوی وجود دارد. در این روش پیوندهای کوالانسی C-C بین نانولوله و پلیمر فرض شده است که مقاومت سطحی را به‌طور چشم‌گیری افزایش می‌دهد [۲۲]. در روش سوم پژوهشگران فرض کرده‌اند پیوند عرضی^{۱۴} بین نانولوله و پلیمر وجود دارد. در این روش درصد کمی از پیوند کوالانسی، از آمین‌های چندکاره تشکیل شده است که نقش پیوند میانجی را بین نانولوله و پلیمر ایفا می‌کند. هرچند ممکن است پیوند شیمیایی که در اثر عامل‌دار کردن به‌وجود آمده با تغییر ساختار لایه‌های گرافیتی نانولوله‌ها خواص نانولوله‌ها را تغییر بدهد [۲۳]. این روش در شکل ۴ نمایش داده شده است. در روش چهارم انتقال بار می‌تواند به پیوستگی مکانیکی پلیمر و نانولوله که در اثر پیچیدگی‌های هندسی که در نانولوله به‌وجود آمده است نسبت داده شود، هرچند اتم‌های کربن روی دیواره نانولوله کربن به‌خاطر ساختار نانولوله کربن، پایداری شیمیایی دارد. در نتیجه تقویت‌کننده نانولوله کربنی توسط نیروهای واندروالسی اثر خود را روی زمینه می‌گذارد [۲۴].

در این پژوهش از پیوندهای واندروالسی برای مدلسازی فاز واسط استفاده شده است. برای توصیف روابط بین اتمی در بررسی

محدود در نرم‌افزار انسیس وارد می‌شوند. سپس با استفاده از المان‌های Beam188 پیوندهای کربن - کربن ایجاد می‌شوند. المان‌های ایجادشده ۶ درجه آزادی و قابلیت تحمل بارهای کششی، فشاری، پیچشی و خمشی را دارند و محدودیتی برای کرنش و تغییر شکل بزرگ ندارند و از المان تیری تیموشنکو^{۱۰} پیروی می‌کنند.

از المان حجمی تقویت‌کننده کوتاه با نانولوله‌های کربنی آرمچیر و زیگراگ به‌ترتیب (۱۰،۱۰)، (۱۰،۰) استفاده شده و ضخامت جداره نانولوله کربنی 0.34 نانومتر (فاصله بین دو صفحه گرافنی) و قطر آنها 1.356 نانومتر و نسبت‌های منطری متفاوت در نظر گرفته شده است. به‌منظور کاهش خطای عددی و هندسی (تمرکز تنش) از نسبت‌های منطری نسبتاً بزرگ استفاده شده است. جدول ۱ خواص مکانیکی و مشخصات هندسی نانولوله کربن مدلسازی شده را نشان می‌دهد. می‌توان سطح مقطع نانولوله را طبق رابطه ۴ به‌دست آورد.

$$A = \pi \times \left[\left(R + \frac{t}{2} \right)^2 - \left(R - \frac{t}{2} \right)^2 \right] \quad (4)$$

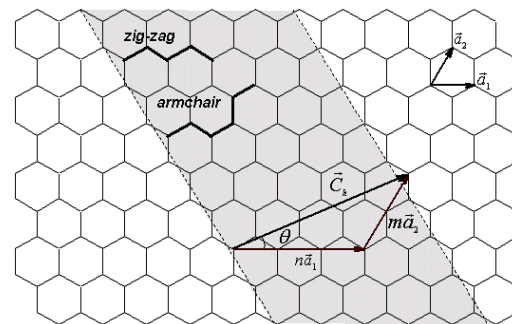
به‌طوری‌که در این رابطه مقادیر R و t به‌ترتیب شعاع و ضخامت دیواره نانولوله کربن هستند.

۳-۲. مدلسازی زمینه

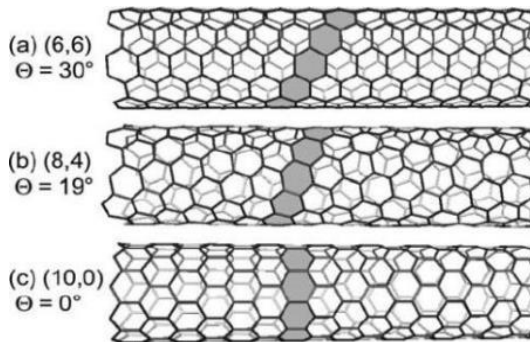
چون در این تحقیق از نسبت‌های حجمی ۱، ۵ و ۱۰ درصد برای نانولوله استفاده شده است، انتظار می‌رود در مقیاس مولکولی، حجم زمینه در مقایسه با حجم تقویت‌کننده خیلی بیشتر باشد. به‌همین دلیل مقدار المان‌های به‌کار رفته در زمینه در مقایسه با تقویت‌کننده بیشتر است و حجم محاسباتی بیشتری را به‌خود اختصاص داده است. از طرفی، به‌دلیل تعداد زیاد زنجیره مولکول‌ها در حجم مشخص زمینه، فضایی با دانسیته بالا نسبت به نانولوله کربنی به‌وجود آمده است. با علم به این موضوع می‌توان زمینه را یک محیط پیوسته صلب و ضخیم فرض کرد [۲۰]. در این پژوهش برای مدلسازی محیط زمینه از المان سه‌بعدی Solid186 استفاده شده است که شامل ۲۰ گره روی المان و سه درجه آزادی روی هر گره می‌باشد. در این تحقیق از یک‌چهارم المان حجمی^{۱۱} در نرم‌افزار انسیس استفاده و در سطوح متقارن شرایط مرزی متقارن^{۱۲} اعمال شده است. به‌منظور به‌دست آوردن مدول الاستیک المان حجمی، در جهت طول از یک سطح جابه‌جایی مشخصی اعمال و سطح مقابل در جهت بارگذاری محدود شده

پیوندهای واندروالسی میان اتم‌های نانولوله و رزین ماده مرکب از مکانیک کوانتومی استفاده می‌شود. بنابراین تنها حرکات آهسته (آهسته‌تر از ارتعاشات حرارتی) در اتم‌ها، یون‌ها و مولکول‌ها بررسی و از ساختار الکترونیکی داخل صرف‌نظر می‌شود. اتم‌ها و مولکول‌ها نیروهای درونی به هم وارد می‌کنند که توسط مقادیر لحظه‌ای انرژی پتانسیل کل سیستم تعیین می‌شود. این پتانسیل‌ها

عموماً اطلاعاتی معلوم‌اند که یا به‌صورت آزمایشگاهی مشخص می‌شوند، یا از طریق میانگین‌گیری از حرکت الکترون-والانس‌های میدان کلمب یون‌ها محاسبه می‌شوند و در محاسبه آنها از روش‌های کوانتومی استفاده می‌شود. راه‌حل‌های تحلیلی معادلات دینامیکی ذرات، تنها برای گروهی محدود از مسائل مطلوب‌اند و تنها برای سیستم‌هایی با درجات آزادی اندک ممکن می‌باشند [۲۴].



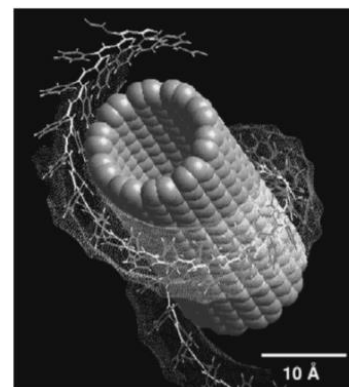
شکل ۱. نمایش پارامترهای لازم برای ایجاد نانولوله کربن [۲۰]



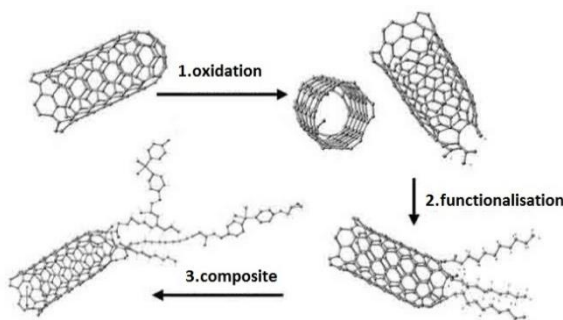
شکل ۲. زاویه‌های لازم برای ایجاد نانولوله‌های مشخص [۲۰]

جدول ۱ خواص مکانیکی و مشخصات هندسی نانولوله کربنی

مدول الاستیک	۱۰۰۰ تراپاسکال
نسبت‌های منظر	۱۶۰، ۸۰، ۴۰، ۲۰
قطر نانولوله کربنی	۱/۳۵۶ نانومتر
ضریب پواسون	۰/۲۸



شکل ۳. پوشش مارپیچی برای افزایش عملکرد نانولوله در کامپوزیت [۲۱]



شکل ۴. ایجاد پیوند عرضی برای افزایش عملکرد نانولوله در کامپوزیت [۲۳]

برای دستیابی به فواصل خاصی که به طول تعادلی یا طول پیوندی منسوب است، نیروی جاذبه در هسته اتم‌ها یا یون‌ها به‌واسطه نیروی دافعه ابر الکترونی متعادل می‌شود و طول مدنظر را ایجاد می‌کند. اما کاهش بیش از حد در فاصله اتمی منجر به رشد سریع برآیند نیروهای دافعه می‌شود. متداول‌ترین مدل برای بیان جاذبه / دافعه اتم‌ها و مولکول‌های خنثی با توجه به

جای‌گیری اتم‌ها پتانسیل لنارد-جونز^{۱۵} است. رابطه نیرو برحسب فاصله بین اتمی با رابطه ۵ بیان می‌شود:

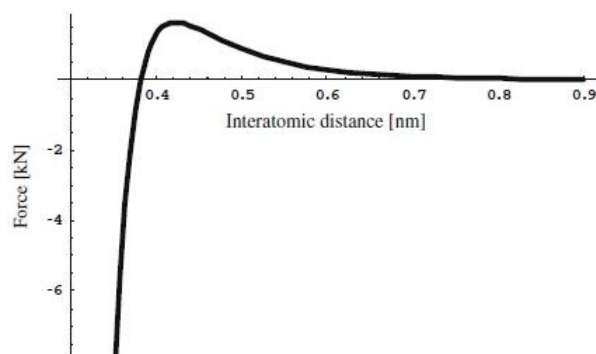
$$F(x) = -24 \frac{\epsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{x+3.8} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{x+3.8} \right)^7 \right] \quad (5)$$

به‌طوری‌که در آن x فاصله بین اتمی و ϵ و σ پارامترهای واندروالس می‌باشند که برای اتصال نانولوله و پلیمر $-CH_2-$ برابر با $\epsilon_{LJ} = 0/4492 \text{ KJ/mol}$ و $\sigma_{LJ} = 0/3825 \text{ nm}$ برای پیش این

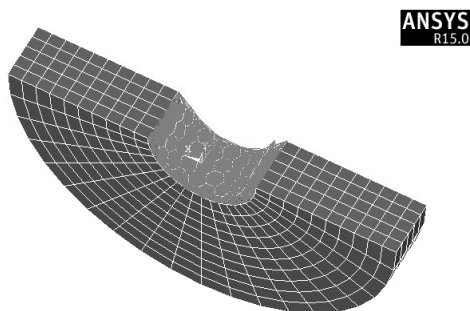
اعتبارسنجی شده است که در شکل ۸ نمایش داده شده است. از المان Solid186، Beam188، combin39 به ترتیب برای مدلسازی نواحی زمینه و نانولوله کربنی و فاز واسط استفاده شده است. دلیل تفاوت اندک این مدل با مدل شکریه در عدم استفاده از نانولوله کربنی کلاهیگ دار می باشد که منجر به دادن نتایج با مدول نسبتاً کمتر می شود. مدل شکریه و همکاریش برای نانولوله آرمچیر تقویت کننده کوتاه و بلند در نسبت حجمی ۵ درصد می باشد که اعتبارسنجی برای تعدادی از تقویت کننده های کوتاه با انتخاب طول های متفاوت اعمال شده است. در نسبت های منطقی بالاتر برای کرنش ۰/۰۵ مقدار مدول یا شیب منحنی تغییر می کند و کاهش می یابد.

۴-۲. نسبت منطقی نانولوله کربن

نسبت منطقی نانولوله کربنی (نسبت طول به قطر)، پارامتر مهمی در مدلسازی و تحلیل است؛ زیرا با افزایش آن تعداد گره ها و المان ها زیاد می شود و در نتیجه تعداد پیوندهای واندروالسی افزایش می یابد؛ لذا مقدار انتقالی افزایش می یابد و در نتیجه مقدار مدول افزایش و کرنش کاهش می یابد.



شکل ۵. تغییرات نیرو واندروالسی لنارد - جونز برحسب فاصله بین اتمی [۲۰]



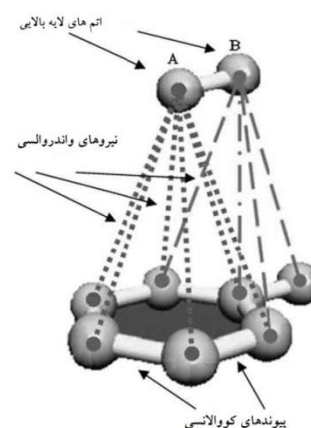
شکل ۷. بخشی از مدل المان محدود با زمینه، فاز واسط و نانولوله کربنی

مقدارها برابر با $\sigma_{LJ} = 0/428 \text{ nm}$ و $\epsilon_{LJ} = 0/4742 \text{ KJ/mol}$ می باشد [۲۵]. برای مدلسازی اتصالات واندروالسی از یک برنامه ماکرو استفاده شده است مانند شکل ۶ به طوری که با در دست داشتن گره های نانولوله و گره های موجود در سطح زمینه، پیوندهای واندروالسی را ایجاد کند. این کار می تواند برای ایجاد اتصالات واندروالسی بین تقویت کننده و زمینه باشد یا ایجاد پیوند واندروالسی بین دو صفحه گرافن یا بین نانولوله های چندجداره باشد. در این پژوهش برای بررسی رفتار غیرخطی محیط فاز واسط از المان combin39 که یک المان فنری غیرخطی می باشد استفاده شده است. برای وارد کردن مشخصات به این المان از رابطه ۵ استفاده شده است. شکل ۷ نشان دهنده مدل المان محدود این پژوهش است.

۴. بررسی نتایج

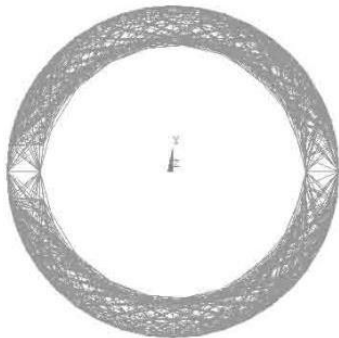
۴-۱. اعتبارسنجی مدل المان محدود تحقیق حاضر

در این پژوهش، یک چهارم مدل حجمی یک نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربن با کمک نرم افزار انسیس مدل شده است و با مدل ارائه شده توسط شکریه و همکاریش [۲۰]



شکل ۶. نمایی شماتیک از اجزای المان حجمی نانوکامپوزیت [۲۶]

افزایش نسبت منظری، مدول الاستیک طولی افزایش می‌یابد. این خاصیت برای نسبت منظری ۴۰ نسبت به ۲۰ به میزان ۰/۶۶ درصد و برای نسبت منظری ۸۰ نسبت به ۴۰ به میزان ۱/۷۷ درصد و برای نسبت منظری ۱۶۰ نسبت به ۸۰ به میزان ۲۲ درصد افزایش می‌یابد. این نتایج نشان می‌دهد با افزایش طول نانولوله نرخ افزایش مدول الاستیک افزایش می‌یابد و در مقایسه با مدل نیمه تجربی هالپین - تسای^{۱۷} که یک مدل برای کامپوزیت‌های تقویت‌کننده بلند می‌باشد [۲۷] مقدار آن بالاتر پیش‌بینی می‌شود در نتیجه برای تقویت‌کننده‌های با طول کوتاه یک پیش‌بینی بالادست می‌باشد. با افزایش طول نانولوله مقدار مدول الاستیک پیش‌بینی این تحقیق به مدل هالپین - تسای نزدیکتر می‌شود که نتایج در جدول ۲ نمایش داده شده است. رابطه ۶ مدل هالپین تسای را نشان می‌دهد.



شکل ۹. چیدمان المان‌های فنی فاز واسط حول نانولوله کربنی

$$\eta_L = \frac{E_f/E_m - 1}{E_f/E_m + \zeta}, \zeta = 2l/D \quad E_L = E_m \frac{(1 + \zeta \eta_L V_f)}{(1 - \zeta_L V_f)} \quad (6)$$

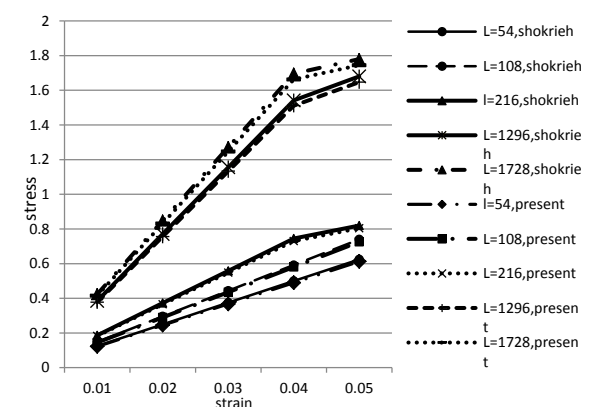
در این رابطه η_L ، l و D ، E_f ، E_m ، V_f به ترتیب ضریب تأثیر طول، طول فیبر، قطر فیبر، مدول فیبر، ماتریس و حجم نسبی فیبر می‌باشد. قانون اختلاط^{۱۸}، قانون دیگری است که مدول کامپوزیت را به صورت دست بالا پیش‌بینی می‌کند و بیشتر برای کامپوزیت‌ها با تقویت‌کننده بلند کاربرد دارد [۲۷]. رابطه ۸ قانون اختلاط را نشان می‌دهد.

$$E_L = E_f V_f + E_m (1 - V_f) \quad (7)$$

به طوری که E_L ، E_m ، E_f و V_f که در این رابطه مدول طولی، تقویت‌کننده، زمینه و نسبت حجمی است.

برای مقایسه بهتر نتایج تأثیر نوع نانولوله کربن روی مدول الاستیک المان حجمی نمودار ستونی در شکل ۱۲ آورده شده است. مشخص است که المان حجمی حاوی نوع آرمچیر در مقایسه با زیگزآگی در نسبت‌های حجمی ۵ و ۱۰ درصد برای

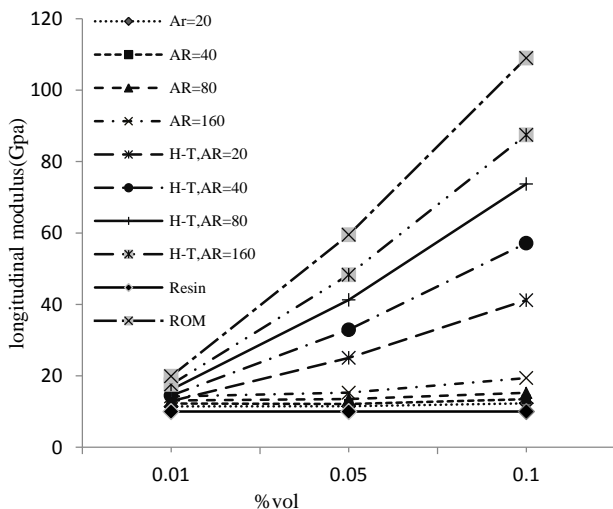
استفاده از نسبت‌های منظری بزرگ می‌تواند مدول را افزایش دهد، اما حجم محاسبات و زمان تحلیل اجزای محدود را به شدت افزایش می‌دهد. اگر طول نانولوله خیلی بیشتر شد، بسیاری از پیوندهای فاز واسط به دلیل افزایش طول از محدوده اعمال نیرو از بین می‌روند و پیوند جدید ایجاد نمی‌شود؛ زیرا طبق نمودار لنارد - جونز، نیروی واندروالسی به فاصله بین آنها بستگی دارد و با افزایش فاصله از حد مشخص به بعد، نیرو به سمت صفر میل می‌کند. برای اینکه تعداد پیوندها از مقدار واقعی آن کمتر نشود از شعاع پوشش^{۱۶} (شکل ۹) استفاده شده است. به این معنا که با اعمال کرنش کم فاصله بین اتم‌های واقع در سطح زمینه و نانولوله کربن تغییر می‌کند که این مستلزم ایجاد پیوندهای جدید است و بعضی از پیوندها شاید در اثر تجاوز از فاصله مشخصه (۰/۸۵ نانومتر) غیرفعال شوند و هیچ نیرویی به هم وارد نکنند و با افزایش کرنش در اثر جابه‌جایی نسبی ممکن است پیوندهایی که غیرفعال باشند دوباره فعال شوند و برخی دیگر از پیوندها به دلیل افزایش فاصله بین اتمی دوباره غیرفعال شوند. با ایجاد یک ماکرو می‌توان تا حدودی مشکل کاهش پیوندها را برای نانولوله‌های با طول بلند حل کرد.



شکل ۸. تخمین مدول الاستیک طولی برای نانو کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله کربنی

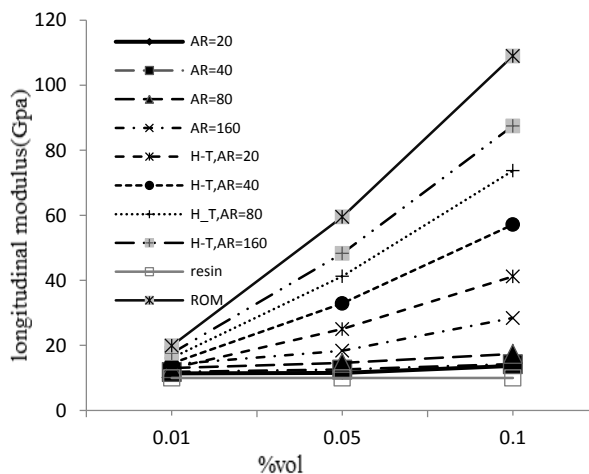
چنانچه نانولوله‌های کربنی با نسبت منظری کم انتخاب شوند ممکن است شرایط مرزی بر نتایج مدلسازی اثر بگذارد و اتصالات ناپایدار باشد که در نتیجه بهتر است ابعاد بهینه با در نظر گرفتن تمام راه‌های مؤثر برای مدلسازی انتخاب شوند. شکل ۱۰ تغییرات مدول الاستیک طولی نانو کامپوزیت با نسبت‌های حجمی و منظری مختلف برای نانولوله کربن آرمچیر را نشان می‌دهد که با

افزایش می‌یابد؛ این در حالی است که این افزایش مدول با افزایش نسبت منظری هم اتفاق می‌افتد که در نسبت حجمی یکسان به ازای نسبت منظری بیشتر، نرخ افزایش مدول بیشتر می‌شود. این در حالی است که برای نسبت حجمی ۱ درصد با افزایش نسبت منظری، مدول الاستیک طولی افزایش چندانی نداشته و تفاوت چندانی با مدل هالپین-تسای ندارد.



شکل ۱۱. نمودار تغییرات مدول الاستیک نانولوله زیگزاگ با نسبت حجمی

مدل‌های متناظر، مدول الاستیک بالاتری دارد به جز در نسبت حجمی ۱ درصد که مدل زیگزاگی مدول بالاتری دارد. تغییرات نسبت مدول الاستیک طولی به مدول زمینه در نسبت‌های حجمی متفاوت برای نسبت‌های منظری مختلف نانولوله‌های آرمچیر در شکل ۱۳ نمایش داده شده است. از نمودار مشهود است که با افزایش نسبت حجمی نانولوله کربنی مقدار مدول نرمالیز شده



شکل ۱۰. نمودار تغییرات مدول الاستیک نانولوله آرمچیر با نسبت حجمی

جدول ۲. مدول الاستیک و میزان بهبود آن برای المان‌های حجمی متفاوت حاوی نانولوله آرمچیر

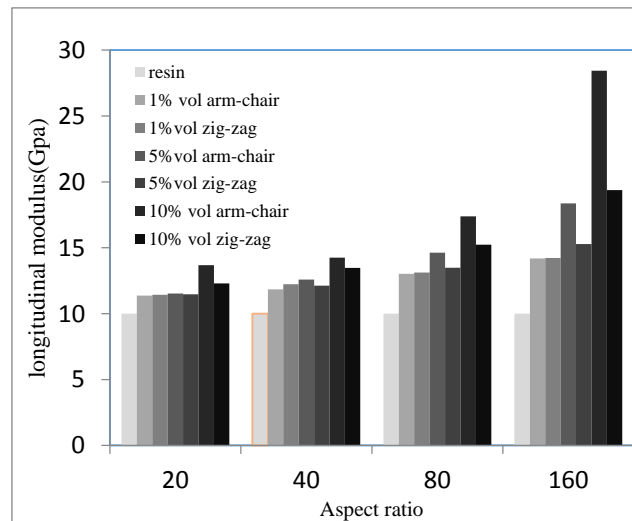
نسبت حجمی (درصد)	نسبت منظری	مدول الاستیک طولی (گیگاپاسکال)	مقدار بهبود مدول (درصد)
-	۲۰	۱۱/۳۵۶	-
۱	۴۰	۱۱/۴۳۱	۰/۶۶
	۸۰	۱۱/۶۳۴	۱/۷۷
	۱۶۰	۱۴/۱۹	۲۲
۵	۲۰	۱۱/۵۳	-
	۴۰	۱۲/۵۸	۹/۱۲
	۸۰	۱۴/۶۳	۱۶/۳
	۱۶۰	۱۸/۳۷	۲۵/۵۶
۱۰	۲۰	۱۳/۶۸	-
	۴۰	۱۴/۲۵۱	۴/۱۷
	۸۰	۱۷/۳۸۷	۲۲
	۱۶۰	۲۸/۴۳	۶۳/۵۱

افزایش می‌یابد. با این تفاوت که برای نسبت حجمی یکسان نرخ افزایش کمتری نسبت به نانولوله زیگزاگی برای مدول اتفاق می‌افتد. در نتیجه پیش‌بینی هالپین-تسای برای مدل زیگزاگی می‌تواند نسبت به نوع آرمچیر بالادست باشد.

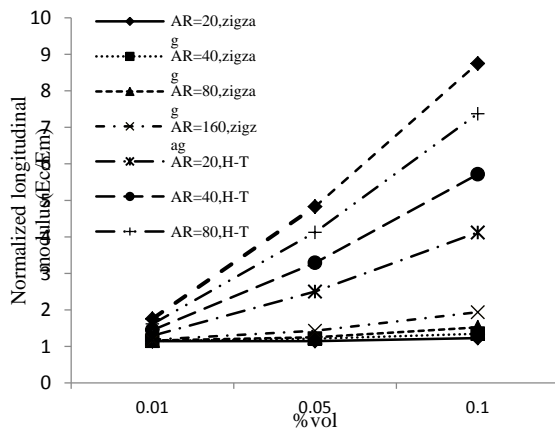
شکل ۱۴ تغییرات نسبت مدول الاستیک طولی به مدول زمینه در نسبت‌های حجمی متفاوت برای نسبت‌های منظری مختلف نانولوله‌های زیگزاگی را نشان می‌دهد. همانند نمودار ۱۳ با افزایش نسبت حجمی و نسبت منظری مدول الاستیک طولی

جدول ۳. مدول الاستیک و میزان بهبود آن برای المان‌های حجمی متفاوت حاوی نانولوله زیگزاگی

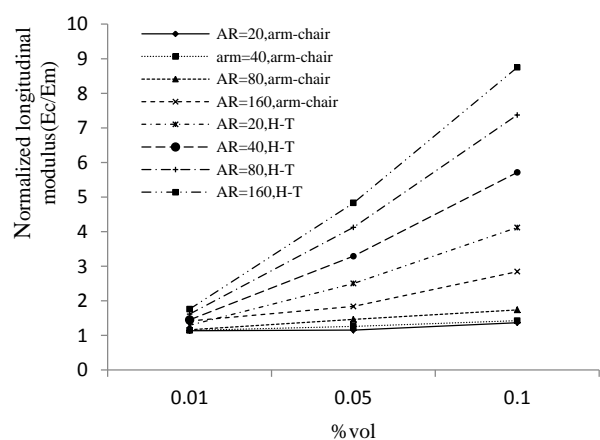
نسبت حجمی (درصد)	نسبت منظری	مدول الاستیک طولی (گیگاپاسکال)	مقدار بهبود مدول (درصد)
۱	۲۰	۱۱/۴۳	-
	۴۰	۱۲/۲۳	۷
	۸۰	۱۳/۱۲	۱۶/۸۳
۵	۲۰	۱۴/۲۳	۸/۴۶
	۴۰	۱۱/۴۷	-
	۸۰	۱۲/۱۲	۵/۶۷
۱۰	۲۰	۱۳/۴۹	۱۱/۳
	۴۰	۱۵/۲۸	۱۴/۳۳
	۸۰	۱۲/۳	-
۱۰	۲۰	۱۳/۴۷	۹/۵۱
	۴۰	۱۵/۲۳	۱۳/۰۶
	۸۰	۱۹/۳۸	۲۷/۲۴



شکل ۱۲. مقایسه مدول الاستیک طولی نانو کامپوزیت تقویت شده با نانولوله‌های آرم‌چیر با زیگزاگ

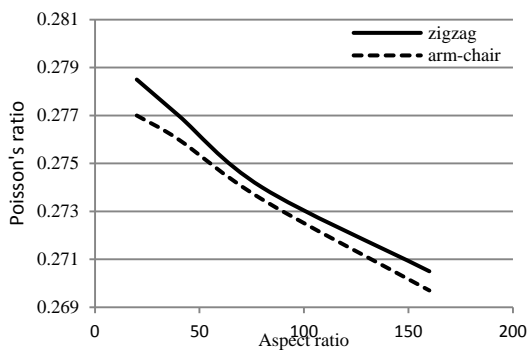


شکل ۱۴. نسبت مدول الاستیک طولی به زمینه برای نسبت‌های حجمی متفاوت نانولوله کربنی زیگزاگی

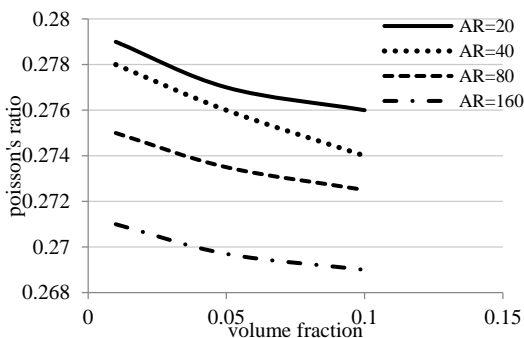


شکل ۱۳. نسبت مدول الاستیک طولی به زمینه برای نسبت‌های حجمی متفاوت نانولوله کربنی آرم‌چیر

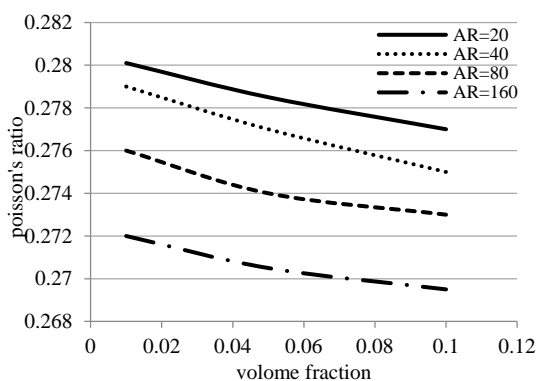
نسبت حجمی و نسبت منظری مقدار ضریب پواسون کاهش می‌یابد. با افزایش نسبت منظری این کاهش با شدت بیشتری رخ می‌دهد که با تغییر نسبت منظری از ۲۰ تا ۱۶۰ کاهش ۰/۵۷ درصد تا ۱/۵ درصد انجام می‌پذیرد. به طوری که برای انتخاب ضریب پواسون کم باید نانولوله آرمچیر با نسبت منظری بالا و نسبت حجمی بالا انتخاب کرد.



شکل ۱۵. تغییرات نسبت پواسون برای نسبت‌های منظری برای نانولوله‌های کربنی متفاوت



شکل ۱۶. تغییرات نسبت پواسون با نسبت حجمی برای نانولوله‌های آرمچیر



شکل ۱۷. تغییرات نسبت پواسون با نسبت حجمی برای نانولوله‌های زیگزاگی

با توجه به جدول ۲ مقدار مدول الاستیک برای نانولوله‌های آرمچیر با نسبت‌های طولی ۲۰، ۴۰، ۸۰ و ۱۰۰ با افزایش نسبت حجمی از ۱ به ۱۰ درصد به ترتیب ۲۰، ۲۵، ۵۰ و ۱۰۰ درصد افزایش پیدا کرده است و برای نانولوله‌های زیگزاگی طبق جدول ۳ مقدار مدول الاستیک به ترتیب ۸، ۱۰، ۱۶ و ۳۶ درصد افزایش پیدا کرده است. به عبارتی اثر افزودن نانولوله‌های کربنی آرمچیر بر افزایش مدول الاستیک طولی نانوکامپوزیت‌ها به مراتب بیشتر از اثر افزودن نانولوله‌های زیگزاگی است.

۳-۴. نسبت پواسون

نسبت پواسون یک ثابت بی‌بعد است که طبق روابط الاستیسیته برای المان حجمی برابر نسبت کرنش در جهت عمود بر بارگذاری بر کرنش در جهت بارگذاری می‌باشد.

$$\nu = -\frac{\epsilon_{radial}}{\epsilon_{axial}} \quad (8)$$

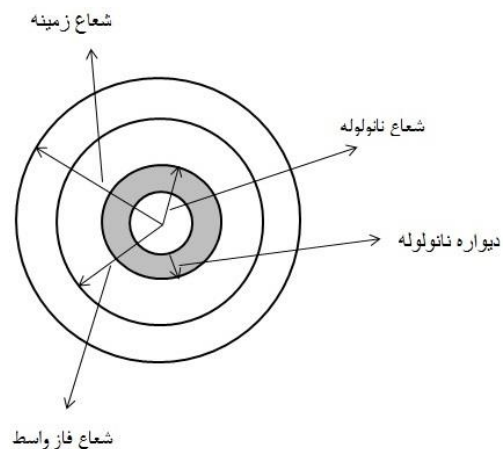
که ϵ_{axial} و ϵ_{radial} به ترتیب کرنش المان حجمی نماینده در جهت‌های شعاعی و محوری است. کرنش‌های عرضی و محوری بر اساس جابجایی‌های گره‌ها در نوک مدل حجمی، طبق رابطه ۹ به دست می‌آیند.

$$\epsilon_{axial} = \frac{\Delta L}{L}, \quad \epsilon_{radial} = \frac{\Delta R}{R} \quad (9)$$

به طوری که ΔR ، ΔL ، R ، L به ترتیب طول، شعاع، تغییرات طول و تغییرات شعاع می‌باشند. شکل ۱۵ تغییرات نسبت پواسون در نسبت‌های منظری مختلف برای دو نوع نانولوله زیگزاگی و آرمچیر برای نسبت منظری ۵ درصد را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که المان حجمی تقویت‌شده با نانولوله‌های زیگزاگی در مقایسه با نوع آرمچیر در نسبت منظری یکسان، ضریب پواسون بیشتر دارد و با افزایش نسبت منظری نسبت پواسون کاهش می‌یابد. در شکل ۱۶ نیز تغییرات نسبت پواسون با نسبت حجمی برای نانولوله‌های آرمچیر نمایش داده شده است. مشخص است که با افزایش نسبت حجمی نسبت پواسون کاهش می‌یابد و این کاهش با افزایش نسبت منظری نیز انجام می‌پذیرد و برای نسبت‌های منظری بالاتر این کاهش با شدت بیشتری انجام می‌پذیرد. به این صورت که با افزایش نسبت منظری از ۲۰ به ۴۰ ضریب پواسون ۰/۳۴ درصد، از ۴۰ به ۸۰ ضریب پواسون ۱ درصد و از ۸۰ به ۱۶۰ ضریب پواسون ۱/۴۷ درصد کاهش پیدا می‌کند. در شکل ۱۷ تغییرات ضریب پواسون در برابر نسبت حجمی برای نانولوله زیگزاگی مشاهده می‌شود که مانند شکل ۱۵ با افزایش

۴-۴. مدول الاستیک فاز واسط

بدیهی است که خصوصیات فاز واسط و ضخامت دقیق این منطقه در کامپوزیت‌های پلیمری زمینه / نانولوله دقیق نمی‌باشد. به‌منظور بررسی آثار خصوصیات مکانیکی فاز واسط روی کل مدول الاستیک، محاسبات المان محدودی با کامپوزیت سه فازی انجام شده است. در این بخش، برای بررسی تأثیر مدول الاستیک فاز واسط بر خواص الاستیک نانوکامپوزیت‌ها از المان Link11 برای مدل‌سازی فاز واسط توسط میله‌ها با مدول نرم و سفت با کمک پتانسیل لنارد جونز استفاده شده است. در شکل ۱۸ اجزای مدل حجمی نمایش داده شده است.



شکل ۱۸. اجزای مدل حجمی سه‌فازی

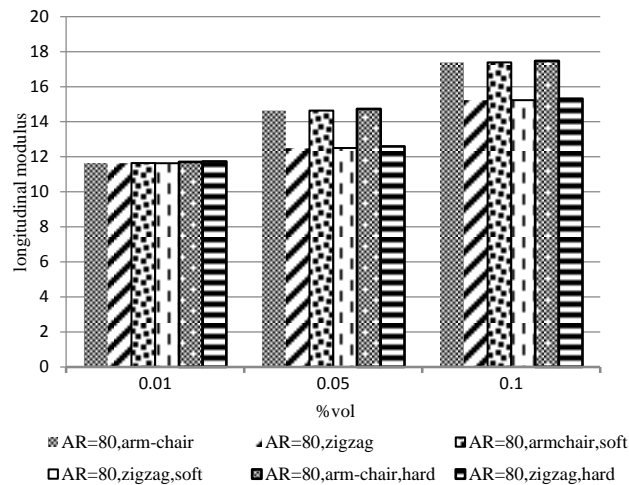
از دو نوع نانولوله آرمچیر و زیگزاگ برای نسبت منطری ۸۰ در نسبت‌های حجمی ۱، ۵ و ۱۰ درصد استفاده شده است. همان‌گونه که در شکل ۱۸ نشان داده شده است، نتایج المان حجمی تقویت‌شده با نانولوله آرمچیر و زیگزاگ مشخص می‌باشد که با تغییر فاز واسط المان فنری به فاز واسط نرم ($E_m=0, \delta E_{int}$) و فاز واسط سفت ($E_m=10 \cdot E_{int}$) تغییرات اندک ۱ درصد نسبت به حالت قبل داشته است. در نتیجه می‌توان گفت نانوکامپوزیت حساسیت چندانی نسبت به فاز واسط نشان نداده و تغییرات چندانی در خواص الاستیک آنها رخ نمی‌دهد.

۵. نتیجه‌گیری

هدف از این پژوهش، بررسی مدول الاستیک طولی نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر در نسبت‌های حجمی و منطری متفاوت است. از پتانسیل لنارد - جونز برای مدل‌سازی فاز واسط‌ها استفاده شده است که

نقش مؤثری در انتقال بار به تقویت‌کننده دارد. نتایج کلی این پژوهش را می‌توان به شرح زیر بیان نمود:

۱. با افزایش نسبت‌های حجمی نانولوله، مقدار مدول الاستیک المان حجمی کامپوزیت افزایش می‌یابد
۲. با افزایش نسبت منطری نانولوله مدول الاستیک المان حجمی کامپوزیت افزایش می‌یابد و در نسبت‌های منطری بالاتر فاصله گرافها کاهش یافته و رفتاری مشابه کامپوزیت‌های با تقویت‌کننده بلند خواهد داشت
۳. در نسبت حجمی ۱ درصد، در هر دو حالت زیگزاگی و آرمچیر حتی با افزایش نسبت منطری افزایش مدول آنچنان زیادی رخ نمی‌دهد، که می‌توان دلیل را در مقایسه نسبت ابعادی فاز زمینه و تقویت‌کننده جستجو کرد. وجود تقویت‌کننده با ابعاد ریز در داخل زمینه بزرگ را به ایجاد ترک ریز در داخل زمینه تشبیه کرد
۴. مدول الاستیک کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های آرمچیر در نسبت منطری و حجمی یکسان بیشتر از نانولوله‌های زیگزاگی است، به‌جز در نسبت حجمی ۱ درصد که حالت زیگزاگ بالاتر از آرمچیر می‌باشد
۵. نسبت پواسون نانولوله‌های زیگزاگی بالاتر از نوع آرمچیر است و با افزایش نسبت منطری و نسبت حجمی نانولوله‌های کربنی ضریب پواسون کامپوزیت‌ها کاهش می‌یابد
۶. با افزایش و کاهش مدول الاستیک فاز واسط هیچ تغییری در مدول کامپوزیت به‌دست نمی‌آید که مبین این است که مدول کامپوزیت مستقل از مدول فاز واسط می‌باشد
۷. چنان‌که پیشتر نشان داده شده با افزایش کسر حجمی مقدار مدول الاستیک افزایش می‌یابد که این تغییرات با استفاده از روابط ۶ و ۷ نیز قابل پیش‌بینی می‌باشد. در این مقاله از نانولوله‌های نسبتاً کوتاه‌تری استفاده شده است و تغییرات فقط با توجه به فرضیات اتخاذشده بدون در نظر گرفتن اثر تراکم و کلوخه‌شدگی انجام می‌گیرد در نتیجه با افزایش نسبت حجمی نانولوله کربن مدول الاستیک المان حجمی، روند صعودی خواهد داشت



شکل ۱۹. تأثیر مدول الاستیک فاز واسط بر مدول الاستیک کامپوزیت

۶. مأخذ

- [1] L. Ci, J. Bai, The reinforcement role of carbon nanotubes in epoxy composites with different matrix stiffness, *Compos. Sci. Technol.*, vol. 66, pp. 599–603, 2006.
- [2] A. Selmi, C. Friebe, I. Doghri., H. Hassis, Prediction of the elastic properties of single walled carbon nanotube reinforced polymers: A comparative study of several micromechanical models, *Compos. Sci. Technol.*, vol. 67, pp. 2071–2084, 2007.
- [3] Q. Lu, B. Bhattacharya, The role of atomistic simulations in probing the small-scale aspects of fracture – a case study on a single-walled carbon nanotube, *Eng Fract Mech*, vol 72, pp. 2037–71, 2005.
- [4] A. M. Fattahi, A. Najipour, Experimental study on mechanical properties of PE / CNT composites, *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, vol. 55, pp. 719-726, 2017.
- [5] M. F. YU, O. Lourie, M. J. Dyer, K. Moloni, T. S. Kelly, R. S. Ruoff, Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load, *Science*, vol. 287, pp. 637–40, 2000.
- [6] T. W. Tomblor, C. Zhou. L. Alexeyev, Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation, *Nature*, vol. 405, pp. 769–72, 2000.
- [7] S. Azizi, A. M. Fattahi, J. T. Kahn mouei, Evaluating mechanical properties of nanoplatelet reinforced composites under mechanical and thermal loads, *Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 12, pp. 4179-4185, 2015.
- [8] J. P. Lu., Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes, *Phys Rev Lett*, vol. 79, pp. 1297–300, 1997.
- [9] E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio, Elastic properties of single-wall nanotubes, *Appl Phys A*, vol. 68, pp. 287–92, 1999.
- [10] Yu .I. Prylutskiy, S. S. Durov, S. S. Durov, Molecular dynamics simulation of mechanical, vibrational and electronic properties of carbon nanotubes, *Comput Mater Sci*, Vol. 17, pp. 352-5, 2000.
- [11] Susan. B. Sinnott, Chemical functionalization of carbon nanotubes, *Journal of Nanoscience and nanotechnology*, vol. 2, pp. 113-23, 2002.
- [12] L. L. Bahr, J. M. Tour, Covalent chemistry of singlewall carbon nanotubes, *Journal of Materials chemistry*, vol. 12, pp. 1952-8, 2002.
- [13] S. J. V. Frankland, A. Caglar, D. W. Brenner, M. Griebel, Molecular simulation of the influence of chemical cross-links on the shear strength of carbon nanotube polymer interfaces, *Journal of physical chemistry B*, vol. 106, pp. 3046-48, 2002.
- [14] F. Buffa, G. A. Abraham, B. P. Grady, D. Resasco, Effect of nanotube functionalization on the properties of single-walled carbon nanotube/polyurethane composites, *Journal of*

- polymer science Part B, Polymer Physics*, vol. 45, pp. 490-501, 2007.
- [15] M. M. Shokrieh, R. Rafiee, Stochastic multi-scale modeling of CNT/polymer composites, *Computational Materials Science*, vol. 50, pp. 437-446, 2010.
- [16] P. D. Spanos, A. Kotsos, A multiscale Monte Carlo finite element method for determining mechanical properties of polymer nanocomposites, *Probabilistic Engineering Mechanics*, vol. 23 pp. 456-470, 2008.
- [17] A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard, W. M. Skiff, a full periodic-table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations, *Journal of American Chemical Society*, vol. 114, pp. 10024-10035, 1992.
- [18] T. Belin, F. Epron, Characterization methods of carbon nanotubes: a review, *Materials Science and Engineering*, vol. 119, pp. 105-118, 2005.
- [19] R. Rafiee, R. Pouraziz, The effect of defects on the mechanical properties, *Modares mechanical engineering*, vol. 13, pp. 165-175, 2013 (in Persian).
- [20] M. M. Shokrieh, R. Rafiee, Investigation of nanotube length effect on the reinforcement efficiency in carbon nanotube based composites, *Composite Science*, vol. 92, pp. 2415-2420, 2010.
- [21] V. Lordi, N. Yao, Molecular mechanics of binding in carbon-nanotube-polymer composites, *Journal of Material Research*, vol. 15, pp. 2770-2779, 2011.
- [22] J. M. Wernik, S. A. Meguid, Multiscale modeling of the nonlinear response of nano-reinforced polymers, *Acta Mechanica*, Vol. 217, pp. 1-16, 2010.
- [23] B. Fiedler, F. H. Gojny, M. H.G. Wichmann, M. C. M. Nolte, K. Schulte, Fundamental aspects of nano-reinforced composites, *Composites Science and Technology*, vol. 66, pp. 3115-3125, 2006.
- [24] Y. Hu, O. A. Shenderova, Z. Hu, C. W. Padgett, D. W. Brenner, Carbon nanostructures for advanced composites, *Reports On Progress In Physics*, vol. 69, pp. 1847-1895, 2006.
- [25] W. K. Liu, E. G. Karpov, H. S. Park, Nano Mechanics and Materials: theory, multiscale methods and application, *Nano mechanics and materials*, Wiley, 2006.
- [26] D. Banerjee, T. Nguyen, T. Chuang, Mechanical properties of single-walled carbon nanotube reinforced polymer composites with varied interphase's modulus and thickness: A finite element analysis study, *Computational Materials Science*, pp. 209-218, 2016.
- [27] R. F. Gibson, *Principles of composite material mechanics*, 2nd ed, CRC Press, 2011.

پی‌نوشت

1. functionalization
2. agglomeration
3. Arm-chair
4. Zigzag
5. Graphene sheet
6. Chirality
7. Chiral
8. molecular dynamic
9. Lattice
10. Timoshenko beam
11. Representative volume element(RVE)
12. Symmetry B.C
13. nonbonding
14. cross-link
15. Lennard-Jones
16. cutoff distance
17. Halpin-Tsai

18. Rule of mixture(ROM)