

# مدل مایکرومکانیک جهت بررسی اثر ابعاد و ناحیه فاز واسط بر روی مدول الاستیسیته پلیمر تقویت شده با نانولوله کربن

محمود مهرداد شکریه<sup>۱\*</sup>، سید مصطفی مهدوی<sup>۲</sup>

۱- استادا، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۲- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

\*تهران، صندوق پستی ۱۳۱۱۴-۱۶۸۴۶، Shokrieh@iust.ac.ir

**چکیده-** از مهمترین عوامل تأثیرگذار بر خواص مکانیکی پلیمر تقویت شده با نانولوله کربن، ابعاد نانولوله کربن و وجود ناحیه فاز واسط است که به سبب ساختار نانولوله تشکیل می‌گردد. در این پژوهش، روش تحلیلی جدیدی برای تعیین مدول پلیمر حاوی نانولوله کربن ارائه شده است. این تحقیق با در نظر گرفتن ساختار نانولوله کربن، ابعاد (قطر و طول نانولوله) و ناحیه فاز واسط به محاسبه مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت می‌پردازد. مدل جدید ارائه شده با استفاده از روابط الاستیسیته، نانولوله کربن را به صورت تکرشته توپر با خواص ایزوتروپ عرضی معادل سازی نموده و در ادامه ناحیه فاز واسط بین نانولوله کربن و ماتریس که دارای پیوند واندروالس است را با روابط مکانیک محیط پیوسته، به صورت یک محیط مادی ایزوتروپ در نظر می‌گیرد. با در نظر گرفتن یک المان حجمی، یک تکرشته معادل ارائه می‌شود و با استفاده از رابطه هالپین-تسای و کوپان مدول نانوکامپوزیت محاسبه می‌گردد. نتایج حاصل از این روش جدید، مطابقت بسیار مناسبی با داده‌های آزمایشگاهی متنوع را نشان می‌دهد. مزیت این مدل جدید آن است که برخلاف بسیاری از مدل‌های ارائه شده، نه تنها از روابط و مدلسازی‌های پیچیده استفاده نکرده، بلکه به کمک روابط الاستیسیته با سرعت بسیار بالایی به نتایجی با دقت بسیار مناسب می‌رسد.

**کلیدواژگان:** نانوکامپوزیت، مدل مایکرومکانیک، ناحیه فاز واسط، مدول الاستیسیته

## Micromechanical model to evaluate the effects of dimensions and interphase region on the elastic modulus of CNT/polymer composites

M. M. Shokrieh<sup>1\*</sup>, S. M. Mahdavi<sup>2</sup>

1- Prof., Iran University of Science and Technology.

2- M.Sc., Iran University of Science and Technology.

\*P.O.B. 16846-13114 Tehran, Iran. Shokrieh@iust.ac.ir

**Abstract-** Carbon Nanotube (CNT) dimensions and interphase region are the important parameters that affect on the mechanical behavior of CNT/Polymer composites. In this study, a new analytical model is established to predict the modulus of these structures. Considering the influence of CNT dimensions (diameter and length) an interphase region, the elastic modulus of nanocomposite is determined. In this new model, a nanotube with hollow cylindrical structure is modeled as a transversely isotropic solid nano-fiber. Moreover, interphase region and its van-der Waals interaction is simulated as an isotropic hollow cylindrical solid that its mechanical properties is derived using the continuum mechanics. To predict the modulus of nano-composites, a representative volume element (RVE) containing a transversely isotropic solid nano-fiber, isotropic solid interphase region and the matrix is employed using Halpin-Tsai model. Finally, the results of the proposed analytical model are compared with various available experimental results. The proposed model is simple and the results obtained by the model are in good agreement with available experimental results.

**Keywords:** Carbon nanotube; Nano-Composites; Micromechanical Model; Interphase Region; Elastic Modulus.

## ۱- مقدمه

بدلیل خواص مکانیکی و الکتریکی منحصر بفرد، نانولوله کربن به شکل بسیار گسترده مورد توجه محققین قرار گرفت. مدول الاستیسیته، مقاومت کششی و انعطاف پذیری بسیار بالای نانولوله کربن سبب شده است که از آن در ساختار نانوکامپوزیت‌ها استفاده شود. عوامل بسیار زیادی بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربن تأثیرگذار است. ساختار نانولوله، وجود پیوند واندروالس در محیط فاز واسط، ابعاد آن، جهت قرارگیری نانولوله، نحوه پخش در محیط ماتریس از جمله این عوامل است [۲۰، ۲۱]. با توجه به گستردگی عوامل تأثیرگذار بر خواص نانوکامپوزیت حاوی نانولوله، ارائه یک مدل دقیق که تمامی این عوامل را در نظر بگیرد امری دور از ذهن می‌باشد. به همین سبب، برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن مدل‌های گوناگونی ارائه شده است. هر یک از این مدل‌ها برخی از این عوامل را در نظر گرفته و مورد بررسی قرار داده اند. برای مثال برخی از محققین با استفاده از روابط دینامیک مولکولی به تخمین خواص نانوکامپوزیت پرداختند [۳-۵]. برخی با در نظر گرفتن ابعاد نانولوله به کمک روابط مایکرومکانیک مورد استفاده برای کامپوزیت‌های مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت را محاسبه نمودند [۶-۹]. برخی با در نظر گرفتن وجود انحنای ساختار نانولوله روابطی را برای محاسبه ارائه نمودند [۱۰-۱۴]. برخی دیگر با تعریف المان حجمی به این امر مبادرت ورزیدند [۱۵-۱۶]. برخی دیگر نیز به بررسی اثر ناحیه فاز واسط بر روی خواص نانوکامپوزیت پرداختند [۱۷-۱۹]. مدل‌های ارائه شده در اغلب موارد تنها با چند داده آزمایشگاهی خاص و محدود مطابقت داشته و جامعیت برای کاربرد ندارند. در برخی از روش‌ها نیز روند مدلسازی و روابط استفاده شده بسیار پیچیده، زمان‌گیر و دارای محدودیت می‌باشد.

هدف این پژوهش بهره‌گیری از روابط مایکرومکانیک کامپوزیت‌های کلاسیک جهت تعیین مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن می‌باشد. به صورتی که بتوان با یک روند سریع به نتایج دقیقی رسید که با داده‌های

آزمایشگاهی متنوع مطابقت داشته باشد. برای نیل به این هدف نانولوله کربن درون محیط رزین با یک تکرشته معادل جایگزین می‌گردد و به کمک روابط مایکرومکانیک مدول نانوکامپوزیت محاسبه می‌گردد.

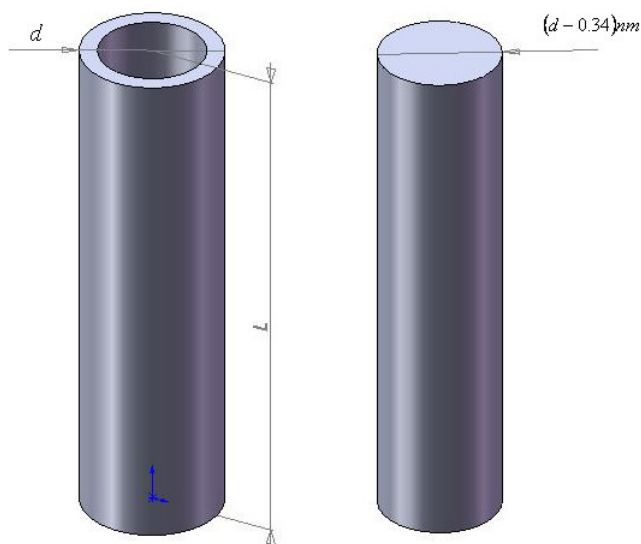
برای محاسبه خواص این تکرشته معادل ابتدا با استفاده از روابط الاستیسیته، نانولوله به یک تکرشته توپر که دارای خواص ایزوتروپ عرضی است تبدیل می‌شود که به آن تکرشته موثر اطلاق می‌گردد. در ادامه، با در نظر گرفتن ناحیه فاز واسط و وجود پیوندهای واندروالس در آن ناحیه، فاز واسط به شکل یک محیط مادی همسانگرد مدل شده و خواص آن محاسبه می‌گردد. بدین ترتیب با تعریف یک المان حجمی، خواص تکرشته معادل محاسبه می‌گردد. سپس با استفاده از رابطه هالپین-تسای [۲۰] در معادله کویان [۲۱]، که برای کامپوزیت‌های کلاسیک است، مدول نانوکامپوزیت محاسبه و با نتایج حاصل از آزمایش مقایسه می‌گردد.

## ۲- ساختار نانولوله کربن

نانولوله کربن از یک ساختار ۶ وجهی اتم‌های کربن تشکیل شده است. در یک نانولوله تک‌جداره، اتم‌های کربن از طریق پیوند با انرژی بالای کوالانس به یکدیگر متصل شده‌اند. نانولوله چندجداره نیز از چند نانولوله تک‌جداره هم‌محور با شعاع‌های مختلف ایجاد شده است. فاصله هر لایه از لایه‌های مجاور در یک نانولوله چندجداره برابر  $0.34$  یعنی فاصله دو صفحه گرافن از یکدیگر می‌باشد. در هر لایه اتصال اتم‌های کربن به یکدیگر از طریق پیوند کوالانت می‌باشد. اتصال اتم‌های کربن هر لایه با بیرونی‌ترین لایه با مولکول‌های ماتریس در داخل محیط رزین از طریق پیوند واندروالس می‌باشد. این پیوند از رابطه لنارد-جونز [۲۲] پیروی می‌کند. محیطی را که در آن بین مولکول‌های ماتریس با اتم‌های کربن، این نوع پیوند برقرار می‌شود، ناحیه فاز واسط می‌نامند. انتقال بار از ناحیه ماتریس به نانولوله از طریق ناحیه فاز واسط صورت می‌گیرد. لذا این ناحیه نقش بسیار مهمی در توانایی تحمل بار یک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن دارد.

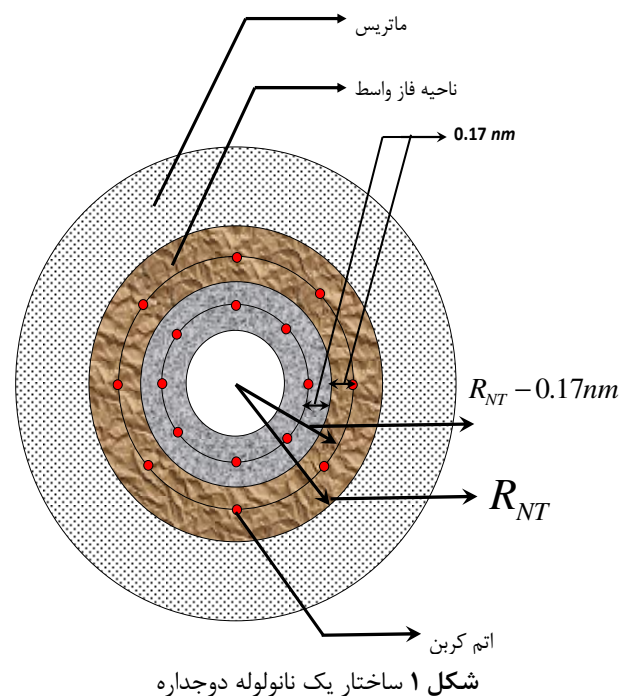
اساسی است. از جمله اینکه ماده تقویت کننده دارای ساختار توپر بوده، قطر و طول آن دارای ابعادی در محدوده میکرون می باشد. همچنین پیوند بین تکرشته و ماتریس، کامل در نظر گرفته می شود. استفاده مستقیم از روابط مایکرومکانیک برای نانولوله ها به علت ساختار توخالی و عدم اتصال کامل بین ماتریس و نانولوله، امکان پذیر نمی باشد. لذا برای استفاده از این روابط در محیط نانو باید ملاحظاتی را در نظر گرفت. بدین منظور در ابتدا نانولوله کربن با یک تکرشته توپر معادل قرار داده می شود. این معادلسازی با توجه به ساختار فیزیکی توضیح داده شده صورت می گیرد. مطابق با ساختار نانولوله که پیش از این توضیح داده شد اتم های کربن یک نانولوله تک جداره با شعاع خارجی  $R_{NT}$ ، در مختصاتی به شعاع  $(R_{NT} - 0.17)nm$  قرار دارد. پیوند واندروالس بین مولکول های رزین با اتم های کربن، در محدوده ای به شعاع  $R_{NT} - 0.17 \leq R \leq R_{NT}nm$  وجود دارد (شکل ۲).

طبق این ساختار، برای تعیین خواص تکرشته موثر، نانولوله با شعاع  $R_{NT}$  به یک ساختار توپر سیلندری با شعاع  $(R_{NT} - 0.17)nm$  تبدیل می شود. به صورتی که این دو ساختار تحت نیروی یکسان اعمالی دارای تغییر شکل یکسان در دو راستای طولی و عرضی باشند.



شکل ۲ مدل شماتیک نانولوله و تکرشته موثر جایگزین شده

ضخامت هر لایه از نانولوله  $(t_{NT})$ ، برابر  $0.34nm$  یعنی فاصله بین دو صفحه گرافن می باشد. می توان فرض نمود که در هر لایه از نانولوله، اتم های کربن روی صفحه استوانه ای به شعاع فرضی  $R_{mid}$  قرار گرفته اند و در دو طرف این صفحه، ابر الکترونی به ضخامت  $0.17nm$  وجود دارد. بدین ترتیب برای ساختار نانولوله در داخل فضای ماتریس، اگر شعاع خارجی نانولوله  $R_{NT}$  فرض شود، محل قرارگیری اتم های کربن آخرین لایه، در شعاعی معادل با  $(R_{NT} - 0.17)nm$  است. همچنین محل قرارگیری اتم های ماتریس در اطراف نانولوله نیز در همان شعاع  $R_{NT}$  می باشد. با توجه به محل قرارگیری اتم های کربن و مولکول های ماتریس، می توان در نظر گرفت که فضای اندرکنشی بین این دو ناحیه در فضایی به ضخامت  $0.17nm$  شکل می گیرد که این ناحیه همان ناحیه فاز واسط است. لذا ضخامت در نظر گرفته شده برای ناحیه فاز واسط  $0.17nm$  است (شکل ۱).



شکل ۱ ساختار یک نانولوله دوجداره

### ۳- تکرشته موثر و خواص آن

روابط مایکرومکانیک متعددی برای تعیین خواص مکانیکی کامپوزیت های معمولی وجود دارد. این روابط دارای فرضیات

$$(E_z)_{Eff.NF} = \frac{F_z}{A_{Eff.NF}(\varepsilon_z)_{Eff.NF}} = \frac{F_z}{A_{Eff.NF}(\delta l)_{Eff.NF}/L} \quad (3)$$

که در آن  $A_{Eff.NF}$  مساحت سطح مقطع تکرشسته موثر می‌باشد و برابر است با:

$$A_{Eff.NF} = \pi \left( R_{NT} - \frac{t_{NT}}{2} \right)^2 \quad (4)$$

$t_{NT}$  ضخامت نانولوله تک‌جداره و برابر  $0.34$  نانومتر می‌باشد. از ابتدا فرض گردیده بود که تغییر طول برابر تحت اعمال بار یکسان در دو ساختار ایجاد گردد. یعنی  $(\delta l)_{Eff.NF} = (\delta l)_{NT} = \delta l$  باشد. بر اساس روابط الاستیسیته تغییر طول محوری نانولوله کربن که دارای خواص ایزوتروپ است محاسبه می‌شود و در رابطه (۳) جایگزین می‌شود تا مدول الاستیسیته محوری تکرشسته موثر تعیین گردد.

$$\delta l = \frac{FL}{A_{NT} E_{NT}} \quad (5)$$

که در آن  $A_{NT}$  مساحت سطح مقطع نانولوله می‌باشد و برابر است با:  $\pi(R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{NT})^2)$ . در نهایت مدول الاستیسیته محوری تکرشسته موثر برابر می‌گردد با:

$$(E_z)_{Eff.NF} = \frac{A_{NT}}{A_{Eff.NF}} E_{NT} = \frac{(R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{NT})^2)}{(R_{NT} - t_{NT}/2)^2} E_{NT} \quad (6)$$

همچنین بر اساس روابط الاستیسیته تعیین می‌گردد:

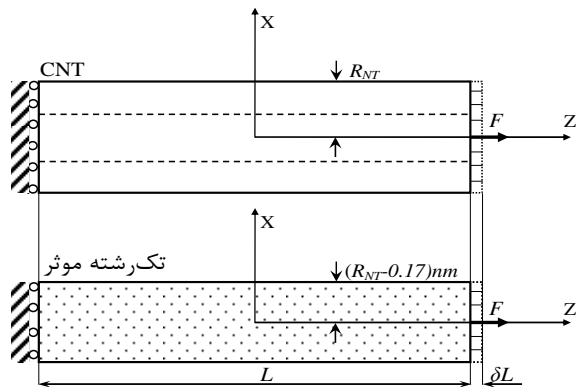
$$\varepsilon_\theta = \frac{\delta R}{R} = -\nu_{zx} \frac{\sigma_z}{E_z} = -\nu_{zx} \frac{\delta l}{L} \quad (7)$$

لذا برای تکرشسته موثر محاسبه می‌شود:

با توجه به این معادل‌سازی، به جهت محاسبه مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت باید مدول محوری،  $E_z$  و مدول شعاعی  $E_x = E_y$  تکرشسته محاسبه گردد. برای این امر سه نوع بارگذاری صورت می‌پذیرد و بر اساس روابط الاستیسیته این دو مجهول محاسبه می‌گردند. سایر مشخصه‌های ماده بر اساس این ثوابت قابل محاسبه هستند.

### ۳-۱- تکرشسته موثر و نانولوله تحت بارگذاری محوری یکسان

در این حالت از بارگذاری دو سازه تحت یک نیروی محوری یکسان  $F$  قرار می‌گیرند (شکل ۳) و تغییر طول آن‌ها به کمک روابط مکانیک مواد تعیین می‌شود. با برابر قرار دادن میزان تغییر طول‌ها، سعی در یافتن مشخصه‌های مورد نیاز می‌شود.



شکل ۳ اعمال بار محوری به نانولوله کربن و تکرشسته موثر

لذا در این حالت از بارگذاری:

$$\begin{aligned} \sigma_z &= \frac{F}{A} \\ \sigma_x &= \sigma_y = \sigma_r = \sigma_\theta = 0 \\ \varepsilon_z &= \frac{\delta l}{L} \quad \varepsilon_\theta = \frac{\delta R}{R} \end{aligned} \quad (1)$$

برای تکرشسته موثر حاصل می‌گردد:

$$(E_z)_{Eff.NF} = \frac{1}{(E_z)_{Eff.NF}} (\sigma_z)_{Eff.NF} \quad (2)$$

بر اساس معادله (۱) نتیجه می‌شود:

$$\begin{aligned} \sigma_r &= P \\ \sigma_\theta &= \frac{R_{out}^2 + r_{in}^2}{R_{out}^2 - r_{in}^2} P \\ \varepsilon_\theta &= \frac{\delta R}{R} \end{aligned} \quad (11)$$

که در آن شعاع خارجی و شعاع داخلی یک استوانه توخالی می‌باشد. در حالت کرنش صفحه‌ای حاصل می‌گردد:

$$\begin{aligned} \varepsilon_z &= 0 \\ \sigma_z &= \nu_{zx} (\sigma_r + \sigma_\theta) \end{aligned} \quad (12)$$

کرنش محیطی تک‌رشته موثر برابر خواهد بود با:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_\theta)_{Eff.NF} &= -\left(\frac{\nu_{zx}^2}{E_z} + \frac{\nu_{xy}}{E_x}\right) \sigma_r + \left(\frac{1}{E_x} - \frac{\nu_{zx}^2}{E_z}\right) \sigma_\theta = \\ &= \frac{\delta R_{Eff.NF}}{R_{Eff.NF}} \end{aligned} \quad (13)$$

با توجه به اینکه تک‌رشته موثر توپر بوده و  $(r_{in})_{Eff.NF} = 0$ ، تنش محیطی و شعاعی نانولوله با یکدیگر برابر خواهد شد،  $(\sigma_r)_{Eff.NF} = (\sigma_\theta)_{Eff.NF} = P$  در این صورت معادله ۱۳ نتیجه می‌دهد:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\nu_{zx}^2}{E_z} + \frac{\nu_{xy}}{E_x}\right)_{Eff.NF} P_{Eff.NF} + \left(\frac{1}{E_x} - \frac{\nu_{zx}^2}{E_z}\right)_{Eff.NF} P_{Eff.NF} \\ = \frac{\delta R_{Eff.NF}}{R_{Eff.NF}} \end{aligned} \quad (14)$$

در ابتدا در نظر گرفته شده بود:

$$\begin{aligned} F_{NT} = F_{Eff.NF} \Rightarrow P_{NT} \times A_{NT}^* = P_{Eff.NF} \times A_{Eff.NF}^* \\ \delta R_{NT} = \delta R_{Eff.NF} \end{aligned} \quad (15)$$

که در آن مقادیر  $A_{Eff.NF}^*$  و  $A_{NT}^*$  به ترتیب مساحت روی سطح خارجی نانولوله کربن و تک‌رشته موثر می‌باشند. با جاگذاری معادلات ۱۵ در معادله ۱۴ و ساده‌سازی آن حاصل می‌گردد:

$$(v_{zx})_{Eff.NF} = -\frac{(\delta R)_{Eff.NF} / R_{Eff.NF}}{\delta l / L} \quad (8)$$

از سویی، مطابق فرض صورت گرفته، تغییر شعاع دو ساختار، نانولوله کربن و تک‌رشته موثر باید برابر یکدیگر باشند. یعنی:  $(\delta R)_{Eff.NF} = (\delta R)_{NT}$ . بر اساس معادله (۷) تغییر شعاع نانولوله کربن محاسبه می‌شود.

$$\delta R_{NT} = -R_{NT} \times \nu_{NT} \frac{\sigma_z}{E_{NT}} = -R_{NT} \times \nu_{NT} \frac{F_z}{A_{NT} E_{NT}} \quad (9)$$

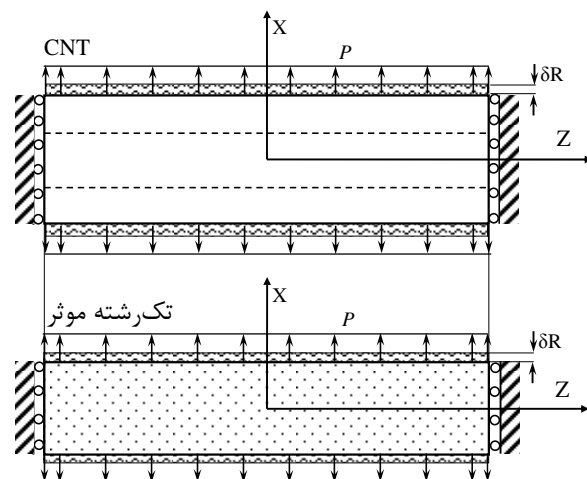
با جاگذاری در معادله (۷) و ساده‌سازی در نهایت ضریب پواسون خارج صفحه‌ای محاسبه می‌گردد:

$$(v_{zx})_{Eff.NF} = \frac{R_{NT}}{R_{Eff.NF}} \nu_{NT} \quad (10)$$

### ۳-۲- اعمال فشار شعاعی بر سطوح خارجی نانولوله و

#### تک‌رشته موثر

در این حالت فشار منفی  $P$  بر روی سطح خارجی اعمال می‌گردد و سازه از دو انتهای راستای محوری ثابت نگاه داشته می‌شود تا شرایط کرنش صفحه‌ای ایجاد شود. این بارگذاری در شکل ۴ نشان داده شده است. بر اساس روابط الاستیسیته برای این حالت از بارگذاری حاصل می‌گردد:



شکل ۴ اعمال بار شعاعی به نانولوله کربن و تک‌رشته موثر

$$\alpha = \frac{TL}{G_{NT} J_{NT}} \quad (19)$$

که در این معادله:

$$G_{NT} = \frac{E_{NT}}{2(1+\nu_{NT})}$$

$$J_{NT} = \pi(R_{NT}^4 - r_i^4) / 2 \quad (20)$$

در نهایت با ساده کردن دو معادله ۱۷ و ۱۹ حاصل می‌گردد:

$$E_{x_{Eff.NF}} = \frac{2J_{NT}}{J_{Eff.NF}} G_{NT} (1 + \nu_{xy_{Eff.NF}}) \quad (21)$$

با قرار دادن معادله ۲۱ در معادله ۱۶ و ساده‌سازی آن ضریب پواسون درون صفحه‌ای محاسبه می‌شود:

$$\nu_{xy_{Eff.NF}} = \frac{1 - C_2}{1 + C_2}$$

$$C_2 = \left( C_1 + 2 \frac{R_{NT}^2}{R_{NT}^2 - r_i^2} \nu_{NT}^2 \right) \frac{J_{NT}}{J_{Eff.NF} (1 + \nu_{NT})}$$

$$C_1 = -\nu_{NT} - \nu_{NT}^2 + (1 - \nu_{NT}^2) \frac{R_{NT}^2 + r_i^2}{R_{NT}^2 - r_i^2} \quad (22)$$

$$E_{x_{Eff.NF}} = \frac{2J_{NT}}{J_{Eff.NF}} G_{NT} (1 + \nu_{xy_{Eff.NF}}) \quad (23)$$

ایده معادل‌سازی نانولوله با تکرشته توپر پیش از این توسط توستنسون و چو [۶] مطرح گردید، با این تفاوت که آن‌ها شعاع تکرشته را برابر شعاع خارجی نانولوله در نظر گرفتند. همچنین معادل‌سازی آن‌ها تنها در راستای طولی صورت گرفت و تکرشته موثر را یک ساختار همسانگرد در نظر گرفتند، در حالی که مطالعات سایر محققین نشان می‌دهد که این ساختار دارای خواص ایزوتروپ عرضی می‌باشد [۲۳-۲۴].

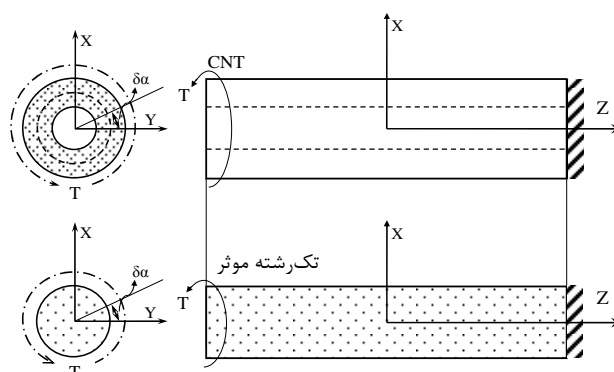
همچنین رابطه ارائه شده توسط آن‌ها برای تعیین مدول تکرشته در شعاع‌های پائین با مدل المان محدود مطابقت ندارد. طبق فیزیک در نظر گرفته شده توسط توستنسون و چو [۶]، یک نانولوله کربن با قطر خارجی  $d$  و ضخامت لایه  $t$  که در آن  $d > 4t$  است با یک تکرشته توپر با قطر  $d$  معادل در نظر گرفته شده است. این معادل‌سازی تنها در شرایطی نتایج دقیقی را

$$\left( \frac{1 - (\nu_{xy})_{Eff.NF}}{(E_x)_{Eff.NF}} - 2 \frac{(\nu_{zx}^2)_{Eff.NF}}{(E_z)_{Eff.NF}} \right) = \frac{A_{Eff.NF}^* R_{NT}}{A_{NT}^* R_{Eff.NF}} \left( -\nu_{NT} - \nu_{NT}^2 + (1 - \nu_{NT}^2) \frac{R_{NT}^2 + r_i^2}{R_{NT}^2 - r_i^2} \right) \frac{1}{E_{NT}} \quad (16)$$

که در آن  $r_i$  شعاع داخلی نانولوله می‌باشد. در معادله فوق دو مجهول یعنی  $(E_x)_{Eff.NF}$  و  $(\nu_{xy})_{Eff.NF}$  وجود دارد. حال تنها به یک معادله دیگر جهت محاسبه این دو مشخصه نیاز است.

### ۳-۳- اعمال گشتاور پیچشی

در این مرحله سازه تحت بارگذاری پیچشی قرار می‌گیرد. تغییر زاویه ایجاد شده در نانولوله و تکرشته موثر در اثر اعمال گشتاور یکسان، برابر قرار داده می‌شود. یعنی  $\alpha_{NT} = \alpha_{Eff.NF} = \alpha$ .



شکل ۵ اعمال گشتاور پیچشی بر روی نانولوله و تکرشته موثر

در تکرشته موثر تغییر زاویه در اثر اعمال گشتاور برابر خواهد بود با:

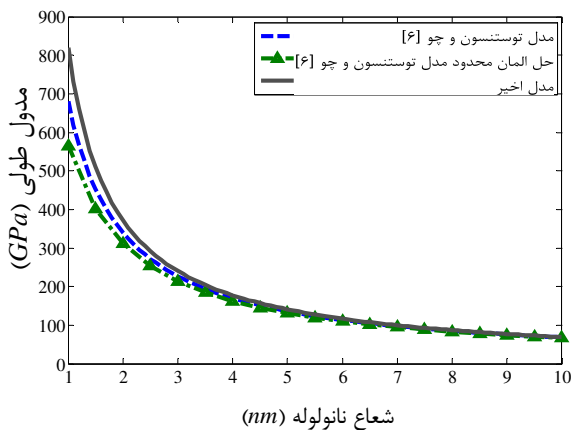
$$\alpha = \frac{TL}{(G_{xy})_{Eff.NF} J_{Eff.NF}} \quad (17)$$

در این شرایط

$$(G_{xy})_{Eff.NF} = \frac{(E_x)_{Eff.NF}}{2(1 + \nu_{xy_{Eff.NF}})}$$

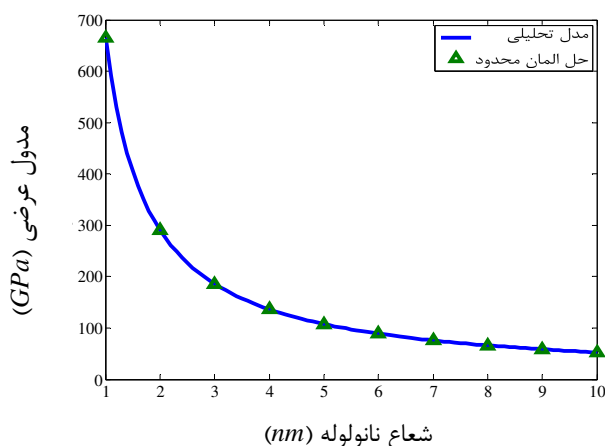
$$J = \pi R_{Eff.NF}^4 / 2 \quad (18)$$

برای نانولوله کربن نیز حاصل می‌گردد:



شکل ۸ مقایسه دو روش، مدل توستنسون و چو [۶] و مدل اخیر

همانگونه که پیداست نتایج مدل تحلیلی ارائه شده با نتایج حل المان محدود بسیار به یکدیگر نزدیک بوده و لذا حل تحلیلی دارای دقت بسیار مناسبی می باشد. لذا با دقت بسیار بالایی می توان از رابطه ریاضی ارائه شده برای این معادلسازی استفاده نمود. برای مقایسه اختلاف دو مدل ارائه شده (مدل توستنسون و چو [۶] و مدل ارائه شده در این پژوهش) در شکل ۸ نتایج هر دو مدل در کنار یکدیگر نشان داده شده اند. در راستای عرضی نیز مدل در نرم افزار المان محدود تحت تحلیل قرار گرفت و نتایج با حل تحلیلی مقایسه گردید. در شکل ۹ مشاهده می شود که نتایج حل تحلیلی با حل المان محدود مطابقت و همگرایی بسیار خوبی را ارائه می کند.

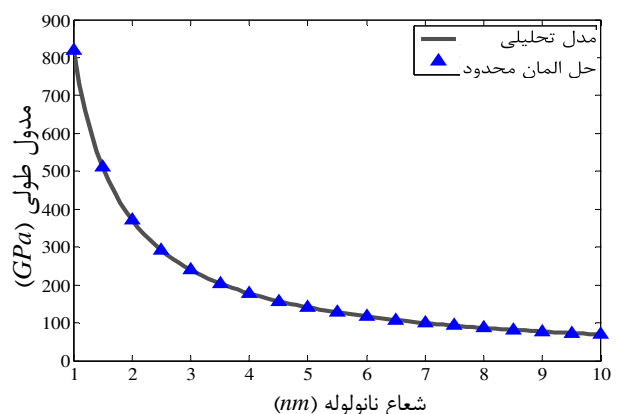


شکل ۹ مدل الاستیسیته عرضی تکرشته موثر

ارائه می دهد که میزان قطر خارجی نانولوله کربن بسیار بزرگتر از چهار برابر ضخامت آن باشد که در بسیاری از موارد واقعی این چنین فیزیکی امکان پذیر نمی باشد. در مواردی که این شرط لحاظ نشود نتایج معادل سازی با خطای بسیار بالایی نسبت به واقعیت همراه است. این ادعا را می توان با مقایسه نتایج تحلیلی که توسط توستنسون و چو [۶] ارائه شده با نتایج حاصل از مدل المان محدود اثبات نمود. این نتایج در ادامه ارائه می گردد.

#### ۴- ارزیابی اعتبار مدل

مدل ارائه شده در این بخش در واقع یک مدل ریاضی و تحلیلی می باشد که با استناد به روابط الاستیسیته حاکم بر مواد استخراج شده است. هر چند که فرضیات در نظر گرفته شده در روند ارائه مدل، صدق اعتبار مدل را بیان می دارد، اما برای حصول اطمینان از اعتبار مدل، نتایج روابط تحلیلی با نتایج حاصل از حل المان محدود نیز مقایسه شده و میزان همگرایی نتایج دو تحلیل ارائه می گردد. برای مدل سازی از نرم افزار المان محدود ANSYS استفاده گردید. المان مورد استفاده Solid و از نوع Brick 8node 45 می باشد. برای پرهیز از بروز خطای عددی به سبب اعمال شرایط مرزی، طول مدل ده برابر شعاع آن لحاظ می گردد (شکل ۶). در شکل ۷ نمودار مدول الاستیسیته طولی مدل توسعه داده شده در این پژوهش نشان داده شده است و نتایج حاصل از دو روش تحلیلی و المان محدود برای چند شعاع مختلف نانولوله با ضخامت جداره ۰/۳۴ نانومتر با یکدیگر مقایسه شده اند.



شکل ۷ مدل الاستیسیته در راستای طولی تکرشته موثر، حل تحلیلی و حل المان محدود

است. خواص این محیط مادی باید با خواص محیط اندرکنشی بین اتمها به سبب وجود نیروی واندروالس یکسان باشد. بدین منظور ضریب فنریت یک سیلندر جدار ضخیم در راستای شعاعی با ضریب سفتی فنر حاصل از نیروهای واندروالس بین اتمها معادل قرار داده می‌شود و از این طریق مدول الاستیسیته فاز واسط محاسبه می‌گردد. با مشخص بودن ثوابت رابطه لنارد-جونز، میزان متوسط نیروی واندروالس در ناحیه فاز واسط محاسبه و با مشخص بودن میزان تغییر طول صورت گرفته، ضریب سفتی فنر تعیین می‌گردد [۲۲].

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

$$\begin{aligned} \epsilon &= 3.864e - 13 \text{ N.nm}, \sigma = 0.34 \text{ nm}, r = 0.17 \text{ nm} \Rightarrow \\ F &= 4.434e - 7 \text{ N} \end{aligned} \quad (25)$$

میزان نیروی واندروالس متغیری از طول پیوند می‌باشد که اگر این طول از یک حد بیشتر گردد، نیرو کششی و از یک حد کمتر گردد، نیرو فشاری می‌گردد. این حد همان فاصله تعادلی است که در آن میزان نیرو برابر صفر می‌گردد، یعنی:

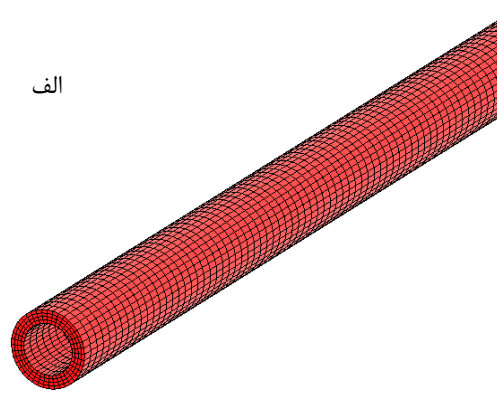
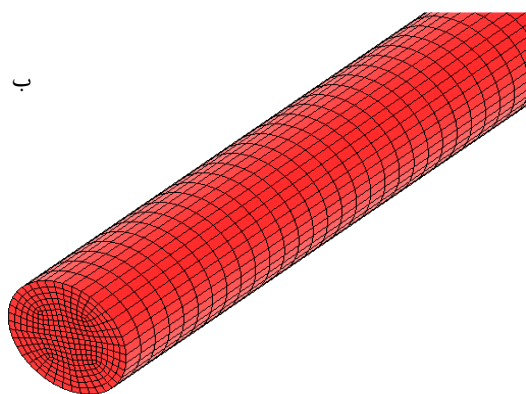
$$\begin{aligned} F = 0 \Rightarrow 24 \frac{\epsilon}{\sigma} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r_{\text{Equilibrium}}} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{r_{\text{Equilibrium}}} \right)^7 \right] = 0 \Rightarrow \\ r_{\text{Equilibrium}} = 0.38 \text{ nm} \end{aligned} \quad (26)$$

بدین ترتیب نانولوله کربن با یک تکرشته موثر که دارای خواص ایزوتروپ عرضی بوده معادل قرار داده می‌شود و با استفاده از روابط ارائه شده در دو راستای طولی و عرضی مدول این تکرشته محاسبه می‌گردد.

## ۵- محاسبه خواص ناحیه فاز واسط

برخی از محققین برای بررسی تأثیر ناحیه فاز واسط، آن را محیط مادی فرض نموده و با در نظر گرفتن مقادیر مختلف برای مدول الاستیسیته و ضخامت این ناحیه، فارغ از بیان علت فیزیکی انتخاب این مقادیر، به بررسی روند تغییرات در مدول نانوکامپوزیت پرداختند. برخی دیگر نیز به مدلسازی اتمی و نیروهای واندروالس این ناحیه پرداختند. [۱۷-۱۹ و ۲۵]. در روش اول دلیل انتخاب مقادیر برای مدول الاستیسیته و ضخامت فاز واسط بیان نشده و تنها به روند نتایج توجه شده است. روش دوم نیز علاوه بر روند مدلسازی پیچیده، امکان مدلسازی نانولوله‌های با طول بالا را ندارد و سرعت اجرای برنامه پائین می‌باشد.

فاز واسط در این پژوهش، محیطی ایزوتروپ فرض شده است. ضخامت این ناحیه،  $t_{\text{inter}}$ ، بر اساس ساختار بیان شده از نانولوله  $0.17 \text{ nm}$  در نظر گرفته می‌شود. بدین ترتیب این ناحیه به صورت یک سیلندر تو خالی در نظر گرفته می‌شود که دارای ضخامت  $0.17 \text{ nm}$  با شعاع خارجی  $R_{\text{NT}}$  می‌باشد. مدول این محیط همان مدول الاستیسیته فاز واسط،  $E_{\text{inter}}$ ،



شکل ۶ مدل طراحی شده در نرم‌افزار المان محدود. الف) نانولوله کربن. ب) تکرشته موثر



$$F = P_2 * 2\pi R_{NT} L_{NT} \quad , \quad K = \frac{F}{u(R_{NT})} \quad (30)$$

$$K = - \frac{E_{Inter}}{1 + \nu_{Inter}} \times \frac{R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{Inter})^2}{(R_{NT} - t_{Inter})^2 + (1 - 2\nu_{Inter}) R_{NT}^2} 2\pi L_{NT} \quad (31)$$

با مساوی قرار دادن مقادیر دو ضریب سفتی میزان مدول الاستیسیته ناحیه فاز واسط محاسبه می‌گردد:

$$K_{Interphase} = K_{Lennardjonz} \Rightarrow \frac{E_{Inter}}{1 + \nu_{Inter}} \frac{R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{Inter})^2}{(R_{NT} - t_{Inter})^2 + (1 - 2\nu_{Inter}) R_{NT}^2} 2\pi L_{NT} = 2111 \quad (32)$$

$$E_{Inter} = (1 + \nu_{Inter}) \frac{(R_{NT} - t_{Inter})^2 + (1 - 2\nu_{Inter}) R_{NT}^2}{R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{Inter})^2} \frac{2111}{2\pi L_{NT}} \quad (33)$$

همانگونه که از فرمول فوق مشخص است، مدول الاستیسیته ناحیه فاز واسط متغیری از سه پارامتر طول، شعاع نانولوله کربن و ضریب پواسون است.

در رابطه هالپین-تسای ضریب پواسون ماتریس و ماده تقویت کننده در روابط وارد نمی‌شوند، می‌توان میزان این ضریب را مقداری ثابت که در واقع همان مقدار ضریب پواسون ماتریس و نانولوله است در نظر گرفت. لذا ضریب پواسون نانولوله کربن، ناحیه فاز واسط و ماتریس یکسان و به میزان ۰/۳ در نظر گرفته می‌شود. بدین ترتیب با قرار دادن  $t_{Inter} = 0.17nm$  و  $\nu_{inter} = 0.3$  مدول الاستیسیته ناحیه فاز واسط تنها تابعی از طول و شعاع نانولوله کربن می‌باشد.

### ۶- تکرشته معادل و خواص آن

با مشخص بودن خواص تکرشته موثر و ناحیه فاز واسط می‌توان به کمک رابطه اختلاط در کامپوزیت‌ها خواص تکرشته معادل را محاسبه نمود.

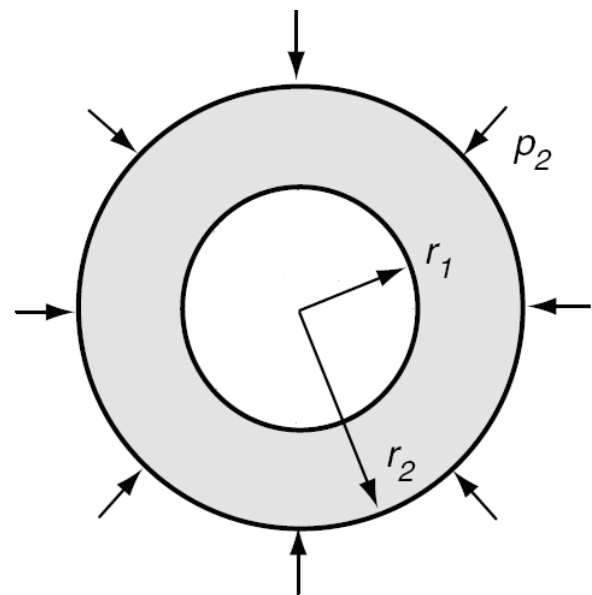
حال با مشخص بودن ضخامت فاز واسط و طول پیوند، میزان ضریب سفتی فنر محاسبه می‌گردد.

$$\begin{cases} F(0.17) = 4.434e - 7N \\ \delta r = r_{Equilibrium} - r_{Thickness} = 0.38 - 0.17 = 0.21nm \Rightarrow \end{cases} \quad (27)$$

$$K = F/\delta r = 2111 \quad N/m \quad (28)$$

همچنین به کمک روابط الاستیسیته، میزان تغییر طول شعاعی یک سیلندر جدار ضخیم تحت نیروی شعاعی تعیین و سپس ضریب فنریت شعاعی محاسبه می‌گردد (شکل ۱۰). در مسأله مورد نظر:

$$u(R_{NT}) = \frac{1 + \nu_{Inter}}{E_{Inter}} \times \left( \frac{(R_{NT} - t_{Inter})^2 R_{NT} P_2}{R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{Inter})^2} - \frac{(1 - 2\nu_{Inter}) R_{NT}^3 P_2}{R_{NT}^2 - (R_{NT} - t_{Inter})^2} \right) \quad (29)$$



شکل ۱۰ سیلندر جدار ضخیم تحت فشار خارجی

که  $\nu_{Inter}$  ضریب پواسون و  $E_{Inter}$  مدول ناحیه فاز واسط است. سفتی فنر برابر است با  $F/\delta r$  لذا:

$$\eta_1 = \frac{\frac{E_{Longitudinal}}{E_m} - 1}{\frac{E_{Longitudinal}}{E_m} + \frac{L}{R_{NT}}} \Rightarrow$$

$$E_{11} = E_m \left( \frac{1 + \frac{L}{R_{NT}} \eta_1 v_f}{1 - \eta_1 v_f} \right) \quad (36)$$

$$\eta_2 = \frac{\frac{E_{Transverse}}{E_m} - 1}{\frac{E_{Transverse}}{E_m} + 2} \Rightarrow$$

$$E_{22} = E_m \left( \frac{1 + 2\eta_2 v_f}{1 - \eta_2 v_f} \right) \quad (37)$$

$$E = \frac{3}{8} E_{11} + \frac{5}{8} E_{22} \quad (38)$$

در جدول ۲ نتایج مدل تحلیلی اخیر با برخی نتایج آزمایشگاهی مقایسه گردیده است. مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از این حل تحلیلی به شکل بسیار مناسبی با نتایج حاصل از آزمایش مطابقت دارد.

## ۸- نتیجه‌گیری

برای تخمین خواص نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن نمی‌توان از روابط مایکرومکانیک به شکل مستقیم استفاده نمود. علت نیز در ساختار منحصر بفرد نانولوله می‌باشد. اما می‌توان با برخی تغییرات و ارائه یک تکرشسته معادل از روابط مایکرومکانیک با دقت مناسبی برای تخمین خواص نانوکامپوزیت بهره گرفت. در این پژوهش ناحیه فاز واسط و پیوندهای واندروالس موجود در این ناحیه، به صورت یک محیط مادی همسانگرد در نظر گرفته شد و با استفاده از روابط الاستیسیته، مدول آن محاسبه گردید. ضخامت این ناحیه

$$E_{Longitudinal} = (E_{Eff.NF})_{Long} \times \left( \frac{R_{NT} - 0.17}{R_{NT}} \right)^2 + E_{Inter} \times \left( 1 - \left( \frac{R_{NT} - 0.17}{R_{NT}} \right)^2 \right) \quad (34)$$

$$E_{Transverse} = \frac{E_{Inter} \times (E_{Eff.NF})_{Tran}}{E_{Inter} \times \left( \frac{R_{NT} - 0.17}{R_{NT}} \right)^2 + (E_{Eff.NF})_{Tran} \times \left( 1 - \left( \frac{R_{NT} - 0.17}{R_{NT}} \right)^2 \right)} \quad (35)$$

در جدول ۱ خواص تکرشسته معادل در این پژوهش با تکرشسته معادل سایر محققین نشان داده شده است. با توجه به جدول ۱ مشاهده می‌شود نتایج تکرشسته معادل در راستای طولی مطابقت مناسبی با مدل‌های پیشین دارد.

جدول ۱ بررسی خواص تکرشسته معادل با تحقیقات پیشین

تکرشسته معادل	مدل شکریه و رفیعی [۲۲]	مدل اخیر
مدول طولی	۶۴۹	۶۴۲
مدول عرضی	۱۱	۴

## ۷- بررسی نتایج با داده‌های آزمایشگاهی

تا این مرحله هدف معادل‌سازی نانولوله کربن به شکل یک تکرشسته معادل بوده است که در درجه اول بتواند نمایانگر خواص نانولوله بوده و همچنین بتوان از آن در روابط مایکرومکانیک کامپوزیت‌های کلاسیک استفاده نمود. لذا با محاسبه خواص تکرشسته معادل اکنون می‌توان با استفاده از روابط هالپین-تسای خواص نانوکامپوزیت را محاسبه نمود. با قرار دادن خواص محاسبه شده تکرشسته معادل در روابط هالپین-تسای، مدول نانوکامپوزیت محاسبه می‌گردد.

جدول ۲ مقایسه نتایج این تحقیق با داده‌های آزمایشگاهی

محققان	$v_f$	نتایج آزمایشگاهی (GPa)	مدل اخیر (GPa)	% Err
اودگارد و همکارانش [۲۴]	۰/۱	۰/۹	۰/۹۰۶	۰/۶۷
	۰/۵	۱/۲	۱/۱۳۰	۵/۸۳
	۱	۱/۴	۱/۴۱۱	۰/۷۸
زو و همکارانش [۲۶]	۰/۸۷	۲/۶۵±۰/۱۳	۲/۶۳۸	۰/۴۵
ویلوریا و میراویت [۷]	۰/۱۲	۲/۹۰۹	۲/۸۸۵	۰/۸۳
	۰/۴۷	۲/۶۷۶	۲/۶۳	۱/۹۸
لوپز و همکارانش [۲۷]	۰/۱۸۷	۱/۰۲	۱/۰۲۸	۰/۷۸
	۰/۳۷	۱/۱	۱/۱۹۸	۸/۹۱
	۰/۵۶۳	۱/۱۸	۱/۱۹۳	۱/۱۰
گاجنی و همکارانش [۲۸]	۰/۰۶۵	۲/۶۸۱±۰/۰۸	۲/۶۷۹	۰/۰۷
	۰/۱۲۱	۲/۶۹۱±۰/۰۳	۲/۷۵۹	۲/۵۳
	۰/۳۶۳	۲/۸۱۲±۰/۰۹	۳/۰۷۸	۹/۴۶

ساختاری منحصر به فرد نانوتیوب کربن را در نظر گرفت و در نهایت با استفاده از این روابط مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت حاصل را محاسبه نمود.

#### ۹- مراجع

- [1] Selmi A., Friebel C., Doghri A., Hassis H.; "Prediction of the elastic properties of single walled carbon nanotube reinforced polymers: A comparative study of several micromechanical models", Compos. Sci. Technol; Vol. 67, 2007, 2071–2084.
- [2] Bai JB., Ci L.; "The reinforcement role of carbon nanotubes in epoxy composites with different matrix stiffness", Compos. Sci. Technol.; Vol. 66, 2006, 599–603.
- [3] Odegard GM, Gates TS, Wise KE, Nicholson LM.; "Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials", Compos. Sci. Technol.; Vol. 62, 2002, 1869–80.
- [4] Griebel M., Hamaekers J.; "Molecular dynamics simulations of the elastic moduli of

بر اساس ساختار نانولوله تعیین گردید. با مشخص بودن خواص ناحیه فاز واسط یک تکرار شده معادل تعریف و به کمک روابط هالپین-تسای مدول نانوکامپوزیت حاصل محاسبه گردید. مشاهده شد که خواص ناحیه فاز واسط بر روی مدول نانوکامپوزیت تأثیر بسزایی دارد و برای استفاده از روابط مایکرومکانیک در تعیین مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت باید تأثیر این ناحیه در نظر گرفته شود. مدل ارائه شده قابلیت مدلسازی نانولوله‌های تک‌جداره با طول و قطرهای متفاوت را دارد. روش جدید ارائه شده در این پژوهش با وجود سادگی فرمولاسیون و سرعت در محاسبه، دقت بالایی را برای تخمین این خواص دارد. همچنین این مدل جدید با داده‌های آزمایشگاهی گوناگون مقایسه شده و دقت مناسبی را نشان می‌دهد. همگرایی نتایج با داده‌های آزمایشگاهی بیانگر این امر است که هر چند روابط مایکرومکانیک مورد استفاده برای کامپوزیت‌های کلاسیک به شکل مستقیم امکان تخمین مدول الاستیسیته پلیمرهای تقویت شده با نانولوله کربن را ندارند، اما با اندک تغییرات در این روابط می‌توان برخی از ویژگی‌های

- Composites”, *J. Engineering Materials and Technology*; Vol. 126, 2004, 250-257.
- [14] Shao L.H., Luo R.Y., Bai S.L., Wang J.; “Prediction of effective moduli of carbon nanotube-reinforced composites with waviness and debonding”, *Composite Structures*; Vol. 87, 2009, 274-281.
- [15] Liu Y.J., Chen X.L.; “Evaluations of the effective material properties of carbon nanotube-based composites using a nanoscale representative volume element”, *J. Mechanics of Materials*; Vol. 35, 2003, 69-81.
- [16] Chen X.L., Liu Y.J.; “Square representative volume elements for evaluating the effective material properties of carbon nanotube-based composites”. *J. Computational Materials Science*; Vol. 29, 2004, 1-11.
- [17] Wan H, Delale F, Shen L.; “Effect of CNT length and CNT-matrix interphase in carbon nanotube (CNT) reinforced composites”, *J. Mech Res Commun*; Vol. 32, 2005, 481- 489.
- [18] Hernandez P., Avilés F.; “Modeling the influence of interphase on the elastic properties of carbon nanotube composites”, *J. Computational Materials Science*; Vol. 47, 2010, 926-933.
- [19] Seidel G.D., Lagoudas D.C.; “Micromechanical analysis of the effective elastic properties of carbon nanotube reinforced composites”, *J. Mechanics of Materials*; Vol. 38, 2006, 884-907.
- [20] Halpin, J.C., Tsai, S.W.; “Environmental factors in composite material design”. *US Air Force Materials Laboratory Report*; AFML-TR, 1969:67-423.
- [21] Quian D., Dickey E.C., Andrews R., Rantel, T.; “Load Transfer and Deformation Mechanisms in Carbon Nanotube-Polystyrene Composites”, *J. Appl. Phys. Lett.* ; Vol. 76, 2000, 2828-2870.
- [22] Li C., Chou T.W.; “Multiscale modeling of carbon nanotube reinforced polymer composites”. *J. Nanoscience & Nanotechnology*; Vol. 3, 2003, 423-430.
- [23] Shokrieh M., Rafiee R.; “Stochastic multi-scale modeling of CNT/polymer composites.” *J. Computational Materials Science*; Vol. 50, 2010, 437-446.
- polymer-carbon nanotube composites”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*; Vol. 193, 2004, 1773-1788.
- [5] Han Y, Elliott J. “Molecular dynamics simulations of the elastic properties of polymer/carbon nanotube composites”, *Comput Mater Sci*; Vol. 39, 2007, 315-323.
- [6] Thostenson ET., Chou TW.; “On the elastic properties of carbon nanotube-based composites: modeling and characterization”. *Physics D: Applied Physics*; Vol. 36, 2003, 573-82.
- [7] Villoria R.G., Miravete A.; “Mechanical model to evaluate the effect of the dispersion in nanocomposites” *Acta Materialia*; Vol. 55, 2007, 3025-3031.
- [8] Lahoz P.L., Maser W., Martinez T., Benito A., Seeger T., Cano P., Villoria R., Miravete A.; “Mechanical Characterization of Carbon Nanotube Composite Materials” *Mechanics of Advanced Materials and Structures*; Vol. 12, 2005, 13-19.
- [9] Seidel G.D., Lagoudas D.; “Micromechanical analysis of the effective elastic properties of carbon nanotube reinforced composites”, *Mechanics of Materials*; Vol. 38, 2006, 884-907.
- [10] Fisher F.T., Bradshaw R.D., Brinson L.C.; “Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites-I: Modulus predictions using effective nanotube properties”, *Composites Science and Technology*; Vol. 63, 2003, 1689-1703.
- [11] Bradshaw R.D., Fisher, F.T., Brinson, L.C., “Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites-II: modeling via numerical approximation of the dilute strain concentration tensor”, *Compos. Sci. Technol.*; Vol. 63, 2003, 63 1689-1703.
- [12] Anumandla V., Gibson R.F.; “A comprehensive closed form micromechanics model for estimating the elastic modulus of nanotube-reinforced composites”, *Composites: Part A*; Vol. 37, 2006, 2178-2185.
- [13] Shi D.L., Feng X.Q., Huang Y.Y., Hwang K.C., Gao H.; “The Effect of Nanotube Waviness and Agglomeration on the Elastic Property of Carbon Nanotube- Reinforced

- nanotubes". J. Advanced Functional Materials; Vol. 14, 2004, 643-648.
- [27] Lopez M.A., Valentini L., Biagiotti J., Kenny J.M.; Thermal and mechanical properties of single-walled carbon nanotubes- polypropylene composites prepared by melt processing, J. Carbon; Vol. 43, 2005, 1499-1505.
- [28] Gojny F.H., Wichmann M.H., Fiedler B., Schulte K.I.; "Influence of different carbon nanotubes on the mechanical Properties of epoxy matrix composites –A comparative study". J. Composites Science and Technology; Vol. 6, 2005, 2300–2313.
- [24] Odegard G.M., Gates T.S., Wise K.E., Park C., Siochi E.J.; "Constitutive modeling of nanotube-reinforced polymer composites". J. Composites Science and Technology; Vol. 63, 2003, 1671–1687.
- [25] Shokrieh M., Rafiee R., "On the tensile behavior of an embedded carbon nanotube in polymer matrix with non-bonded interphase region", J. Composite Structure; Vol. 92, 2010, 647-652.
- [26] Zhu B.J., Peng H., Macias R.M., Margrave J.L.; "Reinforcing Epoxy polymer composites through covalent integration of functionalized