



پیش‌بینی مدول الاستیک موثر نانوکامپوزیت با استفاده از مدل‌سازی المان محدود در مقیاس میکرو

عبدالحسین فریدون^{۱*}، اسماعیل سعیدی^۲، حسین همتیان^۳

۱- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه سمنان، سمنان

۲- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه سمنان، سمنان

۳- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه سمنان، سمنان

* سمنان، صندوق پستی ۳۶۳-۳۵۱۹۵، afereidoon@semnan.ac.ir

چکیده- ساخت و آزمایش نانوکامپوزیت‌های اپوکسی/نانولوله‌های کربنی، با توجه به چالش‌های پخش نانولوله‌های کربنی در بستر رزین و هزینه‌های تولید، مقرون به صرفه نمی‌باشد. لذا پیش‌بینی خواص مکانیکی این نانوکامپوزیت‌ها به وسیله روش‌های شبیه‌سازی راهکار مناسبی است، اما ابعاد واقعی نانولوله‌های کربنی و نسبت طول به قطر آن‌ها، مدل‌سازی المان محدود را در ابعاد نانو و میکرو با مشکل مواجه می‌کند. در این مقاله، با استفاده از المان تیر به عنوان نانولوله‌های کربنی و ایجاد المان حجمی نمونه از نانوکامپوزیت در مقیاس میکرو، چیدمان‌های مختلفی از نانولوله‌های کربنی در بستر اپوکسی ارائه شده است. اثر پارامترهای درصد حجمی، نسبت منطری و اثرات موجی بودن نانولوله‌های کربنی بر مدول الاستیک موثر نانوکامپوزیت بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد با این روش، محدودیت مدل‌سازی ابعاد میکرو و نانو در کنار هم از بین رفته و شبیه‌سازی نانوکامپوزیت با شرایط واقعی ممکن می‌شود و می‌توان اثرات انواع پارامترهای هندسی را در مدول موثر بررسی کرد. از طرف دیگر نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی نیز تطابق مناسبی دارند.

کلیدواژه‌ها: نانولوله کربنی، نانوکامپوزیت، مدول الاستیک موثر، المان حجمی نمونه، روش المان محدود

Prediction of nanocomposite effective elastic moduli by finite element modeling in micro scale

A. Fereidoon^{1*}, E. Saeedi², H. Hemmatian³

1- Assoc. Prof., Mech. Eng., Semnan Univ., Semnan, Iran

2- MSc., Mech. Eng., Semnan Univ., Semnan, Iran

3- PhD Student, Mech. Eng., Semnan Univ., Semnan, Iran

*P.O.B. 35139-363 Semnan, afereidoon@semnan.ac.ir

Abstract- Since there are struggles with CNTs dispersion in the resin and production costs, synthesis and test of epoxy/carbon nanotube (CNT) nanocomposites is not economical. For this reason, simulation methods are proper techniques to predict mechanical properties of these nanocomposites. But the actual dimensions of CNTs and their length to diameter (aspect) ratio is a cause for concern in nano and micro scale finite element modeling. In this paper, different arrangements of CNTs in epoxy matrix have been presented using a beam element as a CNT and creating representative volume element of nanocomposite in micro scale. Effects of volume fraction, aspect ratio and wave effects of CNTs on nanocomposite effective elastic moduli have been investigated. The results show that this method eliminates the limitation of both micro and nano molding and simulates the real conditions of nanocomposites and can be used to examine the effects of geometric parameters in the effective moduli. On the other hand, the simulation results have a good agreement with experimental results.

Keywords: Carbon Nanotube, Nanocomposite, Effective Elastic Moduli, Representative Volume Element, Finite Element Method

۱- مقدمه

مواد مرکب پایه پلیمری^۱ به‌طور گسترده در صنایع از جمله صنایع هوایی و اتومبیل‌سازی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. یکی از علل اصلی این استفاده نسبت استحکام به وزن زیاد این مواد می‌باشد. بنابراین تلاش‌های بسیاری برای تولید کامپوزیتی با استحکام بیشتر و وزن کمتر انجام گرفته است.

پس از کشف نانولوله‌های کربنی^۲ توسط ایچما[۱] و استخراج خواص آن[۲]، مشخص شد که این مواد از خواص مکانیکی خارق‌العاده‌ای نظیر مدول یانگ معادل ۱TPa و استحکام تسلیم در حدود ۶۳GPa برخوردار می‌باشند. البته به علت تنوع نوع و روش تولید این مواد، نتایج آزمایش‌ها متفاوت می‌باشند[۳]. خواص خارق‌العاده نانولوله‌های کربنی آن‌ها را به‌عنوان تقویت‌کننده‌های مناسبی برای مواد مرکب پایه پلیمری معرفی کرده است[۴،۵]. تلاش‌های بسیاری برای دستیابی به کامپوزیتی با خواص استحکام زیاد صورت گرفته است که بسیاری از آن‌ها تحقیقات تجربی می‌باشند. اما نتایج نشان می‌دهد خواص به‌دست‌آمده از نانوکامپوزیت‌های تولیدشده، مانند خواص خارق‌العاده نانولوله‌های کربنی نیست[۶-۱۰]. ازجمله دلایل این پدیده به چالش‌های پخش نانولوله‌های کربنی در بستر رزین و ایجاد تجمع نانولوله‌های کربنی در ماتریس اشاره شده است. از طرف دیگر، هزینه زیاد تولید نانولوله‌های کربنی، ساخت نمونه‌های نانوکامپوزیتی و استخراج خواص مکانیکی آن را محدود کرده است. بنابراین پیش‌بینی خواص با استفاده از روش‌های تحلیلی و مدل‌سازی عددی مناسب می‌باشد.

نانوکامپوزیت حاصل از پخش نانولوله کربنی در بستر رزین اپوکسی ماده‌ای ناهمگن و نامتقارن است و به این ترتیب برای پیش‌بینی خواص آن پیچیدگی‌های زیادی وجود دارد. با در نظر گرفتن فرضیاتی، تکنیک‌های پیش‌بینی خواص ایجاد شده است. با در نظر گرفتن نانولوله‌های کربنی به‌عنوان الیافی کوتاه در بستر ماتریس و استفاده از قانون اختلاط، مدول الاستیک نانوکامپوزیت‌ها پیش‌بینی شده است[۱۱،۱۲]. همچنین ادگارد و همکاران روش مدل‌سازی پیوسته معادل را برای شبیه‌سازی ساختارهای بی‌شکل مواد مانند پلیمرها، نانولوله‌ها و

نانوکامپوزیت‌های پلیمری ارائه دادند[۱۳،۱۴]. این روش شامل سه مرحله ایجاد یک المان حجمی نمونه^۳ از مدل مولکولی و مدل معادل موثر آن، روابط تشکیل‌دهنده مدل موثر پیوسته و معادلات پتانسیل انرژی تغییر شکل برای شرایط مرزی یکسان می‌باشد[۱۵-۱۷]. از المان حجمی نمونه با رویکرد المان محدود برای محاسبه مدول موثر کامپوزیت توسط سلمی نیز استفاده شده است[۱۸-۲۰]. علاوه بر این سلمی و همکارانش[۲۱] با مدل نمودن قسمتی از نانولوله و ماتریس با روش المان محدود اثر درصد حجمی بر مدول را بررسی نموده‌اند.

شکریه و همکارانش روش تحلیلی جدیدی ارائه کرده‌اند که با استفاده از روابط الاستیسیته، نانولوله کربن را به‌صورت تکرار شده توپر با خواص ایزوتروپ عرضی معادل‌سازی نموده و ناحیه فاز واسط بین نانولوله کربن و ماتریس را با استفاده از روابط مکانیک محیط پیوسته، به‌صورت یک محیط مادی ایزوتروپ در نظر گرفته‌اند[۲۲]. اثر انحنا بر مدول موثر کامپوزیت نیز با قراردادن قسمتی از نانولوله سینوسی‌شکل درون حجم کنترل و استفاده از روش المان محدود محاسبه شده است[۲۳-۲۵]. اثر انحنا با استفاده از قانون مخلوط‌ها نیز مورد بررسی قرار گرفته است[۲۳،۲۶]. شی و همکارانش با قراردادن قسمتی از نانولوله به‌صورت مارپیچی^۴ درون حجم کنترل و محاسبه مدول معادل آن از روش موری-تاناکا برای محاسبه مدول موثر استفاده نمودند[۲۷]. همچنین از روش دینامیک مولکولی با در نظر گرفتن نیروهای بین اتمی برای محاسبه خواص الاستیک استفاده شده است[۲۸،۲۹]. اما مشکل اصلی آن ناکارآمدی روش در هنگام افزایش تعداد اتم‌ها و بزرگ‌بودن آن‌ها می‌باشد.

در نانولوله‌ها نسبت طول به قطر بسیار زیاد می‌باشد و این مسئله یکی از مزایای آن‌ها نسبت به سایر الیاف است که باعث انتقال بهتر تنش‌های اعمال‌شده بر ماتریس به آن‌ها می‌شود. اما این نسبت طول به قطر بالا مشکلاتی را در شبیه‌سازی اثر نانولوله‌ها درون ماتریس ایجاد می‌کند. حتی در درصد حجمی‌های بسیار پایین هم توزیع نانولوله‌ها درون ماتریس به‌صورت یک کلاف درهم پیچیده است. همچنین نشان داده شده که شکل نانولوله‌ها اثرات زیادی در خواص الاستیک کامپوزیت دارد[۳۰]. بنابراین شبیه‌سازی نانولوله‌ها درون

3. Representative volume element

4. Helical

1. Polymer matrix composite

2. Carbon nanotubes

۲- مدل سازی

۲-۱- مدل سازی هندسی

المان حجمی نمونه به شکل مکعب در نظر گرفته شده است. همان‌طور که قبلاً نشان داده شده [۳۸،۳۷،۳۳،۳۱]، مدل پیوسته معادل نانولوله‌ها می‌تواند به صورت استوانه توخالی باشد. بنابراین در شبیه‌سازی انجام گرفته نانولوله‌ها به صورت استوانه‌هایی توخالی به ضخامت $0/34$ نانومتر در نظر گرفته شده‌اند. این مقدار، ضخامت پذیرفته شده برای فاصله بین لایه‌ای گرافیت می‌باشد. نشان داده شده که بیشترین توزیع قطر در نانولوله‌ها در قطر 20 نانومتر می‌باشد [۳۹،۱۱]؛ لذا برای مدل سازی از این قطر استفاده شده است. از آنجا که قطر نانولوله به عنوان مشخصه آن در مدل میکرو استفاده شده، نوع نانولوله‌ها (آرمچر، زیگ‌زاگ) لحاظ نشده است. هندسه سه‌بعدی این اجازه را می‌دهد که نانولوله‌های کربنی در جهت‌گیری‌های مختلف و انحنای متفاوت و جایگاه‌های مختلف در فضا قرار گیرند. هر ضلع این مکعب به اندازه طول نانولوله کربنی می‌باشد. درواقع بار اعمالی به نانوکامپوزیت به ماتریس منتقل شده و سپس بین ماتریس و نانولوله انتقال نیرو و جابه‌جایی انجام می‌شود. بنابراین، طول اضلاع المان حجمی به اندازه نانولوله توزیع شده در ماتریس انتخاب شده است تا نانولوله‌ها نتوانند دو وجهی که بارگذاری بر آن‌ها اعمال می‌شود را به هم متصل سازند و در محاسبات خطا ایجاد کنند. بنابراین، این حجم کنترل به عنوان نماینده قسمتی از نانوکامپوزیت با توزیع مشخص از نانولوله‌های کربنی در بستر ماتریس می‌باشد. شکل ۱ چهار وضعیت پخش نانولوله کربنی در المان حجمی را نشان می‌دهد.

۲-۲- مدل سازی المان محدود

اجزای هر نانولوله کربنی از المان تیر ۱۸۸ با مدول یانگ $1TPa$ تشکیل شده است. طول هر المان یک شصتم طول کل نانولوله کربنی می‌باشد. ماتریس اپوکسی با مدول یانگ $2/559$ گیگاپاسکال با استفاده از المان سه‌بعدی 245 مش‌بندی شده است [۴۰]. تحقیقات انجام شده نشان می‌دهد در موقعیت سطح مشترک نانولوله و ماتریس اتصال صلب نبوده، بلکه تنش برشی

ماتریس به‌صورتی که تنها قسمتی از طول نانولوله مدل شود و یا تنها اثر یکی از نانولوله‌ها درون ماتریس بررسی شود و یا اثرات انحنا حذف شود، تغییرات محسوسی در مدول موثر کامپوزیت ایجاد می‌نماید.

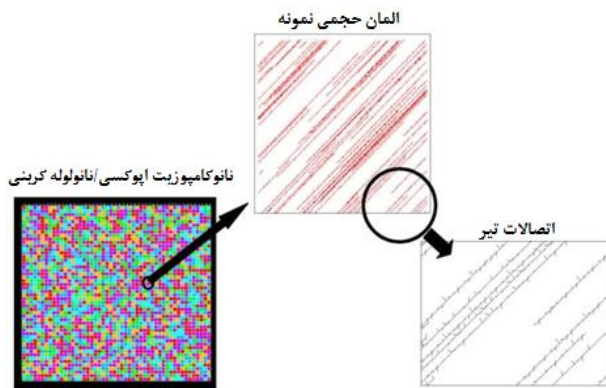
موضوع مهم دیگر، اختلاف بسیار زیادی است که در ابعاد یک نانولوله وجود دارد. به‌طوری که قطر آن در محدوده نانو و طول آن در محدوده میکرو می‌باشد. با در نظر گرفتن این مسئله نمی‌توان از مدل سازی ساده هندسی برای مدل سازی ماتریس و نانولوله استفاده نمود. مشخصات هندسی و خواص الاستیک نانولوله کربن را می‌توان به‌خوبی توسط تیرها مدل نمود و استفاده از یک تیر معادل، به‌علت اینکه ابعاد آن بسیار نزدیک به واقعیت می‌باشد، بسیار مناسب است [۳۱-۳۴].

کریم‌زاده و همکارانش یک روند مدل سازی محاسباتی برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی کامپوزیت پلیمر/نانولوله پیشنهاد دادند که در آن برهم‌کنش بین نانولوله و ماتریس با استفاده از تئوری مکانیک پیوسته و المان محدود مدل شده است [۳۵]. مدول یانگ نانوکامپوزیت با استفاده از المان حجمی نماینده دوبعدی متقارن و سه‌بعدی شامل یک نانولوله تعیین شده است. آیت‌اللهی و همکارانش نیز، مدل سازی چندمقیاسه را برای پیش‌بینی خواص غیرخطی نانوکامپوزیت پلیمر/نانولوله تحت شرایط بارگذاری کششی، خمشی و پیچشی ارائه داده‌اند که فاز میانی به‌صورت پیوسته مدل شده و مدول یانگ‌های مختلفی برای آن فرض شده است [۳۶]. مشخص شده که فاز میانی اثر اندکی بر سفتی نانوکامپوزیت دارد، ولی نسبت طول نانولوله به المان حجمی کاملاً بر مدول نانوکامپوزیت موثر می‌باشد.

در مقاله حاضر، با فرض نانولوله‌های کربنی به‌عنوان المان تیر، المان حجمی سه‌بعدی نماینده از نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی ایجاد شده است، که دربردارنده نانولوله‌های پراکنده شده می‌باشد. با این روش، مدلی نزدیک به واقعیت در مقیاس میکرو تولید می‌شود که در آن درصد حجمی نانولوله‌های کربنی نه با تغییر ابعاد حجم کنترل مورد استفاده، بلکه با مقدار و تعداد نانولوله‌ها تغییر می‌کند. اثر جهت‌گیری نانولوله‌ها به‌صورت منظم و نامنظم، انحنا، نسبت منظری و شکل هندسی نانولوله، همچنین درصد حجمی بر مدول موثر نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار گرفته است.

1. Beam188

2. Solid 45



شکل ۲ المان حجمی نمونه به‌عنوان جزئی از نانوکامپوزیت و نحوه اتصال نانولوله‌ها توسط تیرهای اتصال

با اعمال جابه‌جایی به صفحه جلویی به‌اندازه ۰/۵ درصد طول المان حجمی، در حالی که صفحه عقبی در راستای بارگذاری مقید شده است، مدول الاستیک موثر نانوکامپوزیت با فرض رابطه خطی از رابطه (۱) به‌دست می‌آید:

$$E = \frac{PL}{\delta A} \quad (1)$$

که در آن P نیروی محاسبه‌شده توسط نرم‌افزار، L طول حجم کنترل، δ جابه‌جایی و A مساحت وجه جانبی حجم کنترل می‌باشد. از آنجا که نانولوله از لوله‌شدن لایه‌های گرافیت حاصل می‌شود (شکل ۳)، رابطه درصد حجمی به‌صورت زیر می‌باشد:

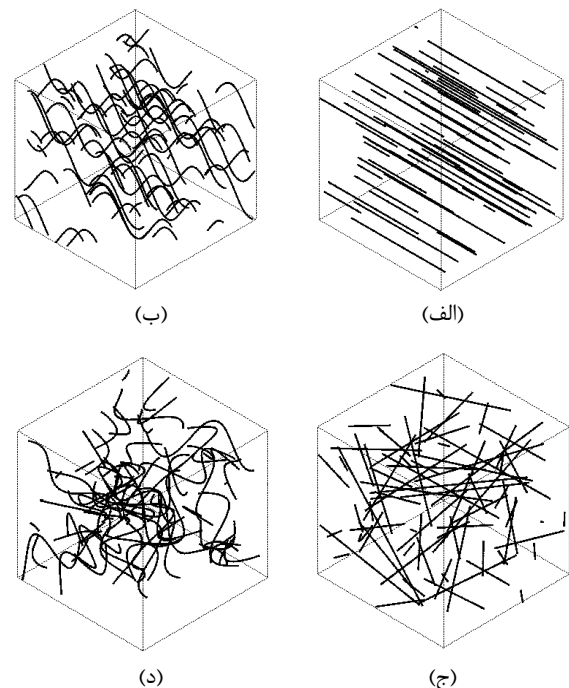
$$V_f = \frac{\pi(d_o^2 - d_i^2)L_{\text{Sum}}}{4L_{\text{Sq}}^3} \quad (2)$$

V_f نسبت حجمی، d_o قطر خارجی، d_i قطر داخلی، L_{Sum} مجموع طول نانولوله‌های توزیع‌شده در ماتریس و L_{Sq} طول ضلع المان حجمی می‌باشد. با فرض اینکه نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی تنها از این دو فاز تشکیل شده باشد و فاصله هوایی مابین نانولوله و ماتریس وجود نداشته باشد، رابطه بین V_f نسبت حجمی نانولوله و m_f نسبت وزنی نانولوله به‌صورت زیر می‌باشد:

$$V_f = \left[\frac{\rho_f}{m_f} - \rho_r + 1 \right]^{-1} \quad (3)$$

که $\rho_r = \rho_{\text{CNT}}/\rho_m$ نسبت چگالی نانولوله به ماتریس است و چگالی نانولوله برابر چگالی لایه گرافیت، $2/3 \text{ g/cm}^3$ فرض شده است [۴۱].

وجود دارد. با توجه به اینکه یک حجم کنترل شامل تعداد زیادی از نانولوله‌ها با انحنا و جهات مختلف مدل شده است و همچنین فاز میانی اثر اندکی بر سفتی نانوکامپوزیت دارد [۳۶]. برای ساده‌سازی، از المان‌های تیر^۱ با سفتی زیاد برای اتصال نانولوله به ماتریس استفاده شده است. سفتی زیاد این تیرهای کوتاه باعث می‌شود تنها نیرو و جابه‌جایی بین ماتریس و نانولوله منتقل شود. برای این منظور از هر گره بر روی نانولوله کربنی یک تیر به یک گره از المان بستر، که در فاصله مشخص قرار دارد، متصل می‌شود. برای انجام این کار برنامه‌ای در نرم‌افزار المان محدود تجاری انسیس^۲ نوشته شده است. شایان ذکر است هیچ‌گونه اتصالی بین نانولوله‌های کربنی که از کنار هم می‌گذرند وجود ندارد. همچنین، هر جزء از نانولوله تنها توسط یک تیر اتصال به ماتریس متصل شده است. در شکل ۲ نحوه مدل‌سازی المان حجمی نمونه به‌صورت جزئی از نانوکامپوزیت و همچنین نحوه اتصال نانولوله‌ها به ماتریس توسط تیرهای اتصال نشان داده شده است.



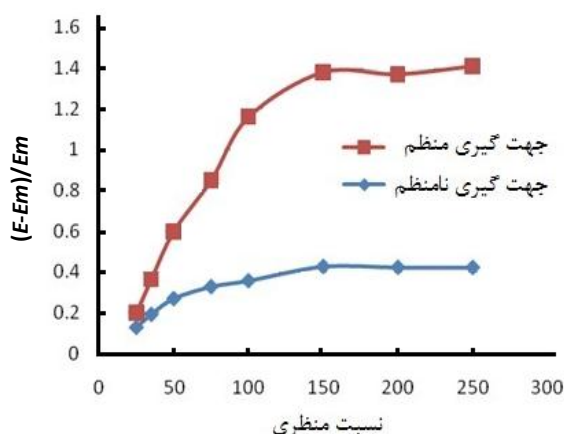
شکل ۱ پخش و جهت‌گیری نانولوله کربنی در المان حجمی، (الف) هم‌راستا و صاف، (ب) هم‌راستا و دارای انحنا، (ج) جهت‌گیری نامنظم و صاف، (د) جهت‌گیری نامنظم و دارای انحنا

1. Beam3
2. ANSYS

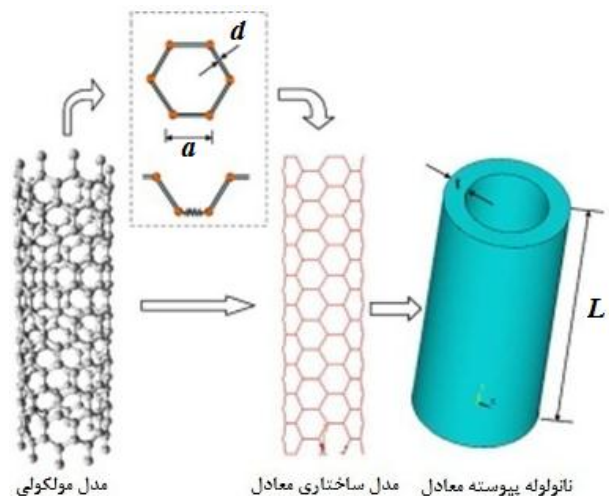
ب) محل قرارگیری نانولوله‌ها به‌صورت نامنظم باشد، اما جهت‌گیری آن‌ها به‌صورت هم‌راستا با راستای اعمال بار باشد (شکل ۱-الف).

مقدار افزایش مدول موثر نسبت به افزایش نسبت طول به قطر برای هر دو حالت در شکل ۵ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، افزایش نسبت منطری به میزان بیشتر از ۱۵۰ تاثیری در افزایش مدول موثر ندارد. هاکو و راماستی [۱۷] نیز نشان دادند هرچند با افزایش مقدار نسبت منطری از ۱۰ تا ۱۰۰ مقدار تنش جذب‌شده توسط نانولوله افزایش یافته و در نتیجه مدول موثر نیز افزایش می‌یابد، اما با افزایش آن تا میزان ۴۰۰ این تاثیر بسیار کم شده و افزایش بیش از ۴۰۰ تاثیری بر مقدار تنش جذب‌شده توسط نانولوله ندارد.

برای تحلیل علت این پدیده طول المان حجمی را بلندتر انتخاب نموده و در حالتی که نانولوله‌ها به‌صورت هم‌راستا درون ماتریس جای‌گذاری شده‌اند، المان حجمی بارگذاری انجام شده و پس از تحلیل، تنش‌های محوری درون یکی از نانولوله‌ها، که به‌طور کامل درون ماتریس جای گرفته است، بررسی شده است (شکل ۶). همان‌طور که مشاهده می‌شود در دو انتهای نانولوله تنش محوری وجود ندارد و با نزدیک‌شدن به سمت مرکز از دو سمت تنش محوری به‌سرعت افزایش می‌یابد تا در نهایت به مقدار ثابتی می‌رسد. بنابراین وقتی نانولوله‌ها بدون انحنا باشند، افزایش نسبت طول به قطر بیش از ۱۵۰ تاثیر زیادی بر افزایش مدول ندارد.



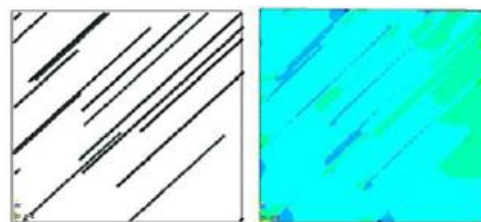
شکل ۵ افزایش مدول موثر نسبت به افزایش نسبت منطری با جهت‌گیری منظم و نامنظم



شکل ۳ ارتباط مدول پیوسته معادل نانولوله با مدول ملکولی آن [۳۷]

۳- نتایج و تحلیل‌ها

عوامل زیادی بر مقدار مدول موثر کامپوزیت نقش دارند. برخی از این عوامل عبارت‌اند از طول، قطر، انحنا، درصد حجمی نانولوله، میزان همگن‌بودن توزیع، جهت قرارگیری نانولوله‌ها در ماتریس و غیره. در روش المان حجمی نمونه با توزیع سه‌بعدی سعی شده تا اکثر مواردی که بر میزان مدول موثر اثرگذار هستند بررسی گردند. یک نمونه از تحلیل انجام‌شده در شکل ۴ آورده شده است.



شکل ۴ المان حجمی نمونه قبل و بعد از تحلیل

۳-۱- بررسی نسبت طول به قطر و جهت‌گیری نانولوله بر مدول موثر

در ابتدا اثر جهت‌گیری نانولوله‌ها درون ماتریس و نسبت طول به قطر بر مدول موثر بررسی می‌شود. برای این منظور، دو حالت فرض شده است که در آن‌ها نانولوله‌ها کاملاً صاف باشند: الف) محل قرارگیری نانولوله‌ها کاملاً به‌صورت نامنظم باشد (شکل ۱-ج).

نانولوله‌ها به یک‌سوم مدول موثر در حالت توزیع هم‌راستای نانولوله‌ها کاهش می‌یابد.

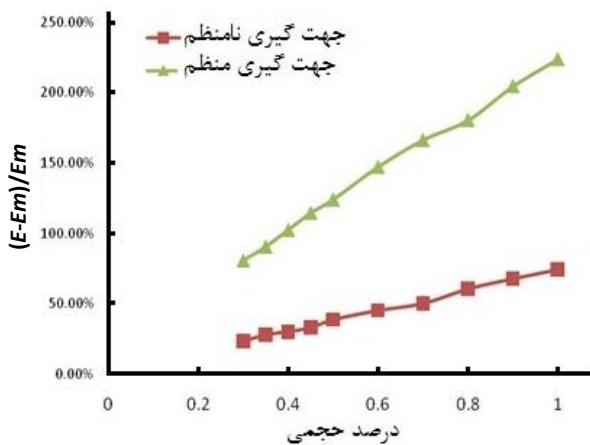
۳-۳- اثر انحنا و جهت‌گیری بر مدول موثر

به‌علت نسبت طول به قطر بالای نانولوله و محدودیت‌های روش‌ها و دستگاه‌های پخش نانولوله در ماتریس، نانولوله‌های توزیع شده در ماتریس صاف نبوده و دارای انحنا می‌باشند. برای اعمال اثر انحنا در مقدار مدول موثر فرض شده شکل منحنی نانولوله‌ها درون ماتریس به‌صورت سینوسی باشد. برای محاسبه مقدار انحنا از نسبت a/λ استفاده شده است. همان‌طور که در شکل ۸ نشان داده شده است، a دامنه انحنا و λ طول موج نانولوله می‌باشد.

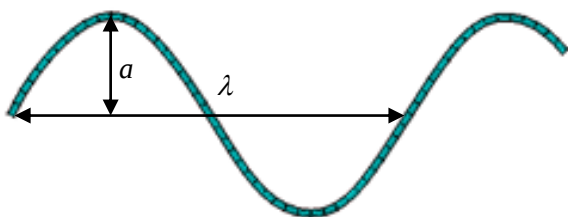
در این قسمت نیز جهت‌گیری نانولوله‌ها در دو حالت برای انحنای سینوسی بررسی شده است:

الف) در حالتی که جهت‌گیری نانولوله‌ها درون ماتریس هم‌راستا با محور بارگذاری باشد (شکل ۱-ب).

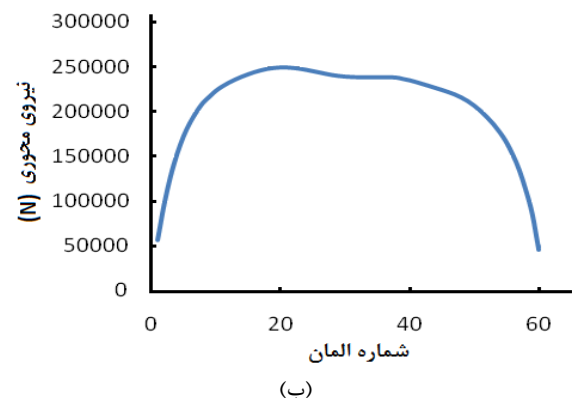
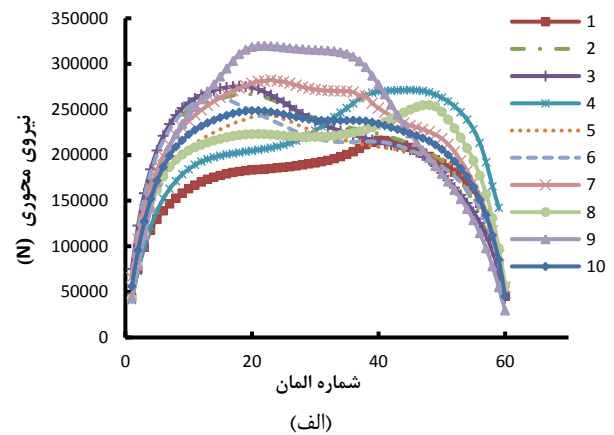
ب) در حالتی که جهت‌گیری نانولوله‌ها درون ماتریس به‌صورت نامنظم باشد (شکل ۱-د).



شکل ۷ مقدار افزایش مدول موثر با افزایش درصد حجمی



شکل ۸ یک نانولوله منحنی‌شکل با دامنه انحنا a و طول موج λ



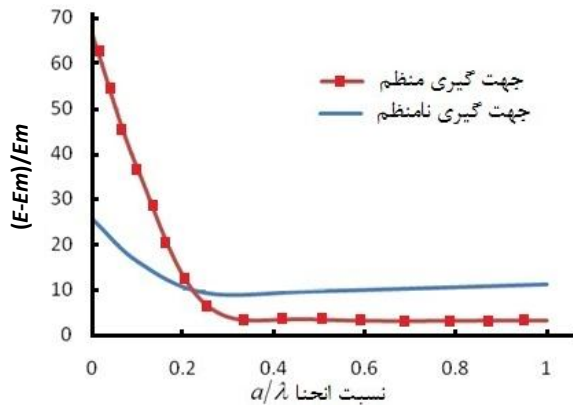
شکل ۶ الف) نیروی محوری در ده نانولوله انتخاب شده در ماتریس،
ب) میانگین نیروی محوری نانولوله‌ها

۳-۲- بررسی اثر درصد حجمی و جهت‌گیری نانولوله بر مدول موثر

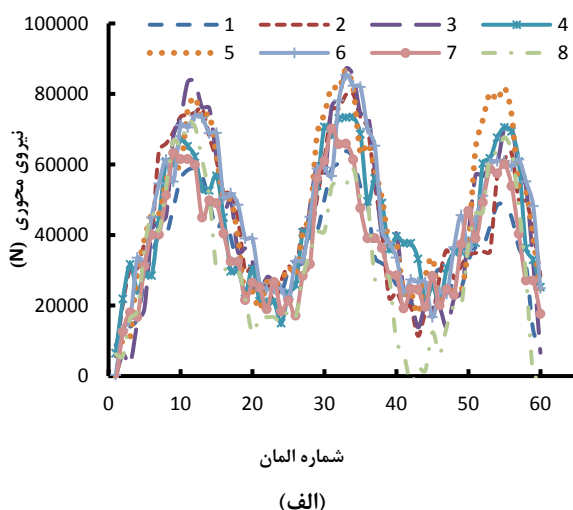
برای تغییر درصد حجمی نانولوله، L_{Sum} تغییر یافته است. مقدار افزایش مدول موثر برای نانولوله‌های صاف در دو حالت توزیع هم‌راستا و نامنظم در شکل ۷ نشان داده شده است.

این نمودار نشان‌دهنده اثر نحوه جهت‌گیری نانولوله‌ها درون ماتریس بر مدول موثر می‌باشد. اگر جهت‌گیری نانولوله‌ها درون ماتریس به‌صورت نامنظم باشد، مدول موثر بسیار کاهش می‌یابد. زمانی که نانولوله‌ها با جهت‌گیری نامنظم قرار می‌گیرند، چرخش نانولوله‌ها درون ماتریس موجب می‌شود تا با محور اعمال نیرو زاویه داشته باشند. این پدیده موجب انتقال نامناسب نیرو و تنش از ماتریس به نانولوله‌ها می‌گردد، زیرا به‌جای آنکه کل تنش ماتریس به نانولوله منتقل شود، مولفه‌ای از تنش ماتریس، که در راستای محور نانولوله می‌باشد، به نانولوله منتقل می‌شود. بنابراین مقدار مدول موثر محاسبه‌شده توسط روش المان حجمی نمونه در حالت جهت‌گیری نامنظم

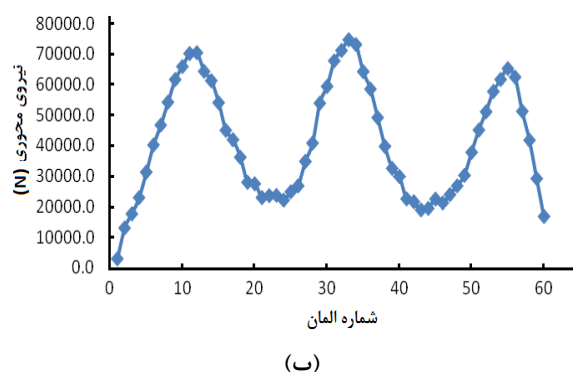
نانولوله، بسیار کاهش می‌یابد و این انتقال تنش پایین درنهایت باعث کاهش مدول موثر می‌گردد.



شکل ۹ میزان تغییر مدول موثر با نسبت انحنای برای درصد حجمی ۰/۳ و نسبت طول به قطر ۳۰۰



(الف)



(ب)

شکل ۱۰ (الف) نیروی محوری در هشت نانولوله انتخاب‌شده به صورت نامنظم، (ب) میانگین نیروی محوری در هشت نانولوله

مدول موثر برحسب نسبت انحنای برای درصد حجمی ۰/۳ و نسبت طول به قطر ۳۰۰ در شکل ۹ نشان داده شده است. در حالت (الف)، با افزایش انحنای تا مقدار ۰/۲۵، مدول موثر به شدت کاهش می‌یابد و پس از آن مدول موثر اندکی افزایش می‌یابد تا به مقدار ثابتی برسد. این مقدار بحرانی (۰/۲۵-۰/۵) با مراجع [۲۶، ۲۳، ۲۵] که انحنای یک نانولوله درون یک المان را بررسی نموده‌اند تطابق خوبی دارد. علت افت شدید مدول موثر با افزایش انحنای این است که نیروی منتقل‌شده از ماتریس به نانولوله در حالت (الف)، که نانولوله‌ها هم‌راستا با محور بارگذاری می‌باشند، صرف کشیده‌شدن و افزایش نیروی محوری نانولوله می‌شود. اما با افزایش انحنای، این نیروی منتقل‌شده صرف بازشدن انحنای نانولوله می‌گردد و از آنجا که نسبت طول به قطر زیاد است، نانولوله مقاومت زیادی در برابر این تغییر شکل نخواهد داشت.

در حالت (ب)، علاوه بر دلایلی که در قسمت قبل بیان شد، هم‌جهت نبودن همه نانولوله‌ها و در نتیجه آزادی چرخش نانولوله‌ها، همان‌طور که در مورد نانولوله‌های بدون انحنای نیز بیان شد، مزید بر علت شده و باعث کاهش بیشتر مدول موثر خواهد شد.

در هر دو حالت، با افزایش نسبت انحنای دامنه و با ثابت بودن طول موج، انحنای نانولوله بیشتر می‌شود. این اثر در حالت توزیع (الف)، به علت اینکه همراه با دورشدن فاصله این خطوط از محور نانولوله و نیروی اعمال‌شده می‌باشد، اثر کمتری دارد. اما در حالت (ب)، چون تعدادی از این خطوط به صورت نامنظم در جهت اعمال بار قرار می‌گیرند، موجب شده تا با افزایش انحنای، مدول موثر اندکی افزایش یابد.

فیش و همکارانش نانولوله‌های توزیع‌شده در ماتریس را مورد بررسی قرار دادند و نشان دادند بیشترین پراکندگی انحنای در نانولوله‌های توزیع‌شده در بازه (۰/۱-۰/۵) می‌باشد [۲۴]. لذا نتایج در این نسبت انحنای به واقعیت نزدیک‌تر است.

در شکل ۱۰، نیروهای محوری در چند نانولوله دارای انحنای با نسبت دامنه به طول موج ۰/۲۵، نسبت منظر ۱۰۰ و درصد حجمی ۰/۳ بررسی شده است.

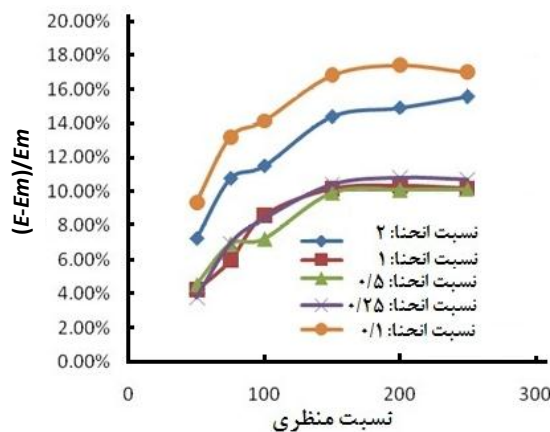
همان‌طور که مشاهده می‌شود، مقدار ماکزیمم تنش انتقال یافته به نانولوله در مقایسه با حالت نانولوله صاف (شکل ۶) کمتر است و تنش در دو انتها، در دامنه نزدیک به صفر انحنای

۳-۴- اثر طول موج بر مدول موثر

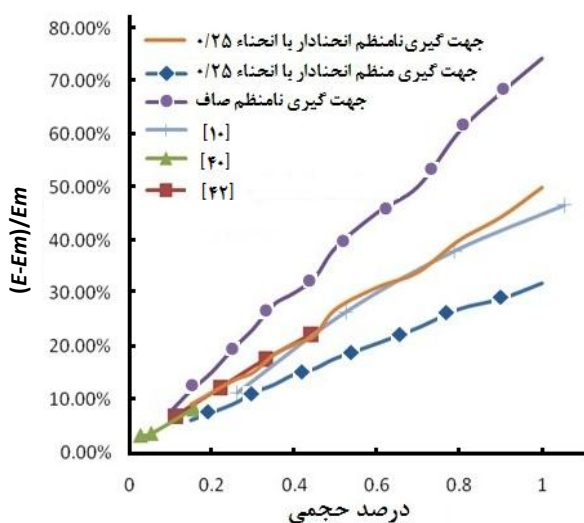
در شکل ۱۱، مدول موثر برحسب نسبت انحنا برای درصد حجمی ۰/۵ و نسبت منظرهای ۷۵ و ۱۵۰ در طول موج‌های مختلف رسم شده است. sid طول موجی است که به‌عنوان مرجع انتخاب شده تا اثر کاهش و افزایش آن بر مدول موثر در نسبت انحناهای مختلف مورد بررسی قرار گیرد. از بررسی نمودار شکل‌های ۱۱- (الف) و (ب) مشخص می‌شود، علاوه بر نسبت انحنا، طول موج انحنا نانولوله نیز اثر قابل ملاحظه‌ای بر مدول موثر دارد. نسبت انحنا ۰/۲۵ همچنان کمترین مقدار مدول موثر را دارا می‌باشد و همان‌طور که قبلاً اشاره شد، با افزایش نسب انحنا به بیش از ۰/۲۵، مدول موثر اندکی افزایش می‌یابد.

در شکل ۱۲، مقدار مدول موثر برحسب نسبت منظر در درصد حجمی ۰/۳ برای نسبت انحناهای مختلف آورده شده است. نتایج نشان می‌دهند برای نانولوله‌های منحنی‌شکل نیز، با افزایش نسبت طول به قطر در بیش از ۱۵۰، افزایش مدول موثر رخ نمی‌دهد. کمترین مدول موثر در نسبت انحنا ۰/۲۵ رخ می‌دهد و پیش و پس از آن افزایش می‌یابد. این روند در نمودار شکل ۱۱ نیز مشاهده می‌شود که روند افزایش مدول یانگ متناظر با نسبت انحناهای ۰/۱، ۰/۲۵، ۰/۵، ۱ و ۲ می‌باشد.

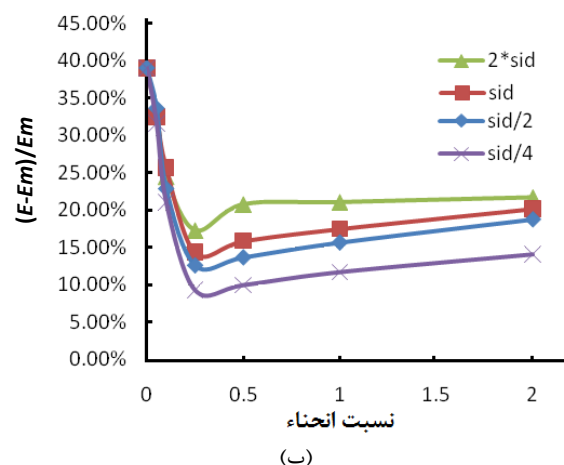
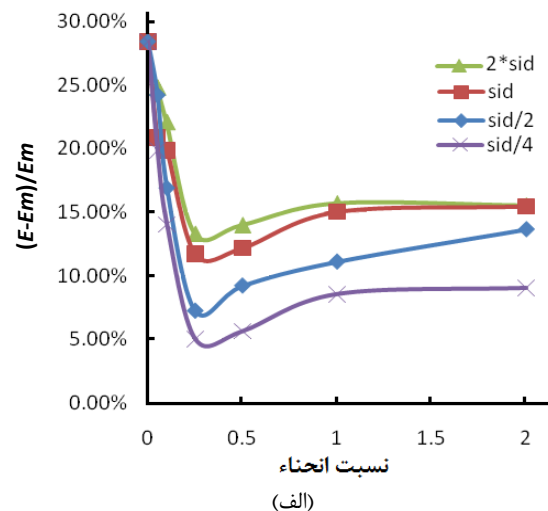
در شکل ۱۳، نتایج روش المان حجمی نمونه با نتایج آزمایشگاهی [۴۲، ۴۰، ۴۱] مقایسه شده است.



شکل ۱۲ مدول موثر برحسب نسبت منظر در درصد حجمی ۰/۳ برای نسبت انحناهای مختلف



شکل ۱۳ مقایسه نتایج روش المان حجمی نمونه با نتایج آزمایشگاهی



شکل ۱۱ تغییر مدول موثر برحسب نسبت انحنا، (الف) برای نسبت طول به قطر ۷۵ و (ب) برای نسبت طول به قطر ۱۵۰

داشت در این روش در درصد حجمی‌های پایین و یا نسبت طول به قطرهای بسیار پایین تعداد نانولوله‌هایی که در سطح نمونه و یا حجم نمونه قرار می‌گیرند بسیار کم است و مدول موثر آن بسیار متأثر از نحوه قرارگیری نانولوله می‌باشد. لذا در این موارد تعداد تکرارهای بیشتری باید انجام شود و نتایج میانگین‌گیری شود، اما چون در واقعیت مقدار نسبت طول به قطر بسیار بالاست، لذا این مدل، مدل مناسبی برای پیش‌بینی مدول موثر می‌باشد.

۵- مراجع

- [1] Iijima S., "Helical Microtubules of Graphitic Carbon", *Nature*, Vol. 354, 1991, pp. 56-58.
- [2] Yu M. F., Lourie O., Dyer M. J., Moloni K., Kelly T. F., Ruoff R. S., "Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes under Tensile Load", *Science*, Vol. 287, No. 5453, 2000, pp. 637-40.
- [3] Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T. W., Yianilos P. N., Treasy M. M. J., "Young's Modulus of Single-Walled Nanotubes", *Physical Review B*, Vol. 58, No. 20, 1998, pp. 14013-14019.
- [4] Fereidoon A., Rajabpour M., Hemmatian H., "Investigation of Elastic Moduli of Twisted Single Wall Carbon Nanotube Based on FEM", *2nd International Conference on Nanotechnology and Biosensors*, Dubai, 2011, Paper No. Q00005, IPCBEE, Vol. 25, pp. 11-15.
- [5] Fereidoon A., Rajabpour M., Hemmatian H., "Elastic Moduli of Elliptic Carbon Nanotubes Based on FEM", *International Conference of Mechanics of Nano, Micro and Macro Composite Structures*, Italy, 2012, Paper No. 101.
- [6] Nyan-Hwa T., Meng-Kao Y., Jia-Hau L., "Letters to the Editor", *Carbon*, Vol. 42, 2004, pp. 2735-2777.
- [7] Qian D., Dickey E. C., Andrews R., Rantell T., "Load Transfer and Deformation Mechanisms in Carbon Nanotube-Polystyrene Composites", *Applied Physics Letters*, Vol. 76, No. 20, 2000, pp. 2868-2870.
- [8] Gojny F. H., Wichmann M. H. G., Köpke U., Fiedler B., Schulte K., "Carbon Nanotube-Reinforced Epoxy-Composites- Enhanced Stiffness and Fracture Toughness at Low Nanotube Content", *Composites Science and Technology*, Vol. 64, 2004, pp. 2363-2371.
- [9] Gojny F. H., Schulte K., "Functionalisation Effect on the Thermo Mechanical Behaviour of Multi-Wall Carbon Nanotube/Epoxy-Composites",

همان‌طور که مشخص است، جهت‌گیری نامنظم صاف و منظم انحنادار دارای اختلاف با نتایج قبلی می‌باشند، ولی در حالت جهت‌گیری نامنظم انحنادار با انحنای ۰/۲۵، این اختلاف اندک می‌باشد. وجود انطباق به این دلیل است که در واقعیت نانولوله‌ها به‌صورت نامنظم و تصادفی و همچنین به‌صورت منحنی در ماتریس پخش می‌شوند. علاوه بر این بررسی‌ها نشان داده که بیشترین پراکندگی انحنای نانولوله‌های توزیع‌شده در بازه (۰/۱-۰/۵) می‌باشد [۲۴]. لذا نتایج در این نسبت انحنای به واقعیت نزدیک‌تر است و توزیع نامنظم نانولوله‌های انحنادار تطابق بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد.

در این مقاله، المان حجمی نمونه در سه حالت در نظر گرفته شد. ابتدا نانولوله‌های کاملاً صاف با جهت‌گیری نامنظم با بیشترین مقدار افزایش مدول موثر مورد بررسی قرار گرفت. سپس مشخص شد که نسبت انحنای ۰/۲۵ کمترین افزایش مدول را موجب می‌شود و در نهایت ترکیبی از انحنای مختلف مطابق توزیع به‌دست آمده توسط فیشر و همکارانش [۲۴] اعمال گردید. این حالت از لحاظ هندسی بیشترین تشابه را به نانولوله‌های توزیع‌شده در ماتریس در شرایط آزمایشگاهی دارد و مشاهده می‌شود نتایج به‌دست آمده تطابق بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد.

۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله، براساس المان حجمی نمونه و با استفاده از المان تیر در تحلیل و ایجاد مدل سه‌بعدی از نانوکامپوزیت در مقیاس میکرو، چیدمان‌های مختلفی از نانولوله‌های کربنی در بستر اپوکسی ارائه شد. اثر پارامترهای درصد حجمی، نسبت منظری و موجی‌بودن نانولوله‌های کربنی بر مدول الاستیک موثر نانوکامپوزیت بررسی شد. مهم‌ترین مزیت مدل المان حجمی نمونه آن است که توانایی اعمال انواع خصوصیات نانولوله نظیر قطر، ضخامت دیواره، طول کامپوزیت، درصد حجمی و نسبت انحنای را برای شبیه‌سازی دارا می‌باشد. لذا در شکل ۱۳ که خصوصیات اعمال‌شده با خصوصیات واقعی نانوکامپوزیت تطابق خوبی دارد، بهترین تطابق با نتایج آزمایشگاهی دیده می‌شود. مزیت مهم دیگر این مدل این است که ویژگی‌های اعمال‌شده می‌توانند در شبیه‌سازی متغیر بوده و به‌صورت نامنظم در محدوده‌ای که در واقعیت وجود دارد انتخاب شوند. باید توجه

- [22] M. M. Shokrieh, S. M. Mahdavi, Micromechanical model to evaluate the effects of dimensions and interphase region on the elastic modulus of CNT/polymer composites, *Journal of Modares Mechanical Engineering*, Vol.11, No.3, 2011, pp. 13-25.(In Persian)
- [23] 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, No. 12, 2006, pp. 2178-2185.
- [24] 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, No. 11, 2003, pp. 1689-1703.
- [25] 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", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, 2003, pp. 1705-1722.
- [26] Shao L. H., Luo R. Y., Baib S. L., Wang J., "Prediction of Effective Moduli of Carbon Nanotube-Reinforced Composites with Waviness and Debonding", *Composites Structure*, Vol. 87, No. 3, 2009, pp. 274-281.
- [27] 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 Composites", *J. Eng. Mater. Technol.*, Vol. 126, No. 250, 2004, pp. 205-257.
- [28] Gou J., Minaie B., Wang B., Liang Z., Zhang C., "Computational and Experimental Study of Interfacial Bonding of Single-Walled Nanotube Reinforced Composites", *Computational Materials Science*, Vol. 31, No. 3-4, 2004, pp. 225-236.
- [29] Zeng Q. H., Yu A. B., Lu G. Q., "Multiscale Modeling and Simulation of Polymer Nanocomposites", *Progress in Polymer Science*, Vol. 33, No. 2, 2008, pp. 191-269.
- [30] Fereidoon A., Rajabpour M., Hemmatian H., "Investigation of Elastic Moduli of Polypropylene Reinforced with Deformed Single Wall Carbon Nanotube Based on FEM", *PPS 2011 Asia/Australia Regional Meeting*, 15-17 Nov 2011- Paper No. 187.
- [31] Papanikos P., Nikolopoulos D. D., Tserpes K. I., "Equivalent Beams for Carbon Nanotubes", *Computational Materials Science*, Vol. 43, No. 2, 2008, pp. 345-352.
- [32] Lee U., Lee C., "Spectral Element Modeling for Extended Timoshenko Beams", *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 319, No. 3-5, 2009, pp. 993-1002.
- Composites Science and Technology*, Vol. 64, 2004, pp. 2303-2308.
- [10] Cox H. L., "The Elasticity and Strength of Paper and Other Fibrous Materials", *Brit. J. Appl. Phys.*, Vol. 3, 1952, pp. 72-9.
- [11] Meng-Kao Y., Nyan-Hwa T., Jia-Hau L., "Mechanical Behavior of Phenolic-Based Composites Reinforced with Multi-Walled Carbon Nanotubes", *Carbon*, Vol. 44, 2006, pp. 1-9.
- [12] Xiao K. Q., Zhang L. C., Zarudi I., "Mechanical and Rheological Properties of Carbon Nanotube-Reinforced Polyethylene Composites", *Composites Science and Technology*, Vol. 67, No. 2, 2007, pp. 177-182.
- [13] Odegard G. M., Gates T. S., Nicholson L. M., Wise K. E., "Equivalent-Continuum Modeling with Application to Carbon Nanotubes", *NASA/TM-2002-211454*.
- [14] Odegard G. M., Gates T. S., Wise K. E., Park C., Sioch E. J., "Constitutive Modeling of Nanotube-Reinforced Polymer Composites", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, 2003, pp. 1671-1687.
- [15] Song Y. S., Youn J. R., "Modeling of Effective Elastic Properties for Polymer Based Carbon Nanotube Composites", *Polymer*, Vol. 47, 2006, pp. 1741-1748.
- [16] Liu Y., Nishimura N., Otani Y., "Large-Scale Modeling of Carbon-Nanotube Composites by a Fast Multipole Boundary Element Method", *Computational Materials Science*, Vol. 34, 2005, pp. 173-187.
- [17] Haque A., Ramasetty A., "Theoretical Study of Stress Transfer in Carbon Nanotube Reinforced Polymer Matrix Composites", *Composite Structures*, Vol. 71, 2005, pp. 68-77.
- [18] Liu Y. J., Chen X. L., "Evaluations of the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites using a Nanoscale Representative Volume Element", *Mech. Mater.*, Vol. 35, No. 1-2, 2003, pp. 69-81.
- [19] Hu N., Fukunaga H., Lu C., Kameyama M., Yan B., "Prediction of Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites", *Proc. Roy. Soc. A. Math. Phys. Eng. Sci.*, Vol. 461, 2005, pp. 1685-1710.
- [20] Chen X. L., Liu Y. J., "Square Representative Volume Elements for Evaluating the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites", *Comput. Mater. Sci.*, Vol. 29, No. 1, 2004, pp. 1-11.
- [21] Selmi A., Friebe C., Doghri I., Hassis H., "Prediction of the Elastic Properties of Single Walled Carbon Nanotube Reinforced Polymers a Comparative Study of Several Micromechanical Models", *Composites Science and Technology*, Vol. 67, No. 10, 2007, pp. 2071-2084.

- [38] Liu Y. J., Chen X. L., "Continuum Models of Carbon Nanotube-Based Composites using the Boundary Element Method", *Journal of Boundary Elements*, Vol. 1, No. 2, 2003, pp. 316-335.
- [39] Thostenson E. T., Chou T. W., "On the Elastic Properties of Carbon Nanotube-Based Composites: Modeling and Characterization", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 36, No. 5, 2003, pp. 573-582.
- [40] Gojny F. H., Wichmann M. H. G., Fiedler B., Schulte K., "Influence of Different Carbon Nanotubes on the Mechanical Properties of Epoxy Matrix Composites-A Comparative Study", *Composites Science and Technology*, Vol. 65, 2005, pp. 2300-2313.
- [41] Mir M., Hosseini A., Majzoobi G. H., "A Numerical Study of Vibrational Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Computational Materials Science*, Vol. 43, 2008, pp. 540-548.
- [42] Kanagaraj S., Varanda F. R., Zhil'tsova T. V., Oliveira M. S. A., Simoes J. A. O., "Mechanical Properties of High Density Polyethylene/Carbon Nanotube Composites", *Composites Science and Technology*, Vol. 67, No. 15, 2007, pp. 3071-3077.
- [33] Tserpes K. I., Papanikos P., "Finite Element Modeling of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Compos. Part B*, Vol. 36, 2005, pp. 468-477.
- [34] Tserpes K. I., Papanikos P., Labeas G., Pantelakis S. G., "Multi-Scale Modeling of Tensile Behavior of Carbon Nanotube-Reinforced Composites", *Theor. Appl. Fract. Mech.*, Vol. 49, 2008, pp. 51-60.
- [35] Karimzadeh F., Ziaei-Rad S., Adibi S., "Modeling Considerations and Material Properties Evaluation in Analysis of Carbon Nano-Tubes Composite", *Metall Mater Trans B*, Vol. 38, 2007, pp. 695-705.
- [36] Ayatollahi M. R., Shadlou S., Shokrieh M. M., "Multiscale Modeling for Mechanical Properties of Carbon Nanotube Reinforced Nanocomposites Subjected to Different Types of Loading", *Composite Structures*, Vol. 93, 2006, pp. 2250-2259.
- [37] Kalamkarov A. L., Georgiades A. V., Rokkam S. K., Veedu V. P., Ghasemi-Nejhad M. N., "Analytical and Numerical Techniques to Predict Carbon Nanotubes Properties", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 43, 2006, pp. 6832-6854.