



دانشگاه شاهرود

دانشکده مهندسی مکانیک

پایان نامه کارشناسی ارشد  
گرایش طراحی کاربردی

عنوان

مدل سازی چندمقیاسه رفتار غیرخطی کامپوزیت های پلیمری تقویت شده با نانولوله کربنی تحت بارگذاری های مختلف

نگارش

سید ناصرالدین محسنی

استاد راهنمای اول:

دکتر محمد جعفری

استاد راهنمای دوم:

دکتر سید هادی قادری

شهریور ۱۳۹۴



دانشگاه صنعتی شاهرود

مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۶)

### باسمه تعالی

شماره:  
تاریخ:  
ویرایش:

### فرم صورت جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) نتیجه ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم / آقای ... سید ناصرالدین محسنی... رشته ... مهندسی مکانیک... گرایش ... طراحی کاربردی... تحت عنوان ... مدل سازی چندمقیاسه رفتار غیرخطی کامپوزیت های پلیمری تقویت شده با نانولوله کربنی تحت بارگذاری های مختلف... که در تاریخ ... ۱۳۹۴/۶/۲۳... با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

<input type="checkbox"/> مردود	<input type="checkbox"/> دفاع مجدد	<input checked="" type="checkbox"/> امتیاز (۱۹,۲۵)	قبول ( با درجه : عالی )
--------------------------------	------------------------------------	--	-------------------------

۲- بسیار خوب ( ۱۸ - ۱۸/۹۹ )

۱- عالی ( ۱۹ - ۲۰ )

۴- قابل قبول ( ۱۴ - ۱۵/۹۹ )

۳- خوب ( ۱۶ - ۱۷/۹۹ )

۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

امضاء	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیأت داوران
	استادیار	دکتر محمد جعفری	۱- استاد راهنما
	استادیار	دکتر سید هادی قادری	۲- استاد راهنما
	استادیار	دکتر مهدی گردویی	۳- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی
	استادیار	دکتر سید وحید حسینی	۴- استاد ممتحن
	استادیار	دکتر محمدباقر نظری	۵- استاد ممتحن

رئیس دانشکده: امضاء



تقدیم نامہ

**تقدیم بہ روان پاک پدر،**

**و داستان فداکار و مہربان مادر**

## سپاس‌گزاری

کمال سپاس‌گزاری خود را از جناب آقای دکتر سید هادی قادری اعلام می‌دارم؛ بدون تلاش‌های بی‌وقفه، راهنمایی‌های اثربخش و دقت‌نظر ایشان، انجام این پایان‌نامه امکان‌پذیر نبوده‌است.

از جناب آقای دکتر محمد جعفری نیز بسیار سپاس‌گزارم، مشورت‌های ایشان همواره چراغ راه بوده‌است.

با آرزوی سلامتی و کامیابی روزافزون برای این دو استاد عزیز و گرامی.

## تعهدنامه

اینجانب سید ناصرالدین محسنی دانشجوی دوره‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی مهندسی مکانیک - طراحی کاربردی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه شاهرود نویسنده‌ی پایان‌نامه‌ی مدل‌سازی چند-مقیاسه رفتار غیرخطی کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله کربنی تحت بارگذاری‌های مختلف، تحت راهنمایی استادان دکتر محمد جعفری و دکتر سید هادی قادری متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام‌شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان‌نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام «دانشگاه شاهرود» و یا «Shahrood University» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان‌نامه تأثیرگذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه‌ی مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آن‌ها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه‌ی مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه‌ی اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

### تاریخ

### امضای دانشجو

#### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه‌ی حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان‌نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

## چکیده

در این پژوهش یک مدل چندمقیاسه‌ی جدید برای تعیین رفتار غیرخطی کامپوزیت پلیمر/نانولوله‌ی کربنی پیشنهاد می‌گردد. نانولوله‌ی کربنی در مقیاس اتمی و بر اساس مکانیک ساختاری مولکولی اصلاح‌شده، و با استفاده از المان‌های تیر سه‌بعدی با مقطع عمومی مدل شد. المان تیر با مقطع عمومی سبب تمیزیافتن سفتی‌های خمشی درون‌صفحه‌ای و برون‌صفحه‌ای می‌گردد، به‌طوری‌که در این حالت، هندسه‌ی مقطع تیر و تعریف ماده‌ی آن، ترکیب می‌گردند. پتانسیل بین‌اتمی مورس اصلاح‌شده به‌منظور تعریف برهم‌کنش‌های اتمی در نانولوله‌ها، استفاده گشت. تعدادی از نانولوله‌های آرمچیر همراه با نانولوله‌های زیگزاگ هم‌قطرشان، تحت بارگذاری‌های کششی، پیچشی و خمشی قرار گرفتند تا خواص مکانیکی آنها در این شرایط بارگذاری حاصل شوند. مدول یانگ و نسبت پواسون، مدول برشی، و مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌ها، به‌ترتیب از شرایط بارگذاری کششی، پیچشی، و خمشی، محاسبه شدند. نتایج به‌دست‌آمده با نتایج موجود در ادبیات موضوع مقایسه شدند، که توافق خوبی را نشان دادند. پلیمر به‌صورت محیطی پیوسته در نظر گرفته شد، و مدل اجزای محدود سه‌بعدی آن با استفاده از المان‌های توپر و با در نظر گرفتن رفتار الاستوپلاستیک آن، ایجاد گشت. با استفاده از مدل‌سازی چندمقیاسه، المان حجمی نماینده از طریق جایگذاری نانولوله درون مدل پلیمر ایجاد شد. برهم‌کنش میان نانولوله و پلیمر اطراف آن به‌صورت نیروهای وان‌دروالس، تعریف‌شده توسط رابطه‌ی لنارد-جونز، در نظر گرفته شد، که با استفاده از المان‌های رابط غیرخطی در اباکس مدل شدند. المان حجمی نماینده در شرایط بارگذاری کششی، پیچشی و خمشی قرار گرفت تا ویژگی‌های مکانیکی آن استخراج گردد. مدول یانگ، مدول برشی، و مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت، به‌ترتیب در شرایط بارگذاری کششی، پیچشی، و خمشی، محاسبه شده و تغییرات آنها نسبت به جزءهای حجمی مختلف نانولوله بررسی شدند. منحنی‌های تنش-کرنش حاصل از بارگذاری‌های کششی، پیچشی، و خمشی ارائه شدند. نتایج به‌دست‌آمده، بر بهبود چشمگیر ویژگی‌های مکانیکی نانوکامپوزیت نسبت به پلیمر خالص، اشاره نمودند.

## واژگان کلیدی:

نانولوله‌های کربنی، نانوکامپوزیت پایه‌پلیمری، مدل‌سازی چندمقیاسه، تحلیل اجزای محدود، المان حجمی نماینده

## فهرست عنوان‌ها

ب	تقدیم‌نامه.....
ت	سیاس‌گزاری.....
ث	چکیده.....
ج	فهرست عنوان‌ها.....
خ	فهرست شکل‌ها.....
ز	فهرست جدول‌ها.....
س	فهرست نشانه‌ها.....
۱	فصل ۱ مقدمه.....
۱-۱	۱-۱- مقدمه.....
۳	۲-۱- نانولوله‌های کربنی.....
۶	۱-۲-۱- خواص نانولوله‌های کربنی.....
۸	۲-۲-۱- کاربرد نانولوله‌های کربنی.....
۱۰	۳-۱- کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی.....
۱۲	۱-۳-۱- خواص کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی.....
۱۴	۲-۳-۱- کاربردهایی برای کامپوزیت با فاز تقویت نانولوله‌های کربنی.....
۱۵	۴-۱- پیشینه‌ی پژوهش.....
۲۱	۵-۱- ساختار پایان‌نامه.....
۲۳	فصل ۲ روش شبیه‌سازی.....
۲۵	۱-۲- مدل تصحیح‌شده‌ی مکانیک ساختاری مولکولی.....
۲۹	۲-۲- مدل‌سازی پیوسته نانومقیاس از نانولوله‌های کربنی.....
۳۵	۳-۲- مدل‌سازی پیوسته از پلیمر.....
۳۹	۴-۲- مدل‌سازی پیوسته نانومقیاس از فصل‌مشترک.....
۴۳	فصل ۳ نتایج.....

۴۳	..... نانولوله‌های کربنی	۳-۱-۱
۴۳	..... کشش محوری	۳-۱-۱-۱
۴۹	..... پیچش	۳-۱-۲
۵۳	..... خمش	۳-۱-۳
۵۵	..... نانوکامپوزیت پایه پلیمری	۳-۲
۵۶	..... کشش محوری	۳-۲-۱
۶۵	..... پیچش	۳-۲-۲
۷۱	..... خمش	۳-۲-۳

## فصل ۴ نتیجه‌گیری و پیشنهادهایی برای پژوهش‌های آتی..... ۷۹

۷۹	..... نتیجه‌گیری	۴-۱
۸۰	..... پیشنهادهایی برای پژوهش‌های آتی	۴-۲

## مراجع..... ۸۱



## فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱ اصطلاحات مربوط به نانولوله‌ی کربنی. .... ۴
- شکل ۱-۲ نانولوله‌ی آرمچیر تحت بارگذاری کششی با تغییرشکل استون-ویلز. .... ۵
- شکل ۱-۳ نانولوله‌های الف (دست‌سان، ب) زیگزاگ و پ) آرمچیر. .... ۵
- شکل ۱-۴ تست کشش یک نانولوله‌ی کربنی چنددیواره. الف) تصویر میکروسکوپ الکترونی از نگهداشتن یک نانولوله‌ی کربنی چنددیواره توسط دو سر میکروسکوپ نیروی اتمی. ب) تصویر بزرگ‌شده‌ی ناحیه‌ی مشخص‌شده در بخش الف، نمایش نانولوله‌ی کربنی چنددیواره میان دو سر میکروسکوپ نیروی اتمی. پ) نمایش پیوستگی نانولوله‌ی کربنی چنددیواره روی سر بالای میکروسکوپ نیروی اتمی. ت) نمایش پیوستگی نانولوله‌ی کربنی چنددیواره روی سر پایین میکروسکوپ نیروی اتمی. .... ۸
- شکل ۱-۵ الف) استفاده از محافظ تخلیه‌ی الکتریسیته‌ی ساکن ساخته‌شده از نانولوله‌های کربنی در فضاپیمای جونو، مأمور کاوش سیاره‌ی مشتری. ب) دوچرخه‌ی برنده‌ی مسابقه‌ی توردوفرانس، ساخته‌شده از کامپوزیت با فاز تقویت نانولوله‌های کربنی. پ) نسل جدید راکت‌های تنیس با بهره‌مندی از نانولوله‌های کربنی، با سفتی و استحکام بیشتر همراه با وزن کمتر و واکنش‌پذیری بالاتر. .... ۹
- شکل ۲-۱ برهم‌کنش‌های بین‌اتمی. .... ۲۶
- شکل ۲-۲ محوره‌های راست‌گرد محلی ( $t, n_1, n_2$ ) بر روی المان تیر. .... ۲۸
- شکل ۲-۳ منحنی نیرو-کرنش پیوند کربن-کربن تحت بارگذاری نیروی محوری، به‌دست‌آمده از پتانسیل مورس اصلاح‌شده. .... ۳۲
- شکل ۲-۴ منحنی گشتاور-تغییر زاویه پیوند کربن-کربن تحت بارگذاری خمشی، به‌دست‌آمده از پتانسیل مورس اصلاح‌شده. .... ۳۲
- شکل ۲-۵ مدل اجزای محدود نانولوله‌های الف) آرمچیر (۸، ۸)، و ب) زیگزاگ (۱۴، ۰). .... ۳۴
- شکل ۲-۶ منحنی تنش-کرنش پلاستیک پلی‌پروپیلن. .... ۳۶
- شکل ۲-۷ مدل اجزای محدود نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵). .... ۳۸
- شکل ۲-۸ مدل اجزای محدود پلیمر، ایجادشده برای کسب جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵). .... ۳۸
- شکل ۲-۹ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵). .... ۳۹

- شکل ۲-۱۰ نمودار نیروی وان دروالس برحسب فاصله‌ی بین‌اتمی. .... ۴۰
- شکل ۲-۱۱ نمایش المان‌های وان دروالس ایجادشده میان گره‌های سطح داخلی پلیمر و اتم‌های کربن نانولوله، در مدل المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵). .... ۴۱
- شکل ۳-۱ نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $1/47 \text{ nm}$ . .... ۴۵
- شکل ۳-۲ نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۶، ۰) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $1/55 \text{ nm}$ . .... ۴۵
- شکل ۳-۳ منحنی‌های تنش-کرنش نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) و نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۶، ۰) در بارگذاری کشش محوری. .... ۴۶
- شکل ۳-۴ نمودار تغییرات مدول یانگ نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها. .... ۴۶
- شکل ۳-۵ نمودار تغییرات نسبت پواسون نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها. .... ۴۸
- شکل ۳-۶ نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵) الف) پیش، و ب) پس از اعمال پیچش به میزان  $57/3^\circ$ . .... ۵۰
- شکل ۳-۷ منحنی تنش برشی-کرنش برشی نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵) در بارگذاری پیچشی. .... ۵۰
- شکل ۳-۸ نمودار تغییرات مدول برشی نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها. .... ۵۱
- شکل ۳-۹ نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶) الف) پیش، و ب) پس از اعمال خمش به میزان  $14/72^\circ$ . .... ۵۴
- شکل ۳-۱۰ منحنی تنش خمشی-کرنش خمشی مربوط به نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶) تحت بارگذاری خمشی. .... ۵۴
- شکل ۳-۱۱ نمودار تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها. .... ۵۵
- شکل ۳-۱۲ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $0/79 \text{ nm}$ . .... ۵۸
- شکل ۳-۱۳ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $1/05 \text{ nm}$ . .... ۵۸
- شکل ۳-۱۴ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $0/78 \text{ nm}$ . .... ۵۹
- شکل ۳-۱۵ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $1/1 \text{ nm}$ . .... ۵۹

شکل ۳-۱۶ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۱/۱ nm. ۶۰.....

شکل ۳-۱۷ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۰/۸۶ nm. ۶۰.....

شکل ۳-۱۸ منحنی‌های تنش-کرنش برای کشش المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰)، در جزء‌های حجمی مختلف نانولوله. ۶۱.....

شکل ۳-۱۹ منحنی‌های تنش-کرنش برای کشش المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، در جزء‌های حجمی مختلف نانولوله. ۶۱.....

شکل ۳-۲۰ مقایسه‌ی منحنی‌های تنش-کرنش برای کشش المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸) و نیز حاوی نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰)، در جزء‌های حجمی مختلف نانولوله. ۶۲.....

شکل ۳-۲۱ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۶۳.....

شکل ۳-۲۲ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۵٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۶۳.....

شکل ۳-۲۳ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱۰٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۶۴.....

شکل ۳-۲۴ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰، ۰)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال پیچش به میزان  $44/47^\circ$ . ۶۷.....

شکل ۳-۲۵ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال پیچش به میزان  $75/55^\circ$ . ۶۷.....

شکل ۳-۲۶ منحنی‌های تنش برشی-کرنش برشی حاصل از بارگذاری پیچشی دو المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌های آرمچیر (۶، ۶) و زیگزاگ (۱۰، ۰)، با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ها. ۶۸.....

شکل ۳-۲۷ منحنی‌های تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۶۸.....

- شکل ۳-۲۸ منحنی‌های تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۰.۵٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۶۹.....
- شکل ۳-۲۹ منحنی‌های تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۰.۱۰٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۶۹.....
- شکل ۳-۳۰ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال خمش به میزان  $82^{\circ}/8$ . ۷۲.....
- شکل ۳-۳۱ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۰.۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال خمش به میزان  $63^{\circ}/9$ . ۷۲.....
- شکل ۳-۳۲ منحنی تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ها. ۷۳.....
- شکل ۳-۳۳ منحنی تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، با جزء حجمی ۰.۵٪ از نانولوله‌ها. ۷۳.....
- شکل ۳-۳۴ منحنی‌های تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی دو المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، با جزء‌های حجمی ۰.۱ و ۰.۵٪ از نانولوله‌ها. ۷۴.....
- شکل ۳-۳۵ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۰.۱٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۷۵.....
- شکل ۳-۳۶ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۰.۵٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۷۵.....
- شکل ۳-۳۷ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۰.۱۰٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ. ۷۶.....

## فهرست جدول‌ها

- جدول ۱-۱ ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی [۱۳]..... ۱۳
- جدول ۱-۲ پارامترهای پتانسیل مورس اصلاح‌شده [۶۰]..... ۳۰
- جدول ۲-۲ سفتی‌های خمش برون‌صفحه‌ای و پیچش [۶۶ و ۶۵]..... ۳۳
- جدول ۳-۲ پارامترهای مورد نیاز برای توصیف رفتار الاستوپلاستیک پلی‌پروپیلن [۶۷]..... ۳۶
- جدول ۱-۳ مقایسه‌ی مدول یانگ و مدول برشی نانولوله‌های آرمچیر (۹، ۹) و زیگزاگ (۰، ۱۶) با نتایج دیگر، موجود در مراجع..... ۵۲
- جدول ۲-۳ مدول یانگ نانوکامپوزیت، در جزءهای حجمی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪ از نانولوله‌های تقویت‌کننده مختلف..... ۶۵
- جدول ۳-۳ مدول برشی نانوکامپوزیت، در جزءهای حجمی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪ از نانولوله‌های تقویت‌کننده مختلف..... ۷۰
- جدول ۴-۳ مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت، در جزءهای حجمی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪ از نانولوله‌های تقویت‌کننده مختلف..... ۷۷

## فهرست نشانه‌ها

$E_{\psi}$	برهم‌کنش ناشی از خمش برون صفحه‌ای	$A_{CNT}$	سطح مقطع نانولوله
$E_{\varphi}$	برهم‌کنش ناشی از پیچش	$A_{RVE}$	سطح مقطع المان حجمی نماینده
$F$	نیرو	$a_{c-c}$	طول پیوند کربن-کربن
$F_{vdw}$	نیروی وان دروالس	$\vec{C}_h$	برداری دست‌سان
$G_{CNT}$	مدول برشی نانولوله	$d_{CNT}$	قطر نانولوله‌ی کربنی
$G_{RVE}$	مدول برشی نانوکامپوزیت	$D_e$	انرژی گسستگی
$h$	شاخص استحکام	$E$	پتانسیل بین‌اتمی مورس اصلاح شده
$I_{CNT}$	ممان اینرسی سطح مقطع نانولوله		قسمت خمش پتانسیل بین‌اتمی مورس اصلاح- شده
	ممان اینرسی سطح مقطع المان حجمی	$E_b$	
$I_{RVE}$	نماینده	$E_{CNT}$	مدول یانگ نانولوله
$J_{CNT}$	ممان اینرسی قطبی سطح مقطع نانولوله	$E_{CNT,ben}$	مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله
	ممان اینرسی قطبی سطح مقطع المان حجمی	$E_{LJ}$	پتانسیل لنارد-جونز
$J_{RVE}$	نماینده	$E_r$	برهم‌کنش ناشی از تغییر طول پیوند
$k_I$	سفتی در خمش برون صفحه‌ای	$E_{RVE}$	مدول یانگ نانوکامپوزیت
$k_T$	سفتی در پیچش		مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت
$k_{\theta}$	سفتی در خمش	$E_{RVE,ben}$	
$L_{CNT}$	طول ابتدایی نانولوله		قسمت تغییر طول پیوند پتانسیل بین‌اتمی مورس اصلاح شده
$L_{RVE}$	طول ابتدایی المان حجمی نماینده	$E_s$	
$M$	گشتاور	$E_t$	پتانسیل بین‌اتمی
$n$	نمای سخت‌شوندگی	$E_{\theta}$	برهم‌کنش ناشی از خمش درون صفحه‌ای

$\varepsilon_b$	کرنش خمشی	$r$	فاصله‌ی میان اتم‌های کربن
$\varepsilon_p$	کرنش پلاستیک	$r_{CNT}$	شعاع نانولوله
$\gamma$	کرنش برشی	$r_{i,CNT}$	شعاع داخلی نانولوله
$\sigma$	تنش	$R_{o,RVE}$	شعاع بیرونی پلیمر
$\sigma_b$	تنش خمشی	$r_0$	طول تعادلی پیوند
$\sigma_y$	تنش تسلیم	$r_{o,CNT}$	شعاع بیرونی نانولوله
$\tau$	تنش برشی	$T$	گشتاور پیچشی
$\mu$	عمق چاه پتانسیل	$u$	جاب‌جایی
$\psi$	شعاع کره‌ی سخت اتم		مقدار دوران حول محور ۱ (محور سطح مقطع)
$\theta$	زاویه‌ی دست‌سان	$u_{r1}$	
$\theta_0$	زاویه‌ی تعادلی پیوند با پیوند مجاور	$u_{r2}$	مقدار دوران حول محور ۲ (محور اصلی)
$\Delta\psi$	تغییر زاویه‌ی پیوند در خمش برون‌صفحه‌ای	$V_f$	جزء حجمی نانولوله
$\Delta\varphi$	تغییر زاویه‌ی پیچش پیوند	$\varepsilon$	کرنش حقیقی





## فصل ۱ مقدمه

### ۱-۱- مقدمه

در چند دهه‌ی گذشته استفاده از کامپوزیت‌ها در اجزای گوناگون طراحی، به سرعت افزایش یافته‌است و اکنون آنها به دلیل خواص فیزیکی ممتاز، به تدریج جایگزین مواد فلزی مرسوم می‌شوند. کامپوزیت‌ها به دسته‌ای از مواد متعلق هستند که حداقل متشکل از دو جزء مختلف بوده و در روشی با هم آمیخته شده تا خواص ماده تولیدشده تا حد زیادی با خواص اجزای تشکیل‌دهنده‌ی آن متفاوت باشد. یکی از اجزای تشکیل‌دهنده، فاز پیوسته<sup>۱</sup> را تشکیل می‌دهد که زمینه<sup>۲</sup> خوانده می‌شود حال آنکه جزء یا اجزای دیگر، فاز ناپیوسته<sup>۳</sup>، که به صورت یکنواخت در زمینه پخش شده‌اند، فاز تقویت<sup>۴</sup> خوانده می‌شوند. فاز تقویت به‌عنوان ماده پُرکننده نیز شناخته می‌شود که می‌تواند به صورت فیبرها یا ذره‌ها باشد. ماده پُرکننده با خواص فیزیکی به‌خصوص خود، کامپوزیت را تقویت می‌نماید درحالی‌که نقش زمینه نگهداشتن مواد پُرکننده با یکدیگر است. کامپوزیت‌ها علاوه بر نسبت مقاومت به وزن بالا، مزیت‌های فراوان دیگری در مقایسه با مواد مهندسی مرسوم دارند؛ مانند مقاومت به خوردگی بالا، چگالی پایین، انبساط حرارتی پایین و عمر خستگی مطلوب.

---

<sup>۱</sup> Continuous phase

<sup>۲</sup> Matrix

<sup>۳</sup> Discontinuous phase

<sup>۴</sup> Reinforcement phase

مزیت مهم دیگری که کامپوزیت‌ها دارند، توانایی داشتن خواص فیزیکی مناسب در یک جهت مشخص است که به سبب آن، انعطاف‌پذیری فوق‌العاده‌ای در طراحی تأمین می‌گردد. با توجه به افزایش نیاز به مواد سبک دارای خواص فیزیکی ممتاز، استفاده از کامپوزیت‌ها روند رو به رشدی به خود گرفته‌است. امروزه بیشتر مواد کامپوزیتی مورد استفاده به دلیل وزن پایین و سهولت در ساخت، از پلیمرها به‌عنوان زمینه استفاده می‌نمایند. با افزایش استفاده از کامپوزیت‌ها، نیاز به تولید مواد کامپوزیتی جدیدتری که سبک‌تر و بادوام‌تر باشند نیز افزایش می‌یافت. با پیشرفت‌های نوین در علم مواد، مواد گوناگون جدیدی شناسایی شدند که دارای این پتانسیل می‌باشند که به‌عنوان فاز تقویت‌کننده در تولید مواد کامپوزیتی پیشرفته با پلیمرها به‌عنوان زمینه، مورد استفاده قرار گیرند. امیدبخش‌ترین از میان این دسته از مواد، نانولوله‌های کربنی می‌باشند.

ویژگی‌های چشمگیر نانولوله‌های کربنی سبب شد که آنها برای کاربردهای گوناگون، بسیار جلب توجه نمایند. امروزه، فن‌آوری نانو به دلیل توان به‌کارگیری بالا در علم و صنعت، توجه زیادی را به خود جلب نموده‌است و به‌خاطر ابعاد نانو، مدل‌های طراحی نو و خصوصیات بهبودیافته‌ای ارائه می‌نماید. پس از کشف فلورن (C60) در سال ۱۹۸۵ و نانولوله‌های کربنی در سال ۱۹۹۱، علاقه به فن‌آوری نانو با گواه مقاله‌های علمی منتشرشده در این زمینه، به‌صورت چشمگیری افزایش یافت. برای نمونه بین سال‌های ۲۰۰۸ تا ۲۰۱۱، بیش از ۱۴۰۰۰ مقاله علمی درباره‌ی نانولوله‌های کربنی منتشر شدند. شناسایی خواص فیزیکی ممتاز آنها موضوع بسیاری از این مطالعات بوده‌است. با درک ارزش استفاده از آنها به‌عنوان فاز تقویت‌کننده در کامپوزیت‌های پایه پلیمری، مقدار قابل توجهی از پژوهش‌ها به بهره‌برداری از خواص نانولوله‌ها برای تولید کامپوزیت‌های ممتاز اختصاص یافته‌اند، به طوری که یک باور گسترده ایجاد گشته که کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی می‌توانند به‌میزان زیادی در زمینه‌ی خواص فیزیکی و کارایی در محیط‌های گوناگون، از کامپوزیت‌های متداول، کاراتر، مؤثرتر و بااهمیت‌تر باشند. با شناخت پتانسیل استفاده از نانولوله‌ها به‌عنوان فاز تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت‌ها، نیاز به کشف خواص مکانیکی آنها، سبب جلب توجه پژوهش‌گران زیادی به این مسأله شده‌است. هزینه بالای تولید نانولوله‌های کربنی، ساخت نمونه‌های نانوکامپوزیتی و استخراج خواص مکانیکی آنها را محدود کرده‌است. بنابراین پیش‌بینی خواص با استفاده از روش‌های تحلیلی و مدل‌سازی عددی بیشتر مورد توجه قرار گرفته‌است.

در ادامه، نانولوله‌های کربنی و کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌ها، خواص و کاربرد مربوط به هرکدام از آنها بیان می‌گردند. در انتهای فصل نیز، به مرور ادبیات مربوط به موضوع پژوهش پرداخته می‌شود.

## ۱-۲- نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی را می‌توان به صورت صفحاتی از گرافن فرض نمود که به دور یک استوانه پیچیده شده باشند. اگر تنها یک صفحه‌ی گرافن را به دور استوانه بپیچانیم شکل حاصل یک نانولوله‌ی تک‌دیواره خواهد بود و اگر چندین صفحه‌ی گرافن را به دور استوانه بپیچانیم نانولوله‌ی چنددیواره خواهیم داشت. درحقیقت یک نانولوله چنددیواره شامل تعدادی نانولوله تک‌دیواره است که به صورت استوانه‌های توخالی هم‌محور مرتب شده‌اند و توسط نیروهای وان‌دروالس<sup>۱</sup> بین‌لایه‌ای کنار هم جای می‌گیرند. جدایی میان لایه‌ها حدود ۰/۳۴ nm است که بسیار نزدیک به فاصله‌ی بین‌لایه‌ای در گرافیت است. نانولوله‌های کربنی دارای حالت کشسانی و مقاومت استثنائی همراه با رسانایی الکتریکی و حرارتی بالا می‌باشند. خواص فیزیکی فوق‌العاده‌ی آنها نتیجه‌ی ساختار کامل و بی‌عیب آنهاست. در بیشتر مواد، خواص مشاهده شده واقعی آنها در عمل به صورت قابل ملاحظه‌ای کمتر از آن مقداری است که به صورت تئوری می‌تواند تخمین زده شود. این اختلاف به دلیل وجود نقص‌هایی در ساختار مواد رخ می‌دهد. برای نمونه، مقاومت بریدگی فولاد حدود ۰/۱٪ کمتر از مقاومت بریدگی تئوری آن است، که این امر به دلیل وجود نقص‌هایی در ساختار میکروی آن می‌باشد. اما بی‌عیبی مولکولی در ساختار نانولوله‌های کربنی سبب می‌شود که آنها اغلب عاری از نقص بوده و از این رو خواص فیزیکی آنها بسیار نزدیک به خواص فیزیکی پیش‌بینی‌شده‌ی آنها از طریق تئوری، باشد. بنابراین مقاومت و رسانایی الکتریکی و گرمایی بالای آنها به وسیله‌ی در نظر گرفتن ساختار فیزیکی آنها، قابل شرح و تفسیر می‌باشند. سفتی و مقاومت بالای نانولوله‌ها به دلیل ساختار پیوند آنهاست. هیچ ماده‌ی دیگری در جدول تناوبی، در یک شبکه‌ی گسترده و با مقاومت پیوند کربن-کربن، با خودش پیوند ندارد. این موارد همراه با ساختار بدون‌درز آنها، مقاومت شگفت‌انگیزی به آنها می‌بخشد.

خواص نانولوله‌های منفرد به ساختار اتمی، قطر، طول و شکل آنها بستگی دارد. آرایش اتمی در یک نانولوله، تا حد زیادی خواص فیزیکی آنرا مشخص می‌نماید. ساختار اتمی برحسب دست‌سازنی<sup>۲</sup> نانولوله که توسط بردار دست‌سان<sup>۳</sup>،  $\vec{C}_h$ ، تعریف می‌شود و نیز زاویه دست‌سان،  $\theta$ ، توصیف می‌گردد. بردار دست‌سان، برداریست که دو اتم کربن معادل از لحاظ کریستالی در شبکه‌بندی شش‌ضلعی، که دیواره‌های لوله را شکل می‌دهد، را به-

<sup>۱</sup> Van der Waals forces

<sup>۲</sup> Chirality

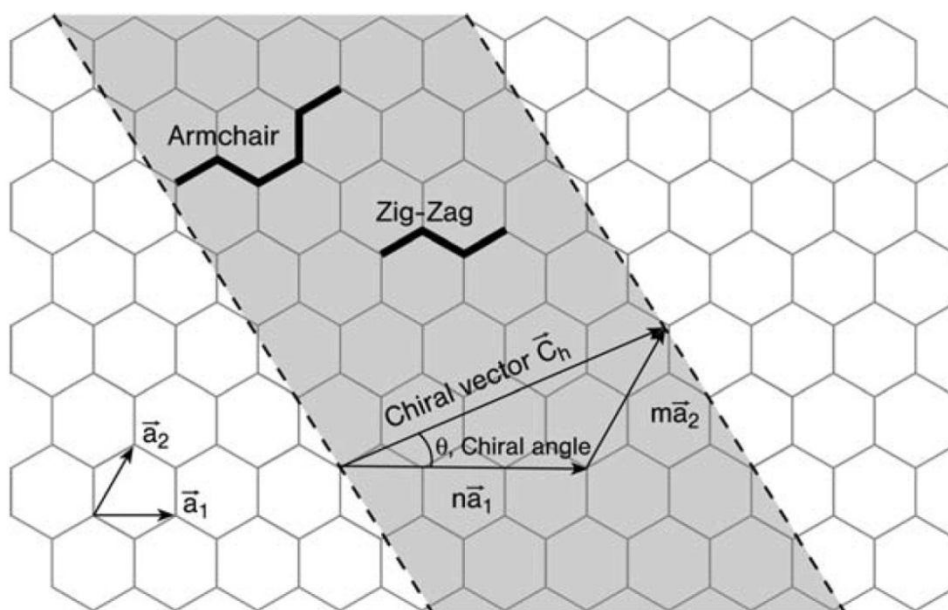
<sup>۳</sup> Chiral

هم متصل می‌نماید. شکل ۱-۱ را در نظر بگیرید؛ می‌توانیم تصور کنیم که صفحه‌ی گرافن را در امتداد خطوط نقطه‌چین ببریم و سپس بیچانیم تا یک لوله‌ی بدون درز را شکل دهد. بردار دست‌سان هم بدین صورت تعریف می‌شود که زمانی که صفحه بیچانده می‌شود، نوک بردار دست‌سان، دم این بردار را لمس می‌نماید.

این بردار برحسب اندیس‌های انتقال  $(n, m)$  و بردارهای مبنای  $\mathbf{a}_1$  و  $\mathbf{a}_2$  به صورت رابطه ۱-۱ تعریف می‌گردد.

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

اعداد  $n$  و  $m$  در کنار هم یک نام یکتا را برای نانولوله تشکیل می‌دهند؛ نانولوله‌ها با اندیس‌هایی به شکل  $(n, 0)$  پیوندهای کربن-کربنی را دارا هستند که موازی محور لوله هستند و در یک انتهای باز یک الگوی زیگزاگ را می‌سازند و بنابراین نانولوله‌های زیگزاگ نامیده می‌شوند. نانولوله‌ها با اندیس‌هایی به شکل  $(n, n)$  پیوندهای کربن-کربنی را دارا هستند که عمود بر محور لوله هستند و نانولوله‌های آرمچیر نامیده می‌شوند.



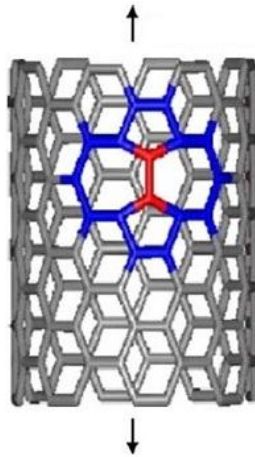
شکل ۱-۱ اصطلاحات مربوط به نانولوله‌ی کربنی.

تمامی نانولوله‌های دیگر با اندیس‌هایی به شکل  $(n, m)$  که  $n$  و  $m$  مساوی نباشند، نانولوله‌های دست‌سان نامیده می‌شوند که سمت راست و چپ متفاوتی دارند. زاویه دست‌سان که در شکل ۱-۱ نشان داده شده، میزان چرخش در نانولوله را مشخص می‌نماید. محدوده‌ی زاویه دست‌سان بین  $0^\circ$  در حالت زیگزاگ، و  $30^\circ$  در حالت آرمچیر، تغییر می‌نماید.

در حالت کلی، قطر نانولوله‌ی کربنی  $(n, m)$ ،  $d_{\text{CNT}}$ ، با استفاده از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

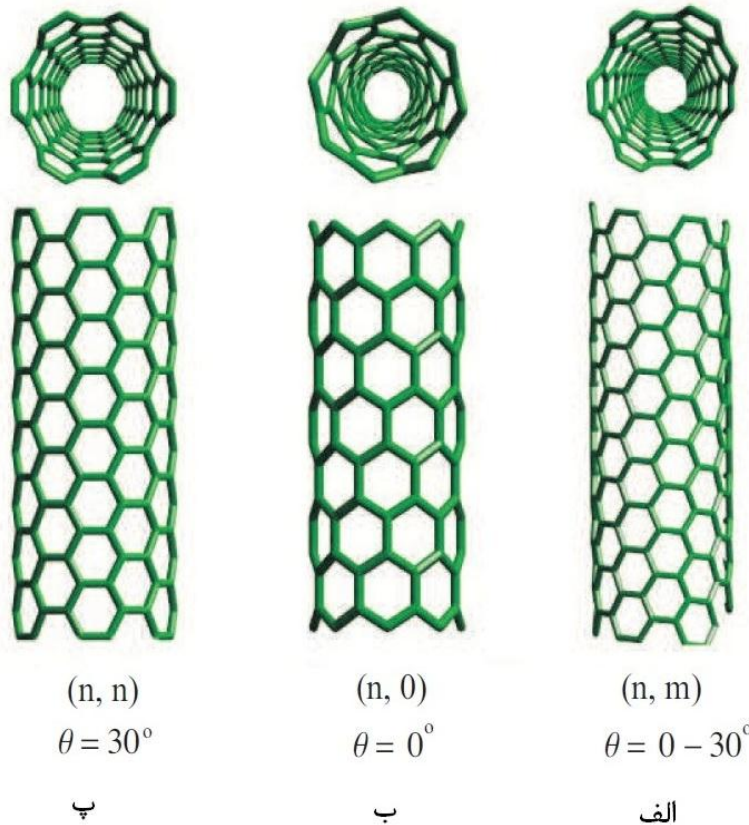
$$d_{\text{CNT}} = \frac{\sqrt{3} a_{\text{C-C}} \sqrt{n^2 + mn + m^2}}{\pi} \quad 2-1$$

که در این رابطه،  $a_{c-c}$  طول پیوند کربن-کربن در نانولوله می‌باشد. نانولوله‌های آرمچیر تحت بارگذاری کششی متحمل تغییری در ساختار می‌شوند، به‌صورتی که ساختار چهار شش‌ضلعی به ساختاری دارای دو پنج‌ضلعی و دو هفت‌ضلعی تغییر می‌نماید، که به تغییر شکل استون-ویلز<sup>۱</sup> شناخته می‌شود و کشف شده که نقشی کلیدی در تغییر شکل پلاستیک نانولوله‌ها تحت بارگذاری کششی بازی می‌نماید. شکل ۱-۲ نقص استون-ویلز را در ساختار یک نانولوله نشان می‌دهد، که به صورت آرایش مجدد ساختار شش‌ضلعی به دو جفت پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی است.



شکل ۱-۲ نانولوله‌ی آرمچیر تحت بارگذاری کششی با تغییر شکل استون-ویلز.

شکل ۱-۳ سه نوع مختلف معرفی‌شده‌ی نانولوله‌ها همراه با زاویه دست‌سان مربوط به آنها را نشان می‌دهد.



<sup>۱</sup> Stone-Wales

شکل ۱-۳ نانولوله‌های الف) دست‌سان، ب) زیگزآگ و پ) آرمچیر.

### ۱-۲-۱ خواص نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی به چهار دلیل ذیل، موادی جالب توجه در مقیاس نانو می‌باشند:

۱. نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره و چنددیواره خواص کشسانی بسیار خوبی دارند، زیرا آرایش دوبعدی اتم‌های کربن در یک صفحه‌ی گرافن، اجازه اعوجاج‌های برون‌صفحه‌ای<sup>۱</sup> بزرگ را می‌دهد، درحالی‌که، استحکام درون‌صفحه‌ای پیوندهای کربن-کربن، صفحه‌ی گرافن را به‌صورت استثنائی در برابر هرگونه اعوجاج درون‌صفحه‌ای<sup>۲</sup> یا شکست<sup>۳</sup>، مقاوم می‌سازد.

۲. نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره می‌توانند رسانا و یا نیمه‌رسانا باشند، که به بردار دست‌سان آنها بستگی دارد. اندازه‌ی بسیار کوچک و ساختار متقارن آنها، اجازه‌ی اثرات کوانتومی قابل توجه و خواص الکترونیکی شگفت‌آور، را به آنها می‌دهد.

۳. نانولوله‌های کربنی، موادی با نسبت منظری<sup>۴</sup> بالا هستند که دارای ویژگی‌های مکانیکی، حرارتی و مغناطیسی خوبی می‌باشند. قابلیت هدایت حرارتی نانولوله‌ها، بسیار بالا بوده، به‌طوری‌که مشخص شد که قابلیت هدایت حرارتی آنها بسیار بالاتر از گرافیت است [۱].

۴. چون نانولوله‌های کربنی، توخالی و لوله‌ای شکل هستند، آنها به‌عنوان مواد سبک و با مساحت بالا برای ذخیره‌سازی گاز، تجهیزات ذخیره‌سازی سوخت هیدروکربن و تجهیزات پالایش گازها و مایعات، پیشنهاد شده‌اند.

اکنون شرح مختصری از خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی ارائه می‌گردد. به‌منظور دسترسی به جزئیات بیشتر و توصیف جامع‌تر، مطالعه‌ی این منابع پیشنهاد می‌شود [۲، ۳، ۴، ۵ و ۶].

خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی، به‌شدت به ساختار آنها وابسته می‌باشد، که این به‌دلیل ناهمسانگردی<sup>۵</sup> گرافن است.

<sup>۱</sup> out-of-plane distortions

<sup>۲</sup> in-plane distortion

<sup>۳</sup> Fracture

<sup>۴</sup> Aspect ratio

<sup>۵</sup> Anisotropy

خواص الاستیک نانولوله‌ها به واسطه‌ی سه نوع نیرو که در نانولوله‌ها رخ می‌دهد، تعیین می‌گردند: دو نوع پیوند قدرتمند کربن-کربن درون‌لایه‌ای و یک برهم‌کنش ضعیف بین‌لایه‌ای (تنها در نانولوله‌های کربنی چنددیواره). نیروهای درون‌لایه‌ای ناشی از نیروهای پیوندهای قدرتمند  $\pi$  و  $\sigma$ ، میان اتم‌های کربن هستند، که به نانولوله‌ها مدول یانگ و استحکام کششی بسیار بالایی می‌بخشند.

این خواص، پیش‌تر در سال ۱۹۹۳ توسط اوورنی و همکاران [۷] به صورت نظری، مطالعه شد. آنها از محاسبات رایانه‌ای به منظور تحقیق درباره‌ی خواص ارتعاشی فرکانس پایین و صلبیت نانولوله‌های کربنی، استفاده کردند. با بررسی خمش یک نانولوله با ۲۰۰ اتم کربن، که در یک سمت گیردار و در سمت دیگر آزاد بود، آنها مدول یانگ ۱/۵ TPa را به دست آوردند. یک پژوهش جدیدتر [۸] مدول یانگ ۱ TPa را گزارش نمود.

پژوهش‌های تجربی بعدی نتایجی را ارائه دادند که توافق نسبتاً خوبی با پیش‌بینی‌ها دارند. یو و همکاران [۹] داده‌های نیرو-کرنش ریسمان‌های نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره<sup>۱</sup> را اندازه‌گیری نمودند، و نتیجه گرفتند که مدلی که در آن، بار تنها به وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی پیرامون ریسمان تحمل می‌گردد، بهترین تناسب را با نتایج تجربی دارد. بر اساس این مدل، آنها مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره را در محدوده‌ی ۰/۳۲-۱/۴۷ TPa، با میانگین ۱ TPa گزارش نمودند. علاوه بر این، این مدل استحکام‌های کششی را در محدوده‌ی ۱۳-۵۲ GPa ارائه می‌دهد.

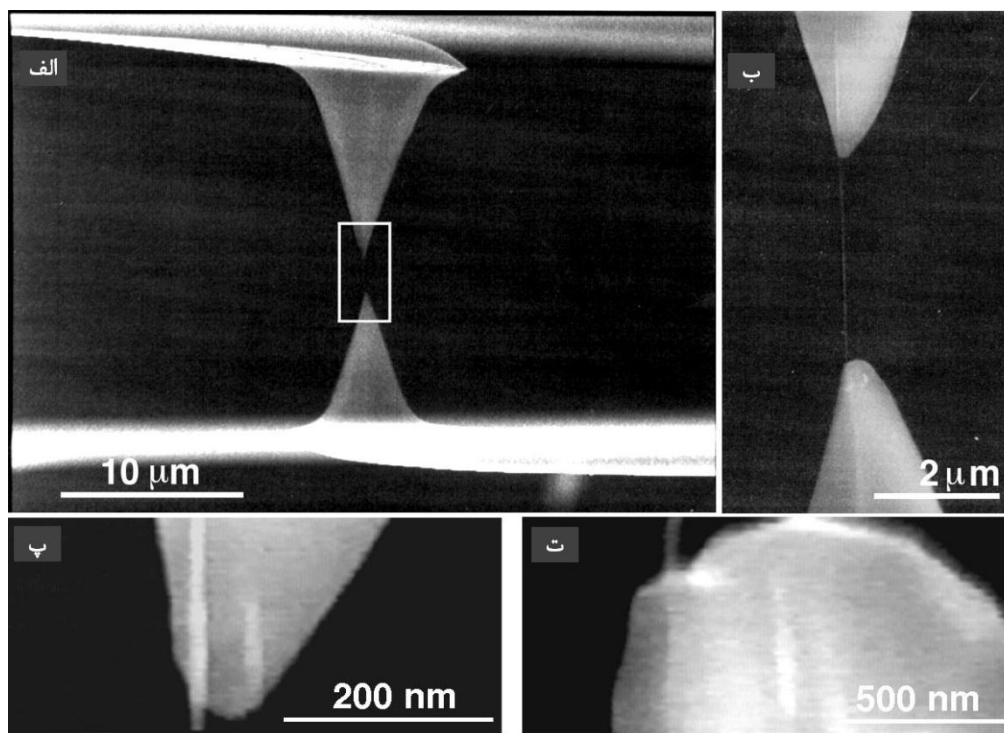
یو و همکاران [۱۰] این بار به بررسی رفتار نانولوله‌های کربنی چنددیواره، طی آزمون کشش پرداختند (شکل ۱-۴). آنها دریافتند که شکست نانولوله‌های کربنی چنددیواره در لایه‌ی بیرونی اتفاق می‌افتد (شکست شمشیر در غلاف<sup>۲</sup>)، و استحکام کششی این لایه، برای یک مجموعه‌ی ۱۹ عددی از نانولوله‌ها که تحت بارگذاری قرار گرفتند، در محدوده‌ی ۱۱-۶۳ GPa تغییر نمود. تحلیل منحنی‌های تنش-کرنش هر نانولوله مشخص نمود که مدول یانگ لایه‌ی بیرونی در گستره‌ی ۰/۲۷-۰/۹۵ TPa، قرار داشت.

سایر بررسی‌های تجربی و نظری نیز خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ی نانولوله‌های کربنی چنددیواره را با مدول یانگ بالای ۱ TPa و استحکام‌های کششی در محدوده‌ی ۱۰۰-۱۰ GPa، نشان می‌دهند [۱۱ و ۱۲]. بنابراین بدیهی است که چرا نانولوله‌های کربنی بارها به عنوان فاز تقویت در مواد کامپوزیتی، آزمایش شده‌اند،

<sup>۱</sup> Single-walled carbon nanotube (SWCNT) ropes

<sup>۲</sup> Sword-in-sheath failure

و پتانسیل ایجاد ساختارهای قدرتمند، به وسیله‌ی تولید نوارهای<sup>۱</sup> بسیار قوی [۱۳]، رشته‌ها<sup>۲</sup> [۱۴ و ۱۵]، و فیبرها<sup>۳</sup> [۱۶]، اثبات شده‌اند.



شکل ۱-۴ تست کشش یک نانولوله‌ی کربنی چنددیواره. الف) تصویر میکروسکوپ الکترونی از نگاه‌داشتن یک نانولوله‌ی کربنی چنددیواره توسط دو سر میکروسکوپ نیروی اتمی. ب) تصویر بزرگ‌شده‌ی ناحیه‌ی مشخص شده در بخش الف، نمایش نانولوله‌ی کربنی چنددیواره میان دو سر میکروسکوپ نیروی اتمی. پ) نمایش پیوستگی نانولوله‌ی کربنی چنددیواره روی سر بالای میکروسکوپ نیروی اتمی. ت) نمایش پیوستگی نانولوله‌ی کربنی چنددیواره روی سر پایین میکروسکوپ نیروی اتمی.

### ۱-۲-۲ کاربرد نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی دارای ویژگی‌های فوق‌العاده‌ی مکانیکی، حرارتی و الکترونیکی هستند. آنها، برای بروز انقلاب در زمینه‌های علم مواد و فن‌آوری نانو، امیدهای فراوانی ایجاد نمودند. نانولوله‌ها محدوده‌ی گسترده‌ای از کاربردهای بالقوه کشف‌نشده در حوزه‌های تخصصی گوناگون از قبیل هوافضا، خودرو، انرژی، تجهیزات ورزشی، دارو یا صنعت شیمیایی دارند که در آنها به‌عنوان جاذب گاز، سیستم‌های محرک، تقویت‌کننده‌های

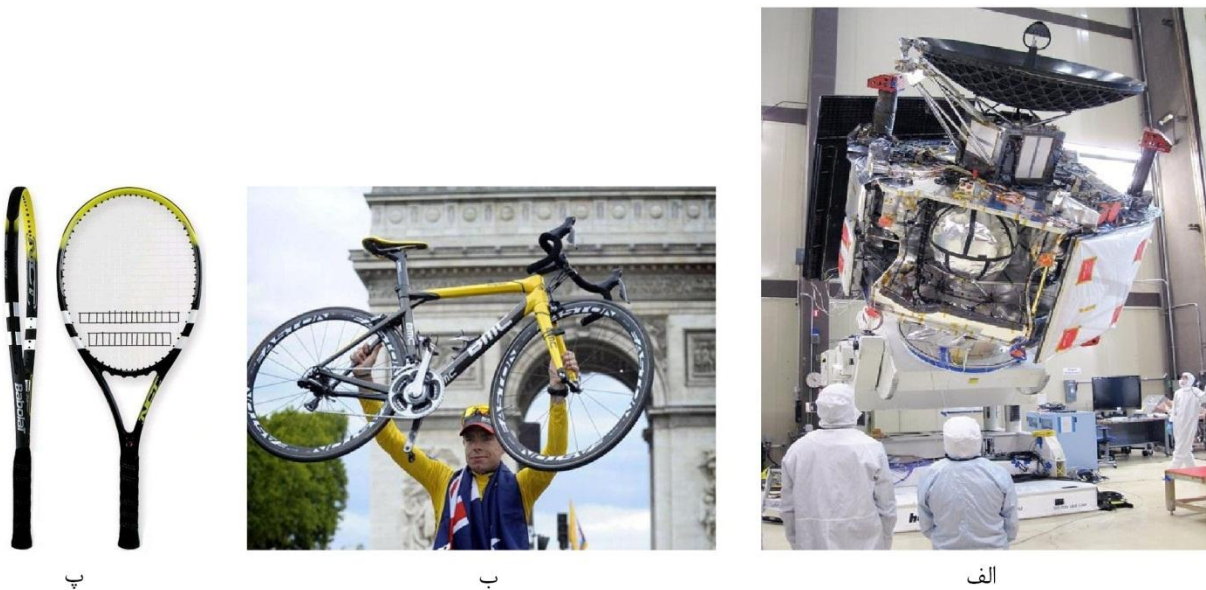
<sup>۱</sup> Ribbons

<sup>۲</sup> Yarns

<sup>۳</sup> Fibers



کامپوزیت، کاوش گرها، حس گرهای شیمیایی، لوله های نانو و راکتورهای نانو، می توانند استفاده شوند. نمونه-هایی از تجاری سازی نانولوله های کربنی در شکل ۱-۵ نشان داده می شود.



پ

ب

الف

شکل ۱-۵ (الف) استفاده از محافظ تخلیه ی الکتریسیته ی ساکن ساخته شده از نانولوله های کربنی در فضاپیما ی جونو، مأمور کاوش سیاره ی مشتری. (ب) دوچرخه ی برنده ی مسابقه ی تور دو فرانس، ساخته شده از کامپوزیت با فاز تقویت نانولوله های کربنی. (پ) نسل جدید راکت های تنیس با بهره مندی از نانولوله های کربنی، با سفتی و استحکام بیشتر همراه با وزن کمتر و واکنش پذیری بالاتر.

نانولوله های کربنی تک دیواره فرصت های فوق العاده ای در رابطه با خواص الکتریکی، خواص مکانیکی، خواص حرارتی و صدور میدانی<sup>۱</sup>، به صورت زیر ارائه می نمایند:

۱. خواص الکتریکی. ذخیره ی انرژی برای خازن ها و پیل های سوختی، مواد و تجهیزات الکترونیکی برای جوهرها و چسب های رسانا، تجهیزات و اجزای مدار میکروالکترونیکی، ساخت نانوکامپوزیت های پایه پلیمری رسانا به منظور استفاده در صنعت اتوموبیل سازی (برای پانل های بدنه اتوموبیل که بتواند به صورت الکترواستاتیک، رنگ آمیزی گردد)

۲. خواص مکانیکی. نانوکامپوزیت های با کارایی بالا، پوشش هایی برای افزایش مقاومت سایشی و کاهش اصطکاک، فیبرهای با کارایی بالا

۳. خواص حرارتی. نانوکامپوزیت های پایه پلیمری رسانای حرارتی، پوشش ها و رنگ های رسانای حرارتی

<sup>۱</sup> Field emission

۴. صدور میدانی. صفحه‌های نمایش مسطح

### ۳-۱- کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی

پلیمرها و کامپوزیت‌های پلیمری به تعداد فزاینده‌ای در صنایع ترابری، اتوموبیل‌سازی، هوافضا، دفاع، انرژی و تجهیزات ورزشی مورد استفاده قرار می‌گیرند. یک نانوکامپوزیت پلیمری از یک زمینه‌ی پلیمر همراه با یک ماده تقویت‌کننده (پُرکننده) در ابعاد نانو، تشکیل شده‌است. بسیاری از مواد پُرکننده‌ی گوناگون مورد آزمایش قرار گرفته‌اند، و نیز به‌صورت تجاری برای بهبود یا اصلاح خواص پلیمرها استفاده می‌شوند، که تعدادی از این مواد در ابعاد نانو می‌باشند. در این زمینه، نانولوله‌های کربنی یکی از پرجاذبه‌ترین مواد پُرکننده برای کاربردهای آینده می‌باشند. قابلیت رسانایی، استحکام، قابلیت ارتجاعی، چقرمگی و دوام کامپوزیت‌ها، با استفاده از نانولوله‌های کربنی، قابل بهبود می‌باشد. به‌دلیل خواص شگفت‌آور و نسبت منطقی بالای آنها، مقدار کمی از آنها می‌تواند تأثیر زیاد و فوق‌العاده‌ای روی خواص یک کامپوزیت داشته باشد. استفاده از نانولوله‌های کربنی، با افزایش کمینه در وزن، استحکام و سفتی پلیمر را به اندازه‌ی زیادی افزایش می‌دهد. همچنین، توانایی مقاومت در برابر ارتعاش و شعله آتش نیز بر مزایای استفاده از آنها، قابل افزودن است [۱۷].

اما تغییر در خواص کامپوزیت تا به امروز به مقادیری که انتظار می‌رفته نرسیده‌است. استحکام کششی و مدول الاستیک بالا و بیتای نانولوله‌های کربنی، زمانی که آنها با پلیمر می‌پیوندند، لزوماً یک نانوکامپوزیت با خواص بهبودیافته را تضمین نمی‌نماید. تعدادی چالش فنی وجود دارند که باید بر آنها پیروز شد تا کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی بتوانند از لحاظ اقتصادی، قابل رشد و توسعه باشند. شاید آشکارترین مانع سر راه، قیمت باشد. نانولوله‌های کربنی خالص و با کیفیت بالا قیمتی تا حدود ۱۰۰۰ دلار در هر گرم، می‌توانند دارا باشند. هرچند، به دلیل تلاش‌های متمرکز روی تحقق تولید انبوه نانولوله‌ها در سالیان گذشته، قیمت آنها به‌طور چشمگیری، کاهش یافته‌است.

از بررسی ادبیات موضوع دریافت می‌شود که چهار شرط برای تقویت مؤثر توسط الیاف<sup>۱</sup> در مواد کامپوزیتی وجود دارد: نسبت منظری بزرگ، انتقال تنش بین دو فاز زمینه و تقویت، پراکندگی<sup>۲</sup> خوب و هم‌ترازی<sup>۳</sup> [۱۸].

درحالی‌که نانولوله‌های کربنی به‌طور معمول، نسبت‌های منظری بسیار بالایی دارند، طول مطلق آنها هنوز کوتاه باقی می‌ماند که این امر سبب می‌شود که دست‌کاری و انجام فرایندها روی آنها دشوار باشد. طول بیشتر نانولوله‌ها در مرتبه‌ی میکرون است، حال آنکه نانولوله‌های منحصربه‌فردی به طول چند سانتی‌متر نیز ساخته شده‌اند [۱۹]. نسبت‌های منظری بالای نانولوله‌ها منجر به نیروهای جاذبه‌ی غیرکووالانسی بسیار بزرگی میان آنها می‌گردد، این امر سبب می‌شود که آنها کنار هم جمع شده و تشکیل باندل<sup>۴</sup> دهند، که دشوار است در این حالت از هم جدا شوند. در این صورت در اثر اعمال بار، نانولوله‌ها کارایی مورد انتظار را نداشته و به‌واسطه‌ی جدایی باندها، به‌جای شکست خود نانولوله، استحکام به‌صورت قابل توجهی کاهش می‌یابد.

اگر کاربرد نانوکامپوزیت، نیازمند به یک توزیع و پراکندگی مناسب از نانولوله‌های جدا از هم، است (که البته بیشتر کاربردها این نیاز را دارند)، توجه به جلوگیری از ایجاد باندها، بسیار ضروری می‌باشد.

به‌دلیل ویژگی‌های الکتریکی و ساختاری یکتای نانولوله‌های کربنی، آنها تمایلی به ایجاد پیوند قدرتمند با زمینه میزبان و یا با خودشان، ندارند. در نتیجه، پتانسیل افزایش یافته و بهبود در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت به‌وسیله‌ی اندازه‌ی انتقال تنشی که بین دو فاز زمینه و تقویت بتوان به‌دست آورد، محدود می‌گردد. تعداد زیادی از پژوهش‌ها روی حل این مسأله از راه وظیفه‌مندسازی شیمیایی<sup>۵</sup> و اصلاح سطح نانولوله‌ها، متمرکز شده‌اند [۲۰]. به‌منظور دستیابی به نتایج بهتر شاید نیاز به درک بهتری از برهم‌کنش میان نانولوله‌ها و پلیمر داریم. این پژوهش‌ها پیچیده می‌باشند و سال‌ها زمان لازم است تا بهترین شرایط برقرار گردد، که این مسأله به چند دلیل است؛ خواص نانولوله‌ها به عوامل زیادی بستگی دارد: تک‌دیواره یا چنددیواره بودن، دست‌ساز، قطر، طول، ناخالصی‌ها و عیوب که به فرایند تولید نانولوله، فرایند پالایش و غیره بستگی دارد. اگر پیوستگی میان دو فاز، ضعیف باشد، نانولوله‌ها همانند سوراخ‌ها یا ترک‌های در ساختار

<sup>۱</sup> Fibers

<sup>۲</sup> Dispersion

<sup>۳</sup> Alignment

<sup>۴</sup> Bundle

<sup>۵</sup> Chemical functionalization

نانو، رفتار می‌نمایند که تمرکزهای تنش محلی را ایجاد می‌نمایند، و نانولوله‌ها می‌توانند از داخل پلیمر بیرون کشیده شوند.

پراکندگی نانولوله‌ها درون زمینه، به‌منظور کسب انتقال بار کارا و مؤثر به نانولوله‌ها، دارای اهمیت ویژه‌ای است. این مسأله به تأمین توزیع‌های تنش یکنواخت کمک می‌نماید و اثر تمرکز تنش را کمینه می‌سازد. دو چالش اصلی مربوط به پراکندگی نانولوله‌ها درون زمینه عبارتند از: جداسازی نانولوله‌ها از یکدیگر، و سپس مخلوط کردن آنها با زمینه پلیمر به‌صورت یکنواخت.

از میان چهار شرط بیان‌شده برای تقویت مؤثر کامپوزیت توسط الیاف، هم‌ترازی الیاف درون زمینه، شاید کم‌اهمیت‌ترین آنها باشد، به‌طوری‌که نیازهای هم‌ترازی، اغلب توسط کاربرد برنامه‌ریزی‌شده، تحمیل می‌گردد. زمانی‌که الیاف درون زمینه، به‌شدت متمایل به یک جهت خاص باشند، بیشترین افزایش استحکام در راستای الیاف را مهیا خواهند نمود، اما بهبود ناچیز و یا هیچ بهبودی در راستای عرضی، نخواهیم داشت. در مقایسه، الیافی که به‌شکل نامنظم و تصادفی در زمینه قرار می‌گیرند، منتج به خواص مکانیکی ایزوتروپیک خواهند شد، اما در سطوح کاهش‌یافته‌ای از بهبود خواص [۱۸].

اگر روش‌های ساده‌ای به‌منظور تولید نانوکامپوزیت همگن با توزیع خوب نانولوله‌ها، ایجاد گردند و شرایط به‌منظور تقویت کامل ساختار توسط نانولوله‌ها، به‌طور کامل برآورده شود، می‌توان نانوکامپوزیتی با خواص و کارایی مطلوب و قابل پیش‌بینی، به‌دست آورد. به‌دلیل قیمت بالای نانولوله‌ها، فعلاً این نانوکامپوزیت‌ها می‌توانند در کاربردهای بسیار خاص، سودمند باشند، مانند: کامپوزیت‌هایی برای ساخت سازه‌های جدارنازک بسیار سبک به‌منظور استفاده در فضا [۲۱].

### ۱-۳-۱ خواص کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی

کشف نانولوله‌های کربنی فرصت‌های هیجان‌انگیزی برای بسیاری از کاربردها در بیشتر حوزه‌های علوم و مهندسی، به‌دلیل خواص جالب توجهی آنها، ارائه می‌نماید. هر دوی نتایج نظری و تجربی به ویژگی‌های ممتاز آنها اشاره می‌نمایند [۲۲ و ۲۳]، که در جدول ۱-۱ ارائه می‌گردد.

نانولوله‌های کربنی پتانسیل بالایی برای بهبود خواص مکانیکی، فیزیکی و الکتریکی پلیمرها دارند، به‌طوری‌که توسط توستنسون و همکاران [۲۴] بیان شده‌است. نانولوله‌ها یک نسبت منطقی به‌طور استثنائی بالا همراه چگالی پایین، به‌علاوه استحکام و سفتی بالا، نمایش می‌دهند [۲۵]، که آنها را به‌عنوان یک نامزد بالقوه برای تقویت مواد پلیمری معرفی نموده‌است.

درک چگونگی تأثیر روش‌های گوناگون تولید و نیز تغییرات در نانولوله و پلیمر، روی خواص نانوکامپوزیت ضروری است، تا ساخت نانوکامپوزیت‌هایی با بهره‌مندی کامل از ویژگی‌های فوق‌العاده‌ی نانولوله‌های کربنی میسر گردد، که در نتیجه‌ی آن، نانوکامپوزیت‌های پایه‌پلیمری سبکی خواهیم داشت که از لحاظ مکانیکی، قوی‌تر و بادوام‌تر از پلیمر خالص می‌باشند [۲۶ و ۲۷]. در خصوص رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت، تا به امروز، گزارش‌های بهبود خواص مکانیکی آن، متناقض بوده‌اند و دریافت شد که به عوامل مختلفی از جمله زمینه، نوع نانولوله و قطر آن، عملیات سطح آن و شیوه‌های تولید و غیره بستگی دارند. باتاچاریا و همکاران [۲۸] کامپوزیت پلی‌پروپیلن تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره را که با روش مخلوط‌کردن مذاب<sup>۱</sup> تولید شدند، بررسی نمودند، که یک افت اندک در مدول یانگ، استحکام کششی و کرنش شکست با ۰/۸٪ وزنی از نانولوله، مشاهده نمودند.

در پژوهش دیگری که توسط لائو و شی [۲۹] انجام شد، تلاش برای افزایش استحکام خمشی کامپوزیت اپوکسی تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی، با ۲٪ وزنی از نانولوله، با شکست مواجه شد.

در برخی موارد، زمینه پلیمر تقویت‌شده با نانولوله‌ها، بهبود قابل توجهی در خواص مکانیکی را نشان می‌دهند. پژوهشی توسط کیان و همکاران [۳۰] بیان می‌کند که مدول یانگ و استحکام کششی کامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی چنددیواره، به ترتیب ۳۶ تا ۴۰٪ و ۲۵٪، پس از افزودن ۱٪ وزنی از نانولوله به زمینه پلیمر، افزایش می‌یابند.

### جدول ۱-۱ ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی [۱۳].

ویژگی	اندازه
تک‌دیواره	۰/۸ g/cc
چگالی	
چنددیواره	۱/۸ g/cc
مدول یانگ	تک‌دیواره ~ ۱ TPa

<sup>۱</sup> Melt blending method

چنددیواره  $1-3 \text{ TPa}$  ~

تکدیواره  $50-500 \text{ GPa}$

استحکام

چنددیواره  $10-60 \text{ GPa}$

لیو و همکاران [۳۱] مدول یانگ و استحکام تسلیم نایلون-۶<sup>۱</sup> خالص و کامپوزیت نایلون-۶ تقویت شده با نانولوله‌های کربنی چنددیواره را با هم مقایسه نمودند. نتایج آنها نشان داد که با استفاده از تنها ۲٪ وزنی از نانولوله‌های کربنی چنددیواره، مدول یانگ و استحکام تسلیم، به ترتیب حدود ۲۱۴٪ و ۱۶۲٪، بهبود یافتند. گنگولی و همکاران [۳۲] نشان دادند که با افزودن ۱٪ وزنی از نانولوله‌های کربنی چنددیواره در زمینه پلیمر، استحکام نهایی و کرنش شکست، تا ۱۳۹٪ و ۱۵۸٪، به ترتیب ارتقا می‌یابند.

تعداد زیادی از پژوهش‌های آزمایشگاهی به منظور ارزیابی خواص مکانیکی کامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های کربنی، انجام شده‌اند و مرور ادبیات موضوع در بالا، به این موضوع اشاره می‌کند که یک تغییرپذیری در بین این نتایج تجربی به دلیل پیچیدگی‌های وابسته با توصیف خصوصیات مواد در مقیاس نانو، وجود دارد [۳۳].

### ۱-۳-۲ کاربردهایی برای کامپوزیت با فاز تقویت نانولوله‌های کربنی

همان‌طور که در قبل بیان شد، خواص ممتاز نانولوله‌های کربنی، آنها را به‌عنوان فاز تقویت مناسب در کامپوزیت‌ها به‌جای فیبرهای متداول، معرفی نموده‌است، درجایی که سفتی و استحکام بالا همراه با وزن کم، از اهمیت خاصی برخوردار می‌باشند. در حال حاضر، کامپوزیت‌های پلیمری، بزرگ‌ترین عرصه‌ی کاربرد نانولوله‌های کربنی می‌باشد. مشارکت نانولوله‌ها در زمینه‌های پلیمری، موادی را تأمین می‌نماید که برای بسیاری از کاربردهای مهندسی با کارایی بالا، می‌توانند استفاده گردند.

امروزه، شایع‌ترین کاربرد نانوکامپوزیت‌های با فاز تقویت نانولوله‌های کربنی، در الکترونیک می‌باشد. این نانوکامپوزیت‌ها برای حفاظت در مقابل تداخل الکترومغناطیسی و به‌عنوان تجهیزات تخلیه‌ی الکتریسیته‌ی

<sup>۱</sup> Nylon-6

ساکن، می‌توانند استفاده شوند. توانایی نانولوله‌ها در جذب ریزموج<sup>۱</sup>، می‌تواند برای گرم کردن سازه‌های اسکان موقتی، مورد بهره‌برداری قرار گیرد، که می‌تواند کاربردهایی در کاوش‌های فضایی داشته باشد.

تعداد بسیاری از کاربردهای امکان‌پذیر برای کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی وجود دارند؛ از قبیل پنل‌های ساختارهای مورد استفاده در فضا، تجهیزات ورزشی، انرژی، حمل‌ونقل، ساختارهای جدارنازک بسیار سبک برای کاربردهای فضایی [۳۴].

#### ۱-۴- پیشینه پژوهش

شناسایی خواص نانولوله‌های کربنی به دلیل وابستگی خواص مکانیکی آنها به اندازه و ساختار نانو، از شناسایی خواص مواد متعارف، پیچیده‌تر می‌باشد. در سالیان گذشته پیشرفت قابل توجهی در این زمینه صورت گرفته است. هر دوی روش‌های نظری و تجربی<sup>۲</sup>، استفاده شده‌اند.

با وجود تمامی پیشرفت‌ها در زمینه شیوه‌های تجربی، تشخیص رفتار مکانیکی نانومواد، هم از دیدگاه مکانیکی و هم از دیدگاه فیزیکی، با چالش‌های فراوانی روبه‌روست. پژوهش‌های تجربی، بسیار دشوار می‌باشند، به دلیل محدودیتی که در دسترسی به نانولوله‌های کربنی بی‌نقص، با کیفیت بالا و با طول مناسب، موجود است و نیز محدودیت در اندازه‌گیری در مقیاس نانو. بنابراین، روش‌های نظری جایگزین مناسبی برای آنها به شمار می‌آیند. روش‌های نظری یا به بیانی دیگر، روش‌های محاسباتی<sup>۳</sup>، در قیاس با روش‌های تجربی، به‌طور معمول انعطاف‌پذیرتر و مؤثرتر می‌باشند و بدین‌گونه امروزه به یک ابزار قدرتمند و قابل توجه در مطالعه‌ی نانومواد تبدیل شده‌اند. در میان روش‌های محاسباتی مربوط به اتم<sup>۴</sup>، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک<sup>۵</sup> و مدل‌سازی پیوسته<sup>۶</sup>، دو روش مورد استفاده‌ی فراوان در نانومکانیک می‌باشند [۳۵].

اگرچه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک می‌تواند برای رسیدگی به هر مسأله‌ی مرتبط با حرکت مولکولی و یا اتمی استفاده گردد، محاسبات بسیار حجیم، کاربرد این روش را به مسائل با تعداد کم مولکول و یا اتم محدود می‌نماید؛ به‌طوری‌که امروزه با وجود توانایی و اثربخشی بالای رایانه‌های موجود، شبیه-

<sup>۱</sup> Microwave-absorbing

<sup>۲</sup> Theoretical and experimental approaches

<sup>۳</sup> Computational approach

<sup>۴</sup> Atomistic

<sup>۵</sup> Classical molecular dynamic simulation

<sup>۶</sup> Continuum modeling

سازیدینامیک مولکولی کلاسیک، هنوز به یک مدل در مقیاس به نسبت کوچک، تنها شامل اتم‌هایی کمتر از  $10^6$  تا  $10^8$  عدد و مدت زمان کمتر از  $10^3$  تا  $10^6$  پیکوثانیه<sup>۱</sup>، محدود می‌باشد.

این امر نیاز به روش‌های مدل‌سازی کاراتری را ایجاد کرده‌است. یکی از این پیشرفت‌های مهم، به اصطلاح به روش مدل‌سازی پیوسته‌معادل<sup>۲</sup> نامیده می‌شود. این روش به‌عنوان یک شیوه‌ی بسیار مؤثر بخصوص برای ساختارهای نانو با مقیاس بزرگ، در تقابل با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مورد توجه قرار گرفته‌است. در سال‌های گذشته بسیاری از مدل‌های پیوسته‌معادل در پژوهش‌ها بکار گرفته شده‌اند. برای نمونه، اودگارد و همکاران [۳۶] روشی را ارائه نمودند که به‌عنوان یک رابط میان شیمی محاسباتی و مکانیک جامدات، ب-وسيله‌ی جایگزینی ساختارهای مولکولی مجزا با مدل‌های پیوسته‌معادل، بکار می‌رود. جایگزینی، به‌وسيله‌ی مساوی‌قراردادن انرژی پتانسیل مولکولی ماده با ساختار نانو، با انرژی کرنشی مدل‌های پیوسته، انجام می‌گردد. آنها پیش‌پيوندهای کربن-کربن را در نظر نگرفتند.

لی و چو [۳۷] یک روش مکانیک ساختاری<sup>۳</sup> را به‌منظور مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره پیشنهاد نمودند که در آن نانولوله‌ی کربنی به‌صورت یک ساختار قاب فضایی فرض شد، به‌صورتی که پیوند کربن-کربن به‌صورت المان تیر و اتم‌های کربن به‌عنوان گره‌های المان‌های تیر، مدل شدند. پارامترهای سفتی مقطع المان محدود تیر، بر مبنای معادل‌سازی انرژی کرنشی تیر و پتانسیل میدان نیروی<sup>۴</sup> بین‌اتمی و روابط هندسی حاکم، به‌دست آمد. برای شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی به‌صورت ساختار قاب فضایی، آنها از روش ماتریس سفتی استفاده کردند. مدل آنها به‌دلیل سادگی و دقت مناسب، در جامعه‌ی علمی توجه زیادی را به خود جلب کرد. اعتبار روش پیشنهادشده با نتایج تئوری و تجربی موجود مورد بررسی قرار گرفت و معلوم شد که مدول یانگ هر دو نوع نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره آرمچیر و زیگزاگ با افزایش قطر نانولوله، افزایش می‌یابد.

ناتسوکوی و اندو [۳۸] تئوری پیوسته نانومقیاس<sup>۵</sup> را به‌منظور پیوستن مستقیم با تابع پتانسیل مورس در یک مدل ساختاری از نانولوله‌ها، گسترش دادند تا رفتار تنش-کرنش نانولوله کربنی را شبیه‌سازی نمایند. نتایج

<sup>۱</sup> A Picosecond is an SI unit of time equal to  $10^{-12}$  of a second

<sup>۲</sup> Equivalent-continuum modeling (ECM) approach

<sup>۳</sup> Structural mechanics approach

<sup>۴</sup> Force field potential

<sup>۵</sup> Nanoscale continuum theory



نشان دادند که تحت بارگذاری کششی، نانولوله آرمچیر پاسخ تنش- کرنش بزرگتری از نانولوله زیگزاگ، نمایش می‌دهد.

ژائو و همکاران [۳۹] یک مدل مکانیک ساختاری تحلیلی را با پیوستن پتانسیل مورس اصلاح‌شده، ایجاد نمودند که توانمند در پیش‌بینی مدول یانگ، نسبت پواسون و رابطه تنش- کرنش نانولوله‌ی کربنی تحت بارگذاری کششی و پیچشی، بود. مدل، رابطه تنش- کرنش غیرخطی نانولوله‌های کربنی را ارائه داد که تقریب خوبی از استحکام نهایی<sup>۱</sup> و کرنش متناظر با آن برحسب شکست نانولوله‌ها، در اختیار گذاشت.

لائو و همکاران [۴۰] یک بررسی انتقادی روی درستی روش‌های تئوری و تجربی متفاوت مربوط به خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی از قبیل مدل‌سازی و سنجش مدول یانگ، استحکام کششی و مدول برشی، ارائه کردند. پژوهش‌های آنها این حقیقت را منتشر می‌کند که روش‌های تحلیلی همچون شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و تحلیل اجزای محدود که بارها به‌منظور تحلیل و تفسیر ویژگی‌های مکانیکی نانولوله‌های کربنی استفاده شدند، به‌علت استفاده از فرض‌ها و شرایط مرزی مقدماتی متفاوت، نتایج متناقضی ارائه کردند. آشکارا به اثبات رسیده که این روش‌های مدل‌سازی پیوسته‌معادل، مؤثر و کارآمد بوده‌اند، اما هنوز برخی چالش‌های فنی باقی مانده‌اند که باید حل شوند. از این‌پس، مدل‌های اجزای محدود بر مبنای مکانیک مولکولی، به‌منظور کشف پاسخ مکانیکی، بکار گرفته شده‌اند.

برای نمونه، تزرپس و پاپانیکوس [۴۱] بر اساس راهکار لی و چو [۳۷]، یک مدل اجزای محدود سه‌بعدی با المان‌های تیر الاستیک را بر مبنای این فرض که نانولوله‌های کربنی زمانی که تحت بارگذاری قرار می‌گیرند مانند ساختارهای قاب فضایی رفتار می‌نمایند، ایجاد نمودند تا اثر هندسه را روی خواص مکانیکی نانولوله‌ها بررسی نمایند. برخلاف روش ماتریس سفتی لی و چو [۳۷]، مدل اجزای محدود آنها نیازمند مقادیر مشخصی از مدول الاستیک و ممان‌های اینرسی المان‌های تیر بود. آنها دریافتند که مدول یانگ نانولوله‌ی دست‌ساز از مدول یانگ هر دو نوع نانولوله‌ی آرمچیر و زیگزاگ، بزرگتر است.

مئو و روسی [۴۲] خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره را بر اساس مدل اجزای محدود و با استفاده از المان‌های فنر پیچشی و غیرخطی، تعیین نمودند. استفاده از المان‌های فنر توانایی مدل‌سازی برهم‌کنش پیچیده تعداد بسیار زیادی از اتم‌ها و نیز مدل‌سازی برهم‌کنش پیوند را بدون تعریف متغیرهای غیرفیزیکی مساحت و اینرسی، مورد نیاز حین استفاده از المان‌های تیر، ایجاد می‌نمایند.

<sup>۱</sup> Ultimate strength

جیانوپولوس و همکاران [۴۳] یک فرمول‌بندی اجزای محدود سه‌بعدی را به‌منظور محاسبه‌ی پاسخ الاستیک مکانیکی نانولوله‌های کربنی آرمچیر و زیگزاگ در دامنه‌ی گسترده‌ای از مقادیر شعاع نانولوله، پیشنهاد نمودند. المان‌های فنر الاستیک خطی برای شبیه‌سازی میدان نیرو<sup>۱</sup> و برهم‌کنش‌های بین‌اتمی موجود میان اتم‌های کربن، به‌صورت مؤثری به‌کارگرفته شدند. مزیت این روش، سادگی آن همراه با استفاده سراسر از ثابت‌های فیزیکی مهیا شده از تئوری مولکولی می‌باشد. بارگذاری‌های کرنش محوری و گشتاور پیچشی، به ترتیب، به‌منظور محاسبه‌ی مدول یانگ و مدول برشی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره اعمال شدند.

وجه مشترک تمامی پژوهش‌های صورت‌گرفته بر مبنای مکانیک ساختاری مولکولی، یک المان تیر با مقطع دایره‌ای است که حول محورهای مقطع، سفتی یکسانی دارد؛ در نتیجه میان خمش درون‌صفحه‌ای و خمش برون‌صفحه‌ای (وارونگی<sup>۲</sup>)، تمایزی قائل نمی‌شوند. به‌منظور حل این مشکل و ایجاد تمایز میان خمش درون‌صفحه‌ای و خمش برون‌صفحه‌ای، مدل ابتدایی مکانیک ساختاری مولکولی با استفاده از المان تیر با مقطع مستطیلی اصلاح شد [۴۴ و ۴۵] که این المان تیر حول محورهای مقطع خود، گشتاورهای متفاوتی داشت. در مدل مکانیک ساختاری مولکولی تصحیح‌شده‌ی لی و گو [۴۴]، پارامترهای تیر بر اساس برهم‌کنش‌های درون‌صفحه‌ای در گرافن، با تحلیل کشش و خمش به‌دست آمد. اما روش تعریف جهت‌های محلی هر المان تیر در ساختار قاب سه‌بعدی نانولوله، مشخص نشد. در [۴۵]، یک تیر مربعی با ثوابت مادی مشابه مدل اولیه‌ی مکانیک ساختاری مولکولی [۳۷]، همراه با یک ثابت وارونگی استفاده شد. با این وجود، به‌کارگرفتن روش آنها سراسر نبود و پارامترهای هندسی المان تیر می‌بایست بر مبنای قطر نانولوله تعیین می‌شد. علاوه بر اینها، مدل اولیه‌ی مکانیک ساختاری مولکولی [۳۷] و این دو مدل تصحیح‌شده‌ی مکانیک ساختاری مولکولی [۴۴ و ۴۵]، تنها در تغییرشکل‌های کوچک کاربردی بوده و از انجام تحلیل غیرخطی ناتوان بودند.

همان‌طور که شیوه‌های مکانیک پیوسته در مدل‌سازی نانولوله‌ها مورد استفاده قرار می‌گرفت، مشخص شد که این روش‌ها در مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌ها هم می‌توانند مفید باشند. تاکنون با برخی از روش‌های معتبر و کارا در سنجش ویژگی‌های مکانیکی چشمگیر نانولوله‌های کربنی آشنا شدیم، حال به ذکر نمونه‌هایی از پژوهش‌های انجام‌شده در زمینه تشخیص خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی می‌پردازیم.

<sup>۱</sup> Force field

<sup>۲</sup> Inversion

والاوالا و اودگارد [۴۶] شیوه‌های مدل‌سازی گوناگونی را مطرح نموده و اهمیت روش مدل‌سازی چندمقیاسه<sup>۱</sup> را برجسته نمودند. خواص مکانیکی مواد در ساختار نانو توسط مجموعه‌ای منتخب از روش‌های محاسباتی، قابل تعیین می‌باشند.

برای کوچک‌ترین مقیاس‌های طول و زمان، روش‌های شیمی محاسباتی به‌طور عمده به‌منظور پیش‌بینی ساختار اتمی مورد استفاده قرار می‌گیرند. برای بزرگ‌ترین مقیاس‌های طول و زمان، مکانیک محاسباتی به‌منظور پیش‌بینی رفتار مکانیکی مواد و ساختارهای مهندسی، استفاده می‌شوند. روش‌های مدل‌سازی شیمی محاسباتی و مکانیک محاسباتی بر اساس اصول به‌طور کامل محرز و ثابتی هستند که در علوم و مهندسی توسعه یافته‌اند. اما، مقیاس‌های متوسط طول و زمان، شیوه‌های مدل‌سازی جامعی که به اندازه‌ی شیوه‌های مدل‌سازی کوچک‌ترین و بزرگ‌ترین مقیاس‌های طول و زمان، توسعه یافته باشند، را دارا نمی‌باشند. بنابراین، روش‌های مدل‌سازی چندمقیاسه به کار گرفته می‌شوند، که مزیت روش‌های مدل‌سازی شیمی محاسباتی و روش‌های مکانیک محاسباتی را همزمان با هم دارند تا ساختار و خواص مواد را پیش‌بینی نمایند. یکی از روش‌های مدل‌سازی چندمقیاسه که در پژوهش ما نیز مورد استفاده قرار گرفت، روش پیوسته بر مبنای تئوری اتمی<sup>۲</sup> است. این روش دارای این مزیت بی‌همتا است که روابط ویژگی‌های ساختاری حیطه‌ی اتمی را در یک کالبد پیوسته<sup>۳</sup> توصیف می‌نماید که در نتیجه، نیاز محاسباتی کاهش پیدا کرده، حال آنکه روابط ساختاری حیطه‌ی اتمی مناسب، به کار گرفته می‌شود [۴۷ و ۴۸]. به بیان دیگر، برتری یگانه‌ی این روش، توصیف موقعیت‌های اتمی، برهم‌کنش‌های آنها، و پتانسیل‌های بین‌اتمی حاکم بر آنها در یک کالبد پیوسته، است. نقطه‌قوت روش‌های پیوسته بر مبنای تئوری اتمی در توانایی آنها در دوری کردن از تعداد زیاد درجات آزادی است که در روش‌های مدل‌سازی گسسته<sup>۴</sup> با آن مواجه می‌شویم، همراه با قابلیت تعریف رفتار ساختاری غیرخطی، که برای اجزای تشکیل‌دهنده مدل فراهم می‌نمایند [۴۹].

استفاده از المان حجمی نماینده<sup>۵</sup>، در شبیه‌سازی و مدل‌سازی نانو کامپوزیت‌های پایه پلیمری، به یک رویه استاندارد تبدیل شده است. لیو و چن [۵۰] خواص اثربخش کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌ها را از طریق

<sup>۱</sup> Multiscale modeling

<sup>۲</sup> The atomistic-based continuum technique

<sup>۳</sup> Continuum framework

<sup>۴</sup> Discrete modeling techniques

<sup>۵</sup> Representative volume element (RVE)

ایجاد یک المان حجمی نماینده که به طور کامل با استفاده از مکانیک پیوسته مدل شد، ارزیابی نمودند. هرچند، المان حجمی نماینده‌ی آنها دارای فاز میانی نبود و نیز از تئوری اتمی در آن استفاده نشد.

هو و همکاران [۵۱] یک المان حجمی نماینده ایجاد نمودند که دارای فاز میانی بود، هرچند فاز میانی آن توسط المان‌های اجزای محدود سه‌بعدی توپر<sup>۱</sup> با خواص ماده‌ای ثابت، مدل‌سازی شد، که دوباره بر استفاده از مفاهیم مکانیک پیوسته مرسوم، در مقابل ارائه بر مبنای تئوری اتمی، دلالت می‌نماید.

ترزپس و همکاران [۵۲] یک روش مدل‌سازی چندمقیاسه را ایجاد نمودند تا رفتار کششی نانوکامپوزیت را بررسی نمایند که در آن نانولوله به صورت مستقل مدل می‌شود، سپس به عنوان یک المان تیر تقریب زده شده، و درون یک المان حجمی نماینده گنجانده شده، تا سرانجام با استفاده از تحلیل اجزای محدود حل شود. در این مدل یک پیوند کامل میان نانولوله و فاز زمینه، تا زمانی که تنش برشی فصل‌مشترکی آنها از مقاومت متناظر تجاوز کند، فرض نمودند. آنها ناحیه‌ی فاز میانی را در المان حجمی نماینده خود در نظر نگرفتند. روش ارائه‌شده توسط آنها، تنها برای بارگذاری کششی، عملی است.

لی و چو [۵۳] شیوه چندمقیاسه‌ی دیگری معرفی نمودند که برای بررسی رفتار فشاری نانوکامپوزیت مفید است. آنها المان حجمی نماینده را با استفاده از ساختار قاب فضایی برای نانولوله، المان‌های توپر برای پلیمر، و المان خرپا برای تعریف ناحیه‌ی فاز مشترک، تشکیل دادند. در این روش، برهم‌کنش میان پلیمر و نانولوله به صورت نیروی وان‌دروالس در نظر گرفته شد. خواص ماده‌ای ثابت در سراسر مدل مورد استفاده قرار گرفت، و از این رو در توصیف غیرخطی بودن سیستم، ناتوان بود.

پتانسیل‌های بین‌اتمی<sup>۲</sup> در ذات خود، غیرخطی هستند. بنابراین، برای فراهم کردن یک تعریف واقع‌گرایانه از سیستم، غیرخطی بودن پتانسیل‌ها در هر شبیه‌سازی باید در نظر گرفته شود. بیشتر مدل‌های ساختاری معادل پیشنهاد شده برای نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره بر اساس یک رابطه‌ی خطی برای پتانسیل بین‌اتمی اتم‌های کربن بوده‌اند که آنها را برای مدل‌سازی کرنش‌های بزرگ و نیز شکست نانولوله‌ها، نامناسب می‌ساخت. شیوه‌های قبلی در ایجاد المان حجمی نماینده برای بررسی خواص نانوکامپوزیت‌های پایه‌پلیمری، نیز بیشتر خطی بوده‌اند از جمله [۵۰ و ۵۳]. از این رو، این گونه مدل‌سازی‌ها، برای پیش‌بینی پاسخ غیرخطی سیستم، ناتوان بوده‌اند و تنها در یک ناحیه‌ی بسیار محدود، معتبر می‌باشند.

<sup>۱</sup> Solid

<sup>۲</sup> Interatomic potentials

ترزپس و همکاران [۵۲] از نخستین پژوهش‌گرانی بودند که منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت را گزارش کردند. بدون توجه به خواص الاستیک غیرخطی پلیمر و یا خواص الاستیک غیرخطی مربوط به نانولوله‌های کربنی، رابطه‌ی تنش-کرنش نانوکامپوزیت قابل دستیابی نبوده است. منحنی تنش-کرنش یکی از مهم‌ترین مشخصه‌های مورد نیاز برای توصیف یک کامپوزیت است.

شکریه و رفیعی [۵۴] مدل لی و چو [۵۳] را برای وارد کردن یک ناحیه‌ی میان‌فازی غیرخطی بر مبنای پتانسیل لنارد-جونز، تعمیم دادند. اما، مدل آنها تلاشی برای وارد کردن یک تعریف غیرخطی از نانولوله و پلیمر اطراف آن، انجام نداد. پیوند میان نانولوله و پلیمر اطرافش به صورت برهم‌کنش‌های وان‌دروالس تلقی شده است.

آیت‌اللهی و همکاران [۵۵] نیز مدل‌سازی چندمقیاسه را برای پیش‌بینی خواص غیرخطی نانوکامپوزیت پایه-پلیمری تحت شرایط بارگذاری کششی، خمشی و پیچشی ارائه دادند که فاز میانی به صورت پیوسته مدل شده و مدول یانگ‌های مختلفی برای آن فرض شده است.

ورنیک و میگوئید [۴۹] یک المان حجمی نماینده غیرخطی را به منظور بررسی خواص مکانیکی یک پلیمر تقویت‌شده با نانولوله‌ی کربنی، استفاده نمودند. آنها، شرایط بارگذاری کششی و پیچشی را روی نانولوله‌های کربنی آرمچیر و زیگزاگ، ایجاد نمودند تا مدول یانگ و مدول برشی آنها را استخراج نمایند. پاسخ غیرخطی نانولوله‌های کربنی آرمچیر و زیگزاگ و پلیمر تقویت‌شده توسط آنها، نیز ارائه شد. آنها فاز میانی را به صورت نیروهای وان‌دروالس در نظر گرفتند و برای شبیه‌سازی این برهم‌کنش‌ها از المان خرپا استفاده کردند.

از بررسی ادبیات موضوع آشکار می‌شود که بیشتر کارهای انجام‌شده بر مبنای مدل تیر با مقطع دایره‌ای، تنها امکان تحلیل خطی را فراهم می‌نمودند که بدین ترتیب در مدل‌سازی تغییرشکل‌های بزرگ و انجام تحلیل غیرخطی ناتوان بودند. همچنین المان تیر با مقطع دایره‌ای که در مدل‌سازی نانولوله توسط پژوهش‌گران در گذشته مورد استفاده قرار گرفت، حول هر محور سطح مقطع خودش دارای ممان اینرسی یکسانی است که در نتیجه سفتی<sup>۱</sup> یکسانی را حول هر محور سطح مقطع خواهد داشت؛ و بنابراین تمایزی میان خمش درون-صفحه‌ای و برون‌صفحه‌ای<sup>۲</sup> در نظر گرفته نشد؛ در صورتی که این دو برهم‌کنش سفتی‌های متفاوتی دارند.

<sup>۱</sup> Stiffness

<sup>۲</sup> in-plane and out-of-plane bending

## ۱-۵- ساختار پایان نامه

در فصل بعد مدلی ارائه خواهد شد که رفتار غیرخطی نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری‌های مختلف پیش‌بینی می‌نماید و در آن، نانولوله به صورت یک قاب فضایی با المان‌های تیر سه‌بعدی، در مقیاس اتمی، مدل خواهد شد. در این مدل، المان‌های تیر با مقطع عمومی نقش همان پیوندهای کووالانسی میان اتم‌های کربن در نانولوله را به عهده دارند و گره‌ها در دو سر المان‌ها، همان اتم‌های کربن می‌باشند. پلیمر به وسیله‌ی روش اجزای محدود پیوسته مدل‌سازی می‌شود. در نهایت، مدل‌سازی نانوکامپوزیت به صورت چندمقیاسه و با استفاده از المان حجمی نماینده انجام می‌پذیرد. برهم‌کنش میان اتم‌های کربن در نانولوله با اتم‌های پلیمر اطراف آن به صورت نیروهای وان‌دروالس، با استفاده از پتانسیل لِنارد-جونز، در نظر گرفته می‌شود.

در فصل سوم، نتایج به دست آمده از تحلیل مدل‌های ایجاد شده ارائه می‌گردند. ابتدا به نتایج مربوط به نانولوله‌ها پرداخته می‌شود، به صورتی که رفتار غیرخطی نانولوله‌ها در شرایط بارگذاری کششی، پیچشی و خمشی ارائه شده و ویژگی‌های مکانیکی آنها مانند مدول یانگ و نسبت پواسون، مدول برشی، و مدول یانگ مؤثر در خمش، حاصل از شرایط مختلف بارگذاری گزارش می‌شوند. سپس به نتایج نانوکامپوزیت‌های با جزء‌های حجمی مختلف از نانولوله‌ها اشاره می‌شود، به طوری که رفتار غیرخطی آنها همراه با مدول یانگ، مدول برشی، و مدول یانگ مؤثر در خمش آنها، به ترتیب حاصل از شرایط بارگذاری کششی، پیچشی و خمشی ارائه می‌گردند. نتایج به دست آمده با نتایج گزارش شده در مقالات مقایسه شده و تفسیر می‌گردند.

در فصل چهارم، نتیجه‌گیری دریافت شده از انجام این پایان‌نامه، همراه با پیشنهادهایی به منظور انجام پژوهش‌های آتی ارائه می‌گردند تا نتایج دقیق‌تر و واقع‌بینانه‌تری حاصل شوند.

## فصل ۲ روش شبیه‌سازی

همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، نانولوله‌های کربنی به‌دلیل ویژگی‌های فوق‌العاده‌ی مکانیکی، الکتریکی، حرارتی و ... مورد توجه ویژه‌ای قرار گرفته‌اند. پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌ها، نه‌تنها یکی از مهم‌ترین موضوع‌هایی است که باید به آن رجوع شود، بلکه نخستین گام در توصیف خواص مکانیکی کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌ها، می‌باشد. فهم ویژگی‌های کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌ها، یک نیاز اساسی در طراحی و تحلیل آنها به‌عنوان نسل جدیدی از مواد کامپوزیتی است.

سنجش تجربی خواص مکانیکی نانولوله‌ها و کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با آنها، کار ملالت‌آوری است. تعداد زیادی از پژوهش‌های تجربی برای تعیین ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی انجام شده‌اند، اما به‌دلیل تفاوت‌های میان روش‌های تجربی استفاده‌شده، این بررسی‌ها نتایج بسیار متفاوتی ارائه نمودند. این تفاوت در نتایج را می‌توان به دلایل زیر نسبت داد:

۱. کمبود روش‌های اندازه‌گیری مستقیم مناسب در مقیاس نانو
۲. محدودیت‌های چشمگیر در اندازه‌ی نمونه
۳. عدم قطعیت در اطلاعات به‌دست‌آمده از اندازه‌گیری غیرمستقیم
۴. ناکافی‌بودن روش‌های آماده‌سازی نمونه‌های آزمایش و کمبود کنترل روی هم‌ترازی و توزیع نانولوله‌ها

اطلاعات بسیار پراکنده‌ی به‌دست‌آمده از طریق بررسی‌های تجربی، بسیاری از پژوهش‌گران را ترغیب نمود تا پژوهش‌های نظری را، هم برای قضاوت داده‌های تجربی و هم تأمین اطلاعات مورد نیازی که قابل دسترس از طریق روش‌های تجربی نیست، دنبال نمایند.

تلاش‌های نظری در مدل‌سازی رفتار نانولوله‌ها، می‌توانند به ۳ دسته تقسیم شوند:

۱. مدل‌سازی اتمی<sup>۱</sup>

۲. مدل‌سازی پیوسته<sup>۲</sup>

۳. مدل‌سازی پیوسته‌ی در مقیاس نانو<sup>۳</sup>

در تقابل با مدل‌سازی پیوسته‌ی نانولوله‌ها، که تمام ساختار نانو با یک محیط پیوسته جایگزین می‌شود، مدل‌سازی پیوسته‌ی در مقیاس نانو، یک توافق معقول در فرایند مدل‌سازی، به‌وسیله‌ی جایگزینی پیوند کربن-کربن با یک المان پیوسته، فراهم می‌نماید. به بیان دیگر، در مدل‌سازی پیوسته‌ی در مقیاس نانو، برهم‌کنش‌های مولکولی میان پیوندهای کربن-کربن، با استفاده از عضوهای سازه‌ای مانند تیر، خرپا و فنر، که خواص آنها توسط مدل‌سازی اتمی به‌دست آمده‌اند، مدل می‌گردند. این روش‌های مدل‌سازی، به مکانیک نانومقیاس<sup>۴</sup> یا مکانیک ساختاری مولکولی<sup>۵</sup> نسبت داده می‌شوند. توسعه‌ی تئوری‌های پیوسته در مقیاس نانو، اشتیاق بیشتری را برای واردنمودن تئوری‌های مکانیک پیوسته، در مقیاس نانو، برانگیخته‌است. روش‌های شبه‌پیوسته<sup>۶</sup> و روش‌های پیوسته‌معادل<sup>۷</sup>، دو راهبرد رایج می‌باشند که در مدل‌سازی پیوسته‌ی در مقیاس نانو، مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۵۶].

از میان تمامی روش‌های گوناگون، روش پیوسته‌معادل ایجادشده توسط اودگارد و همکاران [۳۶]، و روش مکانیک ساختاری ایجادشده توسط لی و چو [۳۷]، به‌دلیل نزدیکی این دو شیوه‌ی شبیه‌سازی به رفتار طبیعی نانولوله‌های کربنی، مورد توجه بیشتری قرار گرفته‌اند.

<sup>۱</sup> Atomistic modeling

<sup>۲</sup> Continuum modeling

<sup>۳</sup> Nano-scale continuum modeling

<sup>۴</sup> Nanoscale mechanics

<sup>۵</sup> Molecular structural mechanics

<sup>۶</sup> Quasi-continuum methods

<sup>۷</sup> Equivalent-continuum methods



همان‌طور که پیش‌تر بیان گردید، لی و چو [۳۷] یک شیوه‌ی مکانیک ساختاری را به‌وسیله‌ی ارتباط‌دادن انرژی‌های پتانسیل بین‌اتمی به انرژی‌های کرنشی یک المان تیر معادل، به نمایندگی از هر پیوند کربن-کربن، ایجاد نمودند. در روش آنها، ارتباط میان فضای مولکولی و فضای ساختاری، برای هر پیوند کربن-کربن، صورت می‌پذیرد؛ درحالی‌که، اودگارد و همکاران [۳۶]، این ارتباط را برای تمام ساختار نانو برقرار نمودند.

تعدادی از پژوهش‌گران، روش پیوسته‌معادل، و یا روش مکانیک ساختاری را برای بررسی خواص مکانیکی پلیمرهای تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی به‌کار گرفتند، و کارایی این روش‌ها را تأیید نمودند. عیب اصلی روش پیوسته‌معادل، محاسبات زیاد و تحلیل پیچیده‌ی مورد نیاز آن می‌باشد. این نقص از این حقیقت نشأت می‌گیرد که، در روش پیوسته‌معادل، ارتباط میان مکانیک مولکولی و مکانیک ساختاری، به‌وسیله‌ی هم-ارزسازی انرژی پتانسیل مولکولی تمامی ساختار مولکولی با انرژی کرنشی مکانیکی تمامی المان‌های خرپا، مشخص می‌گردد. اما، روش مکانیک ساختاری، ارتباطی میان انرژی‌های پتانسیل مولکولی بین‌اتمی و انرژی‌های کرنشی هر المان تیر منفرد، که نماینده پیوندهای کربن-کربن می‌باشند، به‌وسیله‌ی تساوی انرژی‌ها برقرار می‌سازد.

در این پژوهش، یک روش مدل‌سازی چندمقیاسه به‌کارگرفته می‌شود که در آن نانولوله‌ها در مقیاس نانو و پلیمر در مقیاس میکرو<sup>۱</sup> مدل‌سازی می‌شوند. المان حجمی نماینده نانومکانیک و مکانیک پیوسته را یکپارچه می‌نماید، بدین معنی که میان مقیاس‌های طول، از نانو تا میکرو، ارتباط ایجاد می‌نماید.

در این فصل ابتدا به تشریح مدل تصحیح‌شده‌ی مکانیک ساختاری مولکولی، بکارگرفته‌شده در این پژوهش پرداخته، و سپس به توصیف شبیه‌سازی اجزای مختلف تشکیل‌دهنده‌ی المان حجمی نماینده می‌پردازیم.

## ۲-۱- مدل تصحیح‌شده‌ی مکانیک ساختاری مولکولی

نظریه‌ی مکانیک مولکولی، ساختار اتمی را به‌صورت یک مجموعه‌ی چندذره‌ای می‌نگرد که در آن هر اتم، تنها با اتم‌های نزدیک به خود برهم‌کنش دارد. برهم‌کنش بین اتم‌های مورد نظر با معادلات ریاضی پتانسیل میدان نیرو، بیان می‌گردد. این نگرش مکانیک مولکولی، امکان استفاده از روش اجزای محدود را در مدل-سازی ساختارهای اتمی، فراهم می‌نماید. برای نمونه، روش مکانیک ساختاری مولکولی [۳۷]، که در آن از

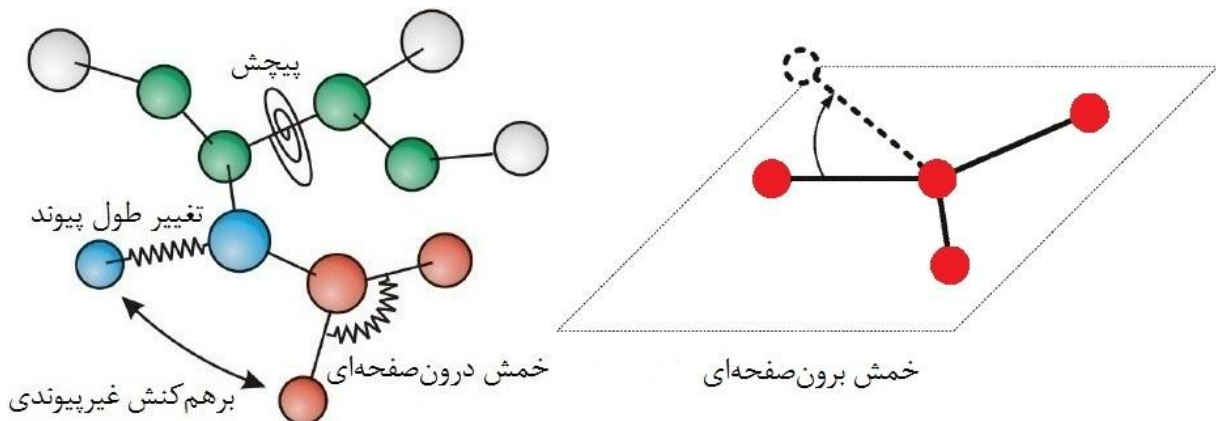
<sup>۱</sup> Micro scale

المان تیر سه‌بعدی با مقطع دایره‌ای برای مدل‌سازی برهم‌کنش اتم‌ها استفاده شد، به دلیل سادگی و دقت مناسب، مورد توجه پژوهش‌گران قرار گرفته است.

این مسأله اهمیت دارد که خصوصیات مربوط به حیطه‌ی اتمی، به صورت پتانسیل‌های بین‌اتمی، به شمار آورده شود، زیرا آنها، روابط بنیادی را برای این دسته از مواد در مقیاس اتمی، تأمین می‌نمایند. پتانسیل‌های بین‌اتمی توصیف می‌نمایند که چگونه برهم‌کنش‌های اتمی، تحت شرایط بارگذاری گوناگون، رفتار می‌نمایند. صورت کلی پتانسیل بین‌اتمی، یا به طور معادل، انرژی یک مولکول، را با صرف نظر از نیروهای ضعیف غیرپیوندی وان‌دروالس و الکترواستاتیک، می‌توان به صورت زیر نشان داد.

$$E_t = E_r + E_\theta + E_\psi + E_\phi \quad 1-2$$

در این رابطه،  $E_r$  نشان‌گر برهم‌کنش دواتمی ناشی از تغییر طول پیوند است،  $E_\theta$  مربوط به برهم‌کنش سه-اتمی است که به تغییر زاویه‌ی پیوند اشاره دارد.  $E_\psi$  و  $E_\phi$  به برهم‌کنش‌های چهاراتمی مربوط می‌باشند که به ترتیب، نمایان‌گر خمش برون صفحه‌ای و پیچش هستند (شکل ۱-۲).



شکل ۱-۲ برهم‌کنش‌های بین‌اتمی.

تعداد زیادی از پژوهش‌ها در مکانیک مولکولی برای پیدا کردن صورت‌های به صورت منطقی وظیفه‌مند این عبارت‌های انرژی پتانسیل، اختصاص یافتند [۵۷ و ۵۸]. بنابراین، صورت‌های وظیفه‌مند متفاوتی برای این عبارت‌های انرژی پتانسیل، وابسته به مواد و شرایط بارگذاری بخصوص در نظر گرفته شده، می‌توانند استفاده شوند. برای نمونه، در تغییر شکل کوچک، تقریب هارمونیک برای توصیف انرژی، مناسب می‌باشد [۵۹].

به منظور ایجاد المان حجمی نماینده برای بررسی رفتار نانوکامپوزیت، در نظر گرفتن اتصال مقیاس‌های پیوسته و اتمی، همراه با ملاحظه غیرخطی بودن برهم‌کنش‌های اتمی، ضروری است. یک المان حجمی نماینده‌ی

غیرخطی سه‌بعدی، به‌منظور مطالعه‌ی پلیمر تقویت‌شده به‌وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی، ایجاد گردید. المان حجمی نماینده شامل سه قسمت می‌باشد:

۱. نانولوله‌ی کربنی

۲. فاز زمینه، که در این پژوهش، پلیمر می‌باشد

۳. فاز میانی، که بین نانولوله و پلیمر قرار داشته و به توصیف رابط‌های میان نانولوله و پلیمر می‌پردازد

ابتدا، پیوندهای کووالانسی کربن-کربن در ساختار نانولوله، به‌وسیله‌ی پتانسیل مورس اصلاح‌شده، توصیف می‌گردند. سپس، برهم‌کنش‌های وان‌دروالس میان اتم‌های نانولوله و پلیمر، توسط پتانسیل لِنارد-جونز، تعریف می‌گردند. این تعریف، اشاره بر فرض ناحیه‌ی فصل‌مشترکی غیرپیوندی دارد.

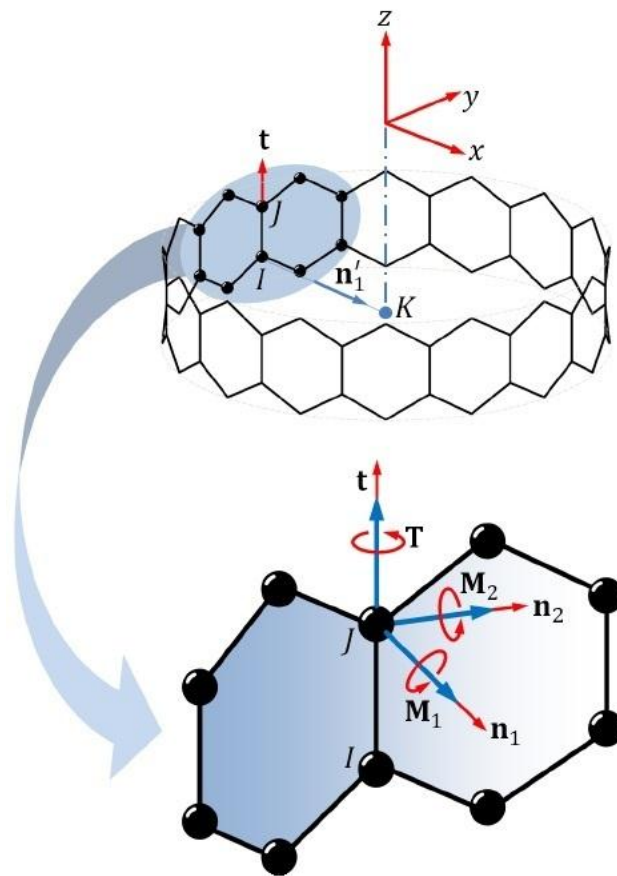
همان‌طور که پیش‌تر بیان گردید، اتم‌های کربن در نانولوله‌های کربنی به‌وسیله‌ی پیوندهای کووالانسی با هم پیوند داشته و یک شبکه‌ی شش‌ضلعی را ایجاد می‌نمایند. این پیوندها، دارای یک طول پیوند مشخصه و زاویه‌ی پیوندی در فضای سه‌بعدی، می‌باشند. تغییرمکان هر یک از اتم‌ها تحت یک نیروی خارجی، به‌وسیله‌ی پیوندها، محدود شده‌است. بنابراین، تغییرمکان کلی نانولوله، نتیجه‌ی برهم‌کنش‌های میان پیوندها، می‌باشد. با در نظر گرفتن پیوندها به‌عنوان المان‌های اتصال‌دهنده‌ی تحمل‌کننده‌ی بار، و نیز اتم‌های کربن به‌عنوان مفصل‌های المان‌ها، نانولوله‌ها را می‌توان به‌صورت ساختارهای قاب فضایی، شبیه‌سازی نمود. در مدل لی و چو [۳۷]، از المان تیر با مقطع دایره‌ای استفاده شد. می‌دانیم که تیر با مقطع دایره‌ای، حول هر محور سطح مقطع خود، دارای ممان اینرسی یکسانی است که در نتیجه، سفتی یکسانی را حول هر محور سطح مقطع خواهد داشت. بنابراین تمایزی میان خمش درون‌صفحه‌ای و برون‌صفحه‌ای در نظر گرفته نشد؛ در صورتی که این دو برهم‌کنش سفتی‌های متفاوتی دارند.

مدل پیشنهادی در این پژوهش، دارای المان تیر با سطح مقطع عمومی است، که جهت‌های اصلی آن با روشی که در ادامه تشریح می‌گردد، تعیین می‌گردند. برخلاف پژوهش‌های قبلی، تعریف یک ماده و استخراج ثابت‌های آن برای المان تیر لازم نیست؛ در نتیجه برای هر کدام از تغییرشکل‌های محوری، خمش درون‌صفحه‌ای، خمش برون‌صفحه‌ای و پیچش، سفتی و نیروهای گرهی مستقلی تعریف خواهند شد.

تعریف جهت‌گیری<sup>۱</sup> سطح مقطع هر المان تیر در سیستم مختصات گلوبال<sup>۲</sup>، ضروری است. مطابق شکل ۲-۲، برای المان تیر بین گره‌های  $I$  و  $J$ ، سیستم مختصات راست‌گرد محلی  $(\mathbf{t}, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$  تعریف می‌گردد.  $\mathbf{t}$  محوری منطبق بر محور تیر است که جهت مثبت آن از گره  $I$  به سمت گره  $J$  می‌باشد. سطح مقطع المان تیر بر این محور  $\mathbf{t}$  عمود می‌باشد. محورهای محلی سطح مقطع تیر با بردارهای  $\mathbf{n}_1$  و  $\mathbf{n}_2$  نمایش داده می‌شوند. فرض کنید که مبدأ سیستم مختصات گلوبال، بر محور نانولوله منطبق باشد. برای تعریف  $\mathbf{n}_1$  و  $\mathbf{n}_2$  از یک گره اضافی  $K$  استفاده می‌شود. گره  $K$  روی محور نانولوله و در  $(0, 0, z_K)$  قرار دارد، که  $z_K = z_I$  بردار  $\mathbf{n}'_1$  از گره  $I$  به گره  $K$  تعریف می‌شود. اکنون بردارهای  $\mathbf{n}_1$  و  $\mathbf{n}_2$  با استفاده از روابط زیر ایجاد می‌گردند.

$$\mathbf{n}_2 = \mathbf{t} \times \mathbf{n}'_1, \quad \mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_2 \times \mathbf{t}$$

۲-۲



شکل ۲-۲ محورهای راست‌گرد محلی  $(\mathbf{t}, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$  بر روی المان تیر.

<sup>۱</sup> Orientation

<sup>۲</sup> Global

در شکل ۲-۲ مختصات  $(t, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$  برای یک المان موازی محور نانولوله‌ی زیگزاگ، دیده می‌شود. روشن است که در حالت کلی،  $\mathbf{n}_2$  مماس بر نانولوله و  $\mathbf{n}_1$  عمود بر آن خواهد بود. در نتیجه، خمش حول  $\mathbf{n}_1$  و  $\mathbf{n}_2$  به ترتیب، متناظر با خمش درون صفحه‌ای و خمش برون صفحه‌ای خواهد بود.

## ۲-۲- مدل سازی پیوسته‌ی نانومقیاس از نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی مانند ساختار یک قاب فضایی مدل سازی می‌شوند. در این مدل، هر المان تیر به یک پیوند شیمیایی منحصربه‌فرد در نانولوله‌ها، مربوط می‌باشد، و گره‌ها، نماینده‌ی اتم‌های کربن، در مدل می‌باشند، که موقعیت آنها به وسیله‌ی مختصات اتمی اتم‌های کربن نظیر آنها در نانولوله، تعیین می‌گردد. این ساختار قاب فضایی اجازه می‌دهد تا رفتار مکانیکی نانولوله بر حسب جابه‌جایی‌های اتم‌ها، به دقت مدل سازی گردد.

پتانسیل بین‌اتمی مورس اصلاح شده، به منظور استخراج الگوهای مناسب برای معرفی‌هایی پیوسته<sup>۱</sup> از برهم-کنش‌های اتمی در نانولوله‌ها، مورد استفاده قرار گرفت. این پتانسیل، به خوبی برای توصیف رفتار پیوند کووالانسی کربن-کربن، مناسب گشته‌است، و توسط تعدادی از پژوهش‌گران، هم برای شبیه‌سازی‌های کاملاً اتمی [۶۰ و ۶۱]، و هم برای شبیه‌سازی‌های پیوسته‌ی برپایه‌ی اتمی [۶۲ و ۶۳]، استفاده شده‌است. این پتانسیل،  $E$ ، از دو بخش تشکیل می‌شود، قسمت تغییر طول پیوند<sup>۲</sup>،  $E_s$ ، و قسمت خمش<sup>۳</sup>،  $E_b$ ، به صورت:

$$E = E_s + E_b \quad ۳-۲$$

$$E_s = D_e \left( [1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1 \right) \quad ۴-۲$$

$$E_b = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{\text{sextic}} (\theta - \theta_0)^4] \quad ۵-۲$$

که  $r$  فاصله‌ی میان اتم‌های کربن،  $r_0$  طول تعادلی پیوند،  $D_e$  انرژی گسستگی<sup>۴</sup>،  $k_\theta$  سفتی در خمش،  $\theta$  زاویه‌ی فعلی پیوند با پیوند مجاور،  $\theta_0$  زاویه‌ی تعادلی پیوند با پیوند مجاور می‌باشند، و  $\beta$  نیز یک عدد ثابت است که پهنای<sup>۵</sup> پتانسیل را کنترل می‌نماید. پارامترهای استفاده شده در این پژوهش برای پتانسیل، همان پارامترهایی می‌باشند که توسط بلیتشکو و همکاران [۶۰] اتخاذ گردیده و در جدول ۱-۲ ارائه می‌شوند.

<sup>۱</sup> Continuum representations

<sup>۲</sup> Bond-stretching

<sup>۳</sup> Angle-bending

<sup>۴</sup> Dissociation energy

<sup>۵</sup> Width

تزرپس و همکاران [۵۲] پیشنهاد نمودند که از بخش مربوط به خمش پتانسیل مورس اصلاح‌شده، می‌توان صرف‌نظر نمود. اما کشف شده‌است که این بخش به پایداری ابتدایی نانولوله، کمک می‌نماید. بدون افزودن بخش مربوط به خمش، نانولوله متحمل وضعیت ناپایداری خواهد گشت و تمایل به فروپاشی روی خودش، را دارد [۶۰ و ۶۴].

اکنون با مشتق‌گیری از رابطه‌ی ۲-۴ نسبت به  $r$ ، رابطه‌ی نیرو برحسب تغییر طول پیوند به‌صورت زیر تعیین می‌گردد.

$$F = 2\beta D_e [1 - e^{-\beta(r-r_0)}] e^{-\beta(r-r_0)} \quad ۶-۲$$

به‌همین صورت با مشتق‌گیری از رابطه‌ی ۲-۵ نسبت به  $\theta$ ، رابطه‌ی ممان برحسب تغییر زاویه‌ی پیوند به‌صورت زیر تعیین می‌گردد.

$$M = k_\theta (\theta - \theta_0) [1 + 3k_{\text{sextic}} (\theta - \theta_0)^4] \quad ۷-۲$$

جدول ۱-۲ پارامترهای پتانسیل مورس اصلاح‌شده [۶۰].

اندازه	پارامتر
۰/۱۴۲۱	$r_0$ (nm)
۰/۶۰۳۱۰۵	$D_e$ (nN nm)
۲۶/۲۵	$\beta$ (nm <sup>-1</sup> )
۲/۰۹۴	$\theta_0$ (rad)
۰/۹	$k_\theta$ (nN nm rad <sup>-2</sup> )
۰/۷۵۴	$k_{\text{sextic}}$ (rad <sup>-4</sup> )

با توجه به تعریف کرنش حقیقی<sup>۱</sup> خواهیم داشت.

$$\varepsilon = \ln \frac{r}{r_0} \quad ۸-۲$$

شکل ۲-۳ رابطه‌ی میان نیرو (رابطه‌ی ۲-۶) و کرنش حقیقی (رابطه‌ی ۲-۸) را برای پیوند کربن-کربن نشان می‌دهد. همان‌طور که از این نمودار قابل مشاهده است، رابطه‌ی نیرو-کرنش در ناحیه‌ی کشش، به‌ویژه در کرنش‌های بالا، به‌شدت غیرخطی می‌باشد.

<sup>۱</sup> True strain

شکل ۲-۴ نیز، رابطه‌ی میان گشتاور (رابطه‌ی ۲-۷) و تغییر زاویه‌ی میان پیوند با پیوند مجاور، را برای پیوند کربن-کربن نشان می‌دهد.

همان‌طور که پیش‌تر بیان گردید، برای مدل‌سازی پیوندهای کربن-کربن در نانولوله‌های کربنی از المان تیر با مقطع عمومی استفاده می‌شود. المان تیر سه‌بعدی *B31* در نرم‌افزار اباکس<sup>۱</sup> با تابع درون‌یابی خطی به کار گرفته شد. این المان دارای ۲ گره بوده و هر گره آن دارای ۶ درجه آزادی (انتقال در راستای ۳ محور، و دوران حول ۳ محور) است، که در نتیجه المان دارای ۱۲ درجه آزادی خواهد بود.

به منظور تعریف رفتار المان تیر، ابتدا الگوهای مناسب، که ویژگی‌های پتانسیل مورس اصلاح‌شده را به درستی بیان نمایند، استنتاج می‌گردند. پتانسیل تغییر طول هر پیوند، قسمت تغییر طول پیوند پتانسیل مورس اصلاح‌شده، باید مطابق با تغییر طول المان تیر متناظر باشد. بنابراین، با استفاده از داده‌های شکل ۲-۲، رفتار المان تیر را در بارگذاری نیروی محوری، تعریف می‌نماییم. پتانسیل خمش هر پیوند، قسمت خمش پتانسیل مورس اصلاح‌شده، باید مطابق با خمش درون‌صفحه‌ای المان تیر متناظر باشد. بنابراین، با استفاده از داده‌های شکل ۲-۴، رفتار المان تیر را در بارگذاری خمش درون‌صفحه‌ای، مشخص می‌نماییم. بدین ترتیب، رفتار غیرخطی پیوندهای کربن-کربن در تغییر طول پیوند و خمش درون‌صفحه‌ای، که توسط پتانسیل بین-اتمی مورس اصلاح‌شده تشریح شد، به المان‌های تیر اختصاص داده می‌شوند.

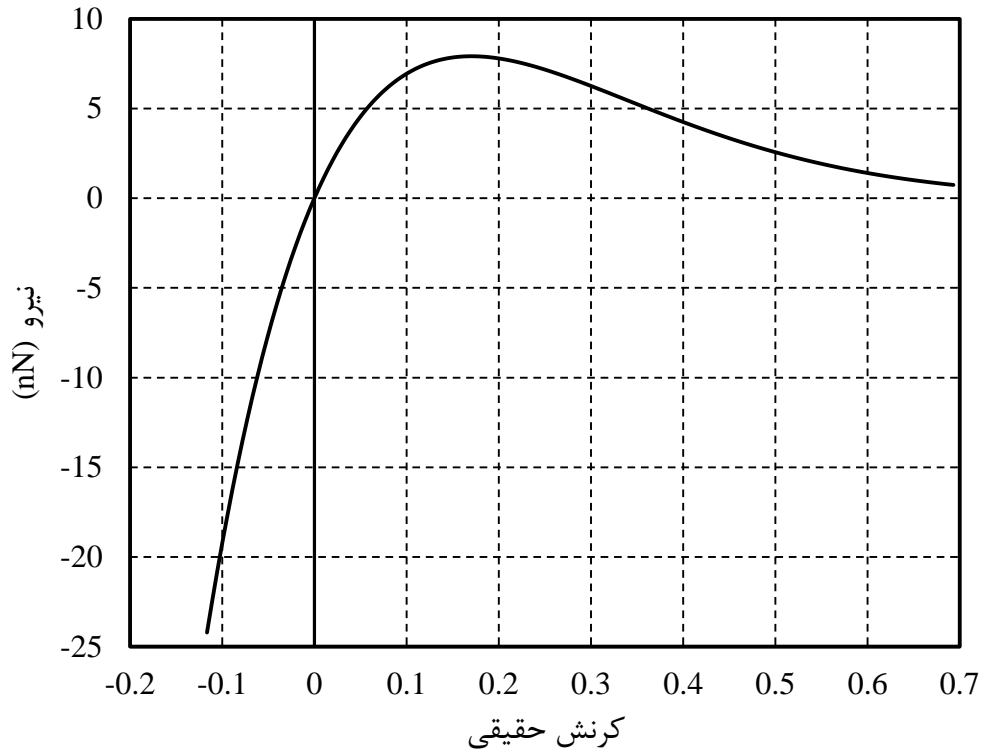
سفتی‌های مربوط به خمش برون‌صفحه‌ای و پیچش مناسب پیوند کربن-کربن، برای اختصاص به المان تیر، بر مبنای صورت هارمونیک پتانسیل‌های میدان نیرو، به دست می‌آیند. بنابراین، عبارتهای  $E_\psi$  و  $E_\varphi$  را به صورت‌های زیر خواهیم داشت.

$$E_\psi = \frac{1}{2} k_I (\Delta\psi)^2 \quad ۹-۲$$

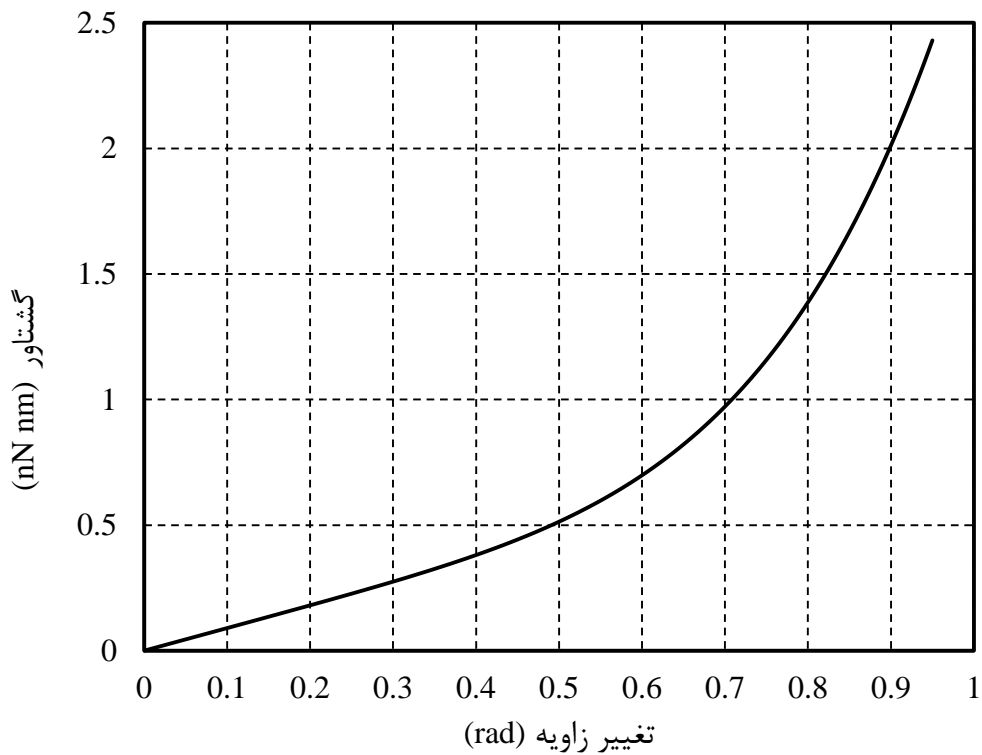
$$E_\varphi = \frac{1}{2} k_T (\Delta\varphi)^2 \quad ۱۰-۲$$

در روابط ۲-۹ و ۲-۱۰،  $\Delta\psi$  و  $\Delta\varphi$ ، به ترتیب، تغییر زاویه‌ی پیوند در خمش برون‌صفحه‌ای و تغییر زاویه‌ی پیچش پیوند می‌باشند،  $k_I$  و  $k_T$  نیز به ترتیب، سفتی در خمش برون‌صفحه‌ای و سفتی در پیچش می‌باشند، که در جدول ۲-۲ ارائه می‌شوند.

<sup>۱</sup> ABAQUS software



شکل ۳-۲ منحنی نیرو-کرنش پیوند کربن-کربن تحت بارگذاری نیروی محوری، به دست آمده از پتانسیل مورس اصلاح شده.



شکل ۴-۲ منحنی گشتاور-تغییر زاویه پیوند کربن-کربن تحت بارگذاری خمشی، به دست آمده از پتانسیل مورس اصلاح شده.



جدول ۲-۲ سفتی‌های خمش برون صفحه‌ای و پیچش [۶۵ و ۶۶].

اندازه	پارامتر
۰/۲۷۸	$k_I$ (nN nm)
۰/۲۷۸	$k_T$ (nN nm)

اکنون رابطه‌ای میان ثابت‌های نیرویی در مکانیک مولکولی با پارامترهای سفتی المان تیر در مکانیک ساختاری، برقرار می‌نماییم. به این دلیل که تغییرشکل یک قاب فضایی سبب ایجاد تغییرات در انرژی‌های کرنشی می‌گردد، می‌توان پارامترهای سفتی را براساس هم‌ارزی انرژی‌های ناشی از برهم‌کنش‌های بین‌اتمی و انرژی‌های ناشی از تغییرشکل المان تیر قاب فضایی، تعیین نمود.

از این‌رو، مطابق مکانیک ساختاری کلاسیک، انرژی کرنشی یک تیر یکنواخت به طول  $L$  تحت گشتاور خمشی  $M$  برابر است با:

$$E_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad ۱۱-۲$$

که  $EI$  صلابت خمشی تیر، و  $\alpha$  زاویه چرخش در هر یک از دو انتهای تیر را مشخص می‌نماید.

همچنین، انرژی کرنشی یک تیر یکنواخت به طول  $L$  تحت گشتاور پیچشی  $T$  برابر است با:

$$E_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad ۱۲-۲$$

که  $GJ$  صلابت پیچشی تیر، و  $\Delta\beta$  دوران نسبی دو انتهای تیر را مشخص می‌نماید.

می‌توان ملاحظه نمود که در روابط ۹-۲ و ۱۱-۲،  $E_M$  و  $E_\psi$  انرژی خمشی را بیان می‌نمایند، و در روابط ۲-۱۰ و ۱۲-۲،  $E_T$  و  $E_\phi$  انرژی پیچشی را نمایش می‌دهند. همچنین در روابط ۹-۲ و ۱۱-۲، منطقی است که زاویه‌ی دوران  $2\alpha$  را با تغییر کلی  $\Delta\psi$  زاویه‌ی پیوند، مساوی فرض نماییم، و نیز در روابط ۲-۱۰ و ۱۲-۲،  $\Delta\phi$  را با  $\Delta\beta$  هم‌ارز بدانیم. اکنون با مقایسه‌ی روابط ۹-۲ و ۱۱-۲، و نیز روابط ۲-۱۰ و ۱۲-۲، با یکدیگر، یک رابطه‌ی مستقیم میان پارامترهای مکانیک ساختاری  $EI$  و  $GJ$  با پارامترهای مکانیک مولکولی  $k_I$  و  $k_T$  به صورت زیر استنباط می‌گردد.

$$\frac{EI}{L} = k_I, \quad \frac{GJ}{L} = k_T \quad ۱۳-۲$$

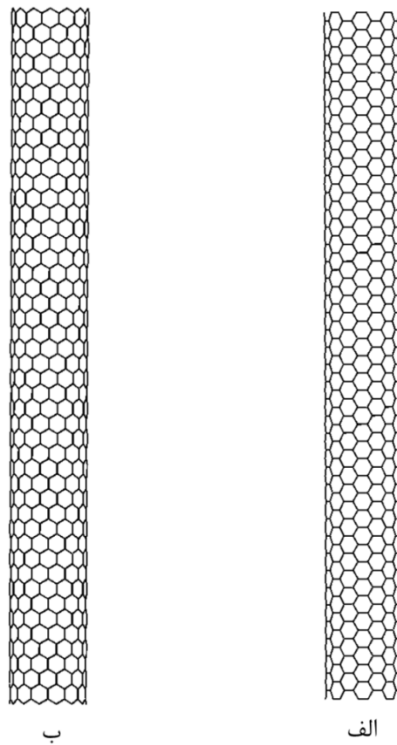
با توجه به اینکه طول المان تیر در مدل‌سازی نانولوله، همان طول پیوند کربن-کربن می‌باشد، و همچنین مقادیر  $k_I$  و  $k_T$  نیز معلوم می‌باشند (بیش‌تر بیان گردید)، به راحتی، صلابت المان تیر در خمش برون-

صفحه‌ای،  $EI$ ، و صلابت پیچشی المان تیر،  $GJ$ ، با استفاده از رابطه‌ی ۲-۱۳ مشخص می‌گردند. اکنون رفتار پیوند کربن-کربن تحت تغییرشکل‌های تغییرطول پیوند، خمش درون‌صفحه‌ای، خمش برون‌صفحه‌ای و پیچش، برای اختصاص به المان تیر، معین شده‌است.

با استفاده از برنامه‌ی نوشته‌شده در نرم‌افزار متلب<sup>۱</sup> نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ با اندیس‌های دست‌سان مختلف و با طول‌های مورد نظر، را می‌توان ایجاد نمود. این‌طور که، خروجی این برنامه، فایل ورودی<sup>۲</sup> به نرم-افزار اباکس می‌باشد. برای کسب اطمینان از اینکه طول نانولوله،  $L_{CNT}$ ، اثر ناچیزی روی نتایج داشته باشد، طول آنها با در نظر گرفتن شرط  $\frac{L_{CNT}}{r_{CNT}} > 10$  انتخاب شد [۶۷]، که  $r_{CNT}$  شعاع نانولوله می‌باشد. در این پژوهش، نانولوله‌های آرمچیر (۵، ۵)، (۶، ۶)، (۷، ۷)، (۸، ۸)، (۹، ۹)، (۱۰، ۱۰) و (۱۱، ۱۱)، همراه با نانولوله‌های زیگزاگ (۰، ۹)، (۰، ۱۰)، (۰، ۱۲)، (۰، ۱۴)، (۰، ۱۶)، (۰، ۱۷) و (۰، ۱۹)، که به ترتیب با نانولوله‌های آرمچیر ذکر شده در بالا، تقریباً قطر یکسانی دارند، با طول تقریبی ۱۰ nm ایجاد شدند. برای نمونه، مدل اجزای محدود نانولوله‌های آرمچیر (۸، ۸) و زیگزاگ (۰، ۱۴)، که تقریباً قطر یکسانی دارند، با طول تقریبی ۱۰ nm، در شکل ۲-۵ ارائه می‌شوند.

<sup>۱</sup> MATLAB software

<sup>۲</sup> Input file



شکل ۲-۵ مدل اجزای محدود نانولوله‌های الف) آرمچیر (۸، ۸)، و ب) زیگزاگ (۱۴، ۰).

### ۲-۳- مدل‌سازی پیوسته از پلیمر

سرچشمه‌ی کلمه پلیمر از کلمات یونانی پلی و مر است. پلی به معنای خیلی، و مر به معنای اجزا، می‌باشند. بنابراین پلیمر به معنای چیزی است که از اجزای زیاد یا واحدهای تکرار<sup>۱</sup>، تشکیل شده‌است. یک پلیمر متشکل از تعداد زیادی از واحدها است، که توسط پیوندهای کووالانسی کربن-کربن به هم متصل می‌باشند. از آنجایی که جزء حجمی نانولوله‌ها در کامپوزیت، پایین است، در نتیجه، حجم زمینه‌ی پلیمر بسیار بالاتر از حجم نانولوله‌ها در مقیاس مولکولی است. این بدان معنی است که شبیه‌سازی زنجیره‌های پلیمر با استفاده از مدل‌سازی اتمی، نیازمند مقدار بسیار زیادی از اتم‌ها و نیز حجم وسیعی از محاسبات است. به‌طور کلی، روش-های مدل‌سازی اتمی محدود به مدل‌نمودن سیستم‌ها با مقیاس طولی کوچک، می‌باشند و از شبیه‌سازی سیستم‌هایی شامل تعداد زیادی از اتم‌ها، رنج می‌برند. بنابراین، مدل‌سازی پلیمر به‌صورت پیوسته<sup>۲</sup> صورت می‌گیرد. به بیان دیگر، یک رویکرد مدل‌سازی چندمقیاسه بکارگرفته می‌شود، به‌صورتی که نانولوله‌ها در مقیاس نانو و پلیمر در مقیاس میکرو مدل می‌شوند.

<sup>۱</sup> Repeat units

<sup>۲</sup> Continuum

المان  $CCL12$  در نرم‌افزار اباکس برای ایجاد مدل اجزای محدود سه‌بعدی پلیمر به کار گرفته شد. این المان، از نوع المان‌های توپر استوانه‌ای<sup>۱</sup> است که ۱۲ گره دارد، و دارای درون‌یابی خطی در سطح شعاعی، و نیز درون-یابی مثلثاتی در امتداد جهت محیطی می‌باشد. پلیمری که در این پژوهش برای مدل‌سازی مورد نظر است، یک نوع پلی‌پروپیلن تک‌آرایش بی‌شکل<sup>۲</sup> می‌باشد. رفتار الاستوپلاستیک<sup>۳</sup> پلی‌پروپیلن برای مدل‌سازی آن در کرنش‌های بزرگ، مورد توجه قرار گرفت. رایج‌ترین معرفی از پاسخ پلاستیک مواد، رابطه‌ی لودویک-هولومون<sup>۴</sup> می‌باشد، که عبارت است از:

$$\sigma = \sigma_y + h\varepsilon_p^n \quad 14-2$$

که  $\sigma$  تنش،  $\sigma_y$  تنش تسلیم،  $h$  شاخص استحکام،  $\varepsilon_p$  کرنش پلاستیک، و  $n$  نمای سخت‌شوندگی<sup>۵</sup> می‌باشند. رفتار پلاستیک ماده، به‌طور مؤثری از طریق این رابطه قابل توصیف می‌باشد. یانگ و همکاران [۶۸] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، منحنی تنش-کرنش پلی‌پروپیلن خالص را به دست آوردند. سپس آنها مدول یانگ و مدول برشی، برای توصیف رفتار الاستیک پلی‌پروپیلن، همراه با پارامترهای مورد نیاز رابطه‌ی ۱۴-۲، برای توصیف رفتار پلاستیک پلی‌پروپیلن، را معین نمودند، که در جدول ۳-۲ ارائه می‌گردند.

جدول ۳-۲ پارامترهای مورد نیاز برای توصیف رفتار الاستوپلاستیک پلی‌پروپیلن [۶۸].

$E$ (GPa)	$G$ (GPa)	$\sigma_y$ (MPa)	$h$ (MPa)	$n$
۱/۳۷۹	۰/۵۲	۴۱	۱۵/۹۱	۰/۰۹۲

اکنون، منحنی تنش-کرنش پلاستیک پلی‌پروپیلن با استفاده از رابطه‌ی ۱۴-۲ و پارامترهای داده‌شده در جدول ۳-۲، در شکل ۶-۲ ارائه می‌گردد.

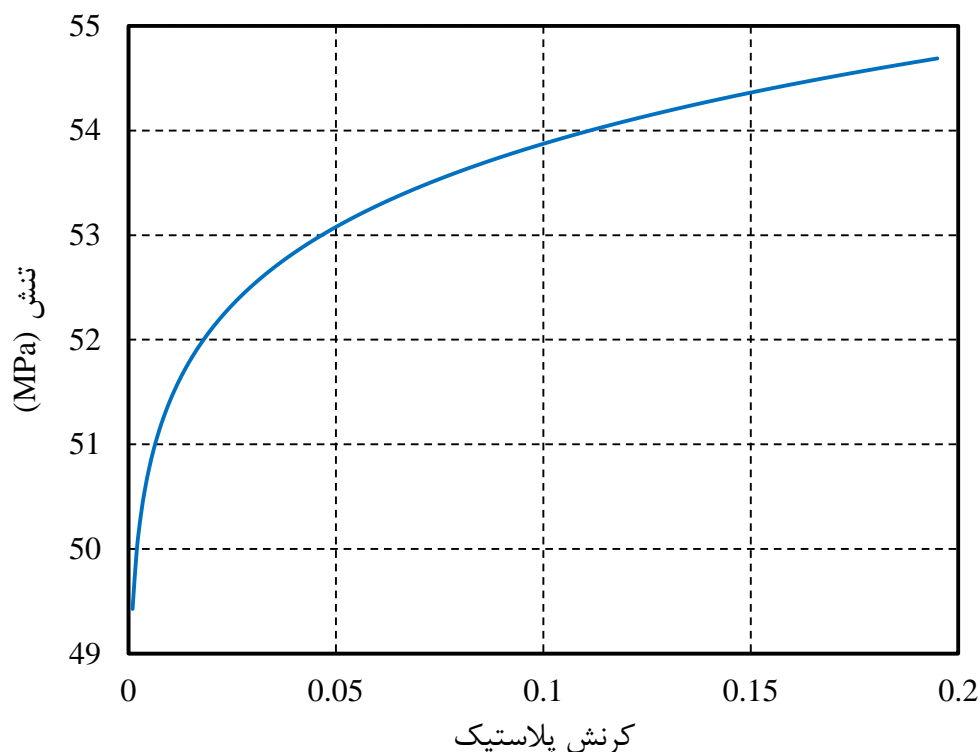
<sup>۱</sup> Cylindrical solid element

<sup>۲</sup> Amorphous isotactic polypropylene

<sup>۳</sup> Elastoplastic

<sup>۴</sup> Ludwik-Hollomon's equation

<sup>۵</sup> Strain hardening exponent



شکل ۲-۶ منحنی تنش-کرنش پلاستیک پلی‌پروپیلن.

با معلوم‌بودن داده‌های تنش-کرنش پلاستیک نمودار شکل ۲-۶، همراه با مدول یانگ داده‌شده در جدول ۲-۳، می‌توان رفتار الاستوپلاستیک پلی‌پروپیلن را به المان‌های مورد نظر برای شبیه‌سازی پلیمر، اختصاص داد. با توجه به استفاده از المان حجمی نماینده استوانه‌ای شکل، مدل‌سازی پلیمر در نرم‌افزار اباکس به صورت یک استوانه‌ی توخالی صورت می‌پذیرد. برحسب نانولوله‌ی کربنی استفاده‌شده در المان حجمی نماینده، شعاع داخلی پلیمر تعیین می‌گردد. مدل‌سازی دینامیک مولکولی از نانوکامپوزیت تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره نشان داد که چگالی قرارگیری اتم‌های پلیمر در اطراف اتم‌های نانولوله، در فاصله‌ی حدود  $0.34$  نانومتری به بیشترین مقدار خود می‌رسد [۶۹]. بنابراین شعاع داخلی پلیمر برابر شعاع نانولوله بعلاوه‌ی  $0.34$  nm، در نظر گرفته می‌شود.

اگر نانولوله‌ها را به صورت استوانه‌های توخالی تصور نماییم، ضخامت دیواره‌ی آنها به اندازه‌ی فاصله‌ی بین-لایه‌ای گرافیت،  $0.34$  nm، در نظر گرفته می‌شود [۷۰]. مرکز اتم‌های کربن در نانولوله‌ها در وسط ضخامت آنها قرار داده می‌شود، با این تعریف، شعاع بیرونی نانولوله،  $r_{o,CNT}$ ، و شعاع داخلی نانولوله،  $r_{i,CNT}$ ، به این صورت تعریف می‌گردند.

$$r_{o,CNT} = r_{CNT} + \frac{0.34}{2}, \quad r_{i,CNT} = r_{CNT} - \frac{0.34}{2}$$

جزء حجمی<sup>۱</sup> نانولوله در نانوکامپوزیت،  $V_f$ ، نیز با استفاده از رابطه‌ی زیر تعیین می‌گردد [۱۴]:

$$V_f = \frac{r_{o,CNT}^2 - r_{i,CNT}^2}{R_{o,RVE}^2 - r_{i,CNT}^2} \quad ۱۶-۲$$

که  $R_{o,RVE}$  شعاع بیرونی المان حجمی نماینده، همان شعاع بیرونی پلیمر، می‌باشد. بدین ترتیب، با انتخاب مقدار جزء حجمی نانولوله، از طریق رابطه‌ی ۱۶-۲ شعاع بیرونی پلیمر،  $R_{o,RVE}$ ، به دست می‌آید. با معلوم بودن شعاع‌های داخلی و بیرونی پلیمر، مدل‌سازی آن به صورت یک استوانه‌ی توخالی با طول تقریبی ۵ nm و با جزء‌های حجمی ۰.۱٪، ۰.۵٪ و ۱.۰٪ از نانولوله‌ها، در نرم‌افزار اباکس صورت پذیرفت.

در مش‌بندی مدل پلیمر، اندازه‌ی المان استوانه‌ای در راستای محوری، برابر با طول حلقه‌های شش‌ضلعی<sup>۲</sup> نانولوله‌های کربنی در راستای محور نانولوله در نظر گرفته می‌شود. هر حلقه‌ی شش‌ضلعی دور مدل استوانه‌ای نانولوله قرار دارد و شمارش حلقه‌ها در امتداد محور نانولوله صورت می‌گیرد. راهبرد مش‌بندی در راستای محیطی مدل استوانه‌ای پلیمر به این صورت در نظر گرفته شد که برای نانولوله‌ی آرمچیر  $(n, n)$  تعداد  $2n$  المان در راستای محیطی استوانه، و برای نانولوله‌ی زیگزاگ  $(n, 0)$  تعداد  $n$  المان در راستای محیطی استوانه قرار می‌گیرد. شکل ۲-۷ مدل اجزای محدود نانولوله‌ی آرمچیر  $(5, 5)$  با طول تقریبی ۵ nm را نشان می‌دهد. همان‌طور که از این شکل دیده می‌شود، این مدل دارای ۲۰ حلقه‌ی شش‌ضلعی است.

شکل ۲-۸ نیز مدل اجزای محدود پلیمر را نمایش می‌دهد. این مدل اجزای محدود از پلیمر به منظور ایجاد المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر  $(5, 5)$  ایجاد گشت. همان‌طور که از شکل ۲-۸ دیده می‌شود، تعداد المان‌ها در راستای محور استوانه به اندازه‌ی تعداد حلقه‌های شش‌ضلعی نانولوله‌ی آرمچیر  $(5, 5)$  با طول تقریبی ۵ nm، ۲۰ عدد، در نظر گرفته شد. همچنین با توجه به استفاده از نانولوله‌ی آرمچیر  $(5, 5)$ ، تعداد ۱۰ المان در راستای محیطی قرار گرفت.

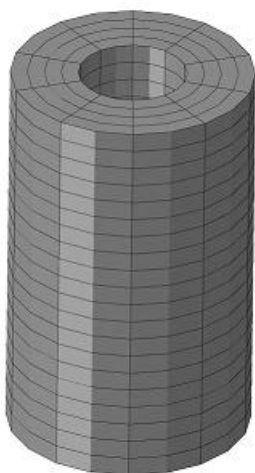
شکل ۲-۹ مدل اجزای محدود پلیمر، همراه با نانولوله‌ی آرمچیر  $(5, 5)$  قرار گرفته در داخل مدل پلیمر را نشان می‌دهد، تا بدین ترتیب المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر  $(5, 5)$  تشکیل گردد.

<sup>۱</sup> Volume fraction

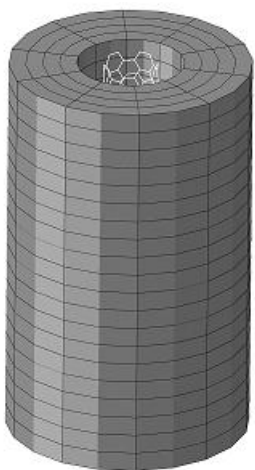
<sup>۲</sup> Hexagonal rings



شکل ۷-۲ مدل اجزای محدود نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵).



شکل ۸-۲ مدل اجزای محدود پلیمر، ایجاد شده برای کسب جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵).



شکل ۹-۲ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵).

۴-۲- مدل سازی پیوسته‌ی نانومقیاس از فصل مشترک

از عوامل مهم در ایجاد یک المان حجمی نماینده‌ی درست، دقیق و منطقی، معرفی مناسب و شایسته‌ی فصل مشترک میان نانولوله و زمینه می‌باشد. شیوه‌های گوناگونی برای مشخص نمودن مکانیزم‌ها و اندازه‌ی انتقال بار میان یک نانولوله و زمینه، می‌توانند پذیرفته شوند. ویژگی‌های فصل مشترکی میان نانولوله‌ها و زمینه، همچنان مبهم و نامعلوم است، و پژوهش‌گران محدوده‌ی گسترده‌ای از تنش‌های برشی سطح-مشترکی<sup>۱</sup> را گزارش نموده‌اند. به‌رحال، نانولوله‌های کربنی تقویت‌کننده، با زمینه اطراف خود، بیشتر از طریق برهم‌کنش‌های وان‌دروالس، برهم‌کنش دارند [۷۱]. بنابراین، در این پژوهش، برهم‌کنش‌های وان-دروالس در نظر گرفته شدند.

به‌منظور شبیه‌سازی برهم‌کنش‌های وان‌دروالس، از المان‌های فنر غیرخطی رابط<sup>۲</sup>، *CONN3D2* در نرم‌افزار اباکس، استفاده می‌گردد، به‌صورتی که هر برهم‌کنش توسط یک المان رابط معرفی می‌شود. هر المان رابط از یک اتم کربن در نانولوله به یک گره واقع در سطح داخلی مدل اجزای محدود پلیمر، ادامه می‌یابد. به‌دلیل سادگی و وابستگی یگانه‌ی آن به فاصله‌ی بین‌اتمی، رایج‌ترین توصیف برهم‌کنش‌های وان‌دروالس با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز<sup>۳</sup> بوده‌است. پتانسیل لنارد-جونز به این صورت تعریف می‌گردد:

$$E_{LJ} = 4\mu \left[ \left( \frac{\psi}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\psi}{r} \right)^6 \right] \quad ۱۷-۲$$

که  $\mu$  عمق چاه پتانسیل، کمترین مقدار پتانسیل، و  $\psi$  شعاع کره‌ی سخت اتم، فاصله‌ای که در آن  $E_{LJ}$  صفر است، و  $r$  فاصله‌ی بین دو اتم، می‌باشند. اکنون با مشتق‌گیری از رابطه‌ی ۱۷-۲ نسبت به  $r$ ، نیروی وان-دروالس،  $F_{vdw}$ ، معین می‌گردد.

$$F_{vdw} = - \frac{dE_{LJ}}{dr} = 24 \frac{\mu}{\psi} \left[ 2 \left( \frac{\psi}{r} \right)^{13} - \left( \frac{\psi}{r} \right)^7 \right] \quad ۱۸-۲$$

برهم‌کنش‌های میان اتم‌های کربن در نانولوله با اتم‌های کربن در پلیمر، همراه با برهم‌کنش‌های میان اتم‌های کربن در نانولوله با سایر اتم‌ها، مانند گروه‌های هیدروژن در پلیمر، باید در نظر گرفته شود. اما از آنجایی که تفاوت‌های ناچیزی میان پارامترهای لنارد-جونز مربوط به زوج اتم‌های مختلف وجود دارد، در این پژوهش پارامترهای لنارد-جونز مربوط به برهم‌کنش کربن-کربن در نظر گرفته شد که عبارتند از

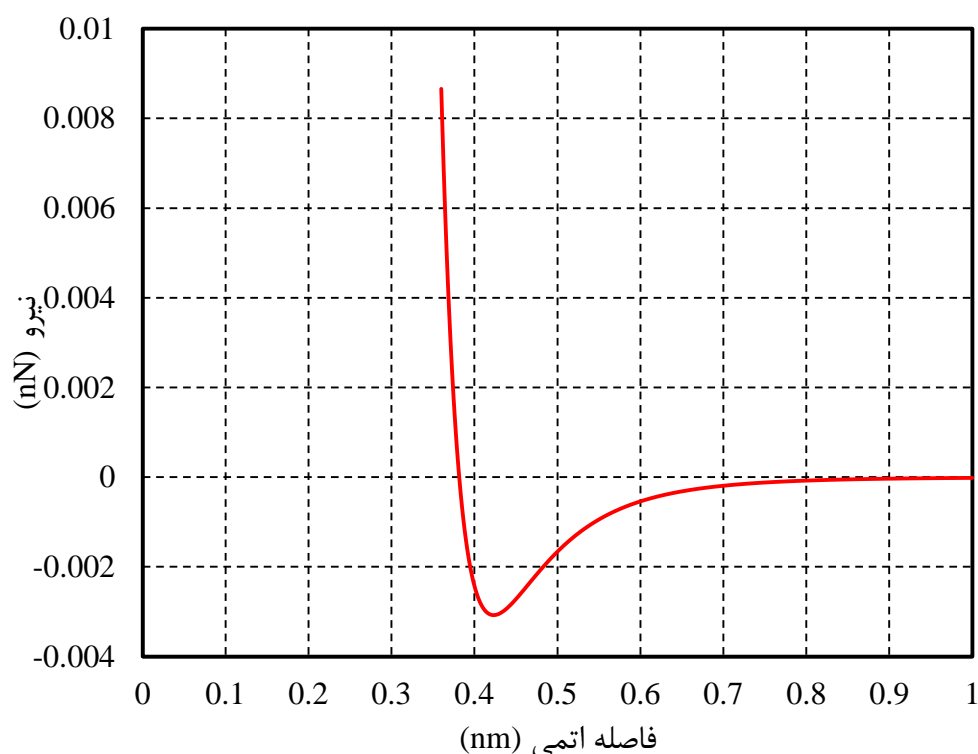
<sup>۱</sup> Interfacial shear stresses

<sup>۲</sup> Connector

<sup>۳</sup> Lennard-Jones potential



فاصله‌ی بین‌اتمی  $0.36$  تا  $1$  نانومتر نشان می‌دهد.  $\mu = 4.364 \times 10^{-4}$  (nN nm) و  $\psi = 0.34$  (nm) [۷۲]. شکل ۲-۱۰، نمودار رابطه‌ی ۲-۱۸ را در

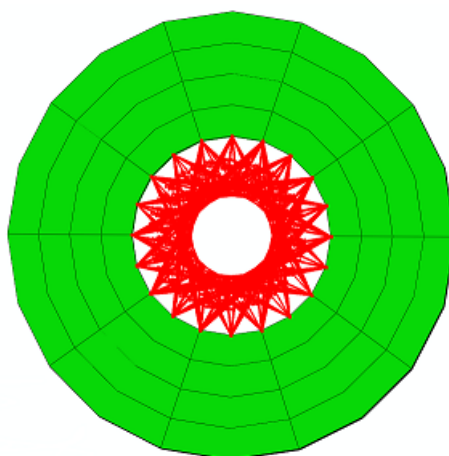


شکل ۲-۱۰ نمودار نیروی وان‌دروالس برحسب فاصله‌ی بین‌اتمی.

همان‌طور که از شکل ۲-۱۰ مشاهده می‌شود، با نزدیک شدن اتم‌ها به یکدیگر، نیروی وان‌دروالس به شدت افزایش یافته و سعی دارد که آنها را از هم دور نماید. با بیشتر شدن فاصله‌ی میان اتم‌ها، نیروی وان‌دروالس کاهش می‌یابد، تا جایی که در  $r = 0.3816$  (nm)، نیروی وان‌دروالس صفر خواهد شد، و این همان فاصله‌ی ای از اتم‌ها است که کمترین مقدار پتانسیل در آن اتفاق می‌افتد. پس از عبور از این نقطه، علامت نیروی وان‌دروالس منفی می‌گردد، یعنی نیروی بین‌اتمی از حالت دافعه به حالت جاذبه تغییر می‌یابد. همچنین واضح است که از فاصله‌ی بین‌اتمی حدود  $0.8$  nm و بالاتر از آن رفته‌رفته اندازه‌ی نیروی وان‌دروالس به عدد صفر نزدیک می‌شود.

با استفاده از برنامه‌ی نوشته‌شده در نرم‌افزار متلب المان‌های وان‌دروالس ایجاد می‌گردند. به‌صورتی که، اگر فاصله‌ی میان هر گره مدل اجزای محدود نانولوله با هر یک از گره‌های سطح داخلی مدل اجزای محدود پلیمر، کمتر از  $2/5\psi$  یعنی  $0.85$  nm باشد، المان وان‌دروالس میان آن گره نانولوله و گره پلیمر تشکیل می‌گردد. شکل ۲-۱۱ المان‌های وان‌دروالس ایجادشده میان گره‌های سطح داخلی مدل اجزای محدود پلیمر

و گره‌های مدل اجزای محدود نانولوله، همان اتم‌های کربن نانولوله، را در نمای بالای مدل المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵) نشان می‌دهد.



شکل ۲-۱۱ نمایش المان‌های وان‌دروالس ایجادشده میان گره‌های سطح داخلی پلیمر و اتم‌های کربن نانولوله، در مدل المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵).

به دلیل تعداد بالای المان‌های وان‌دروالس ایجادشده در المان‌های حجمی نماینده‌ی گوناگون، در شکل‌های مربوط به نتایج، در فصل بعد، این المان‌ها نمایش داده نمی‌شوند، چون در نمایش اجزای دیگر، و نیز تفکیک میان اجزای مختلف المان حجمی نماینده، اختلال ایجاد می‌نمایند. داده‌های مربوط به نیرو-فاصله‌ی بین‌اتمی، به دست آمده از رابطه‌ی ۲-۱۸، در محدوده‌ی فاصله‌ی بین‌اتمی مورد نظر، به المان‌های وان‌دروالس اختصاص می‌یابند. نتایج مربوط به تحلیل نانولوله‌ها و نانوکامپوزیت‌ها در فصل آینده ارائه می‌شوند.



## فصل ۳ نتایج

در این فصل، ابتدا نتایج مربوط به رفتار غیرخطی نانولوله‌های کربنی در شرایط بارگذاری کششی، پیچشی و خمشی ارائه می‌گردند. سپس المان حجمی نماینده به‌طور کلی مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این حالت، نتایج مربوط به رفتار غیرخطی المان حجمی نماینده در شرایط بارگذاری کششی، پیچشی و خمشی، و در جزءهای حجمی مختلف از نانولوله، ارائه می‌گردند.

### ۳-۱-۳ نانولوله‌های کربنی

به‌عنوان یک مرحله‌ی واسطه در مطالعه‌ی خواص نانوکامپوزیت‌ها، پاسخ غیرخطی نانولوله‌های منفرد، بررسی می‌گردد. نانولوله‌های آرمچیر (۵، ۵)، (۶، ۶)، (۷، ۷)، (۸، ۸)، (۹، ۹)، (۱۰، ۱۰) و (۱۱، ۱۱)، همراه با نانولوله‌های زیگزاگ (۹، ۰)، (۱۰، ۰)، (۱۲، ۰)، (۱۴، ۰)، (۱۶، ۰)، (۱۷، ۰) و (۱۹، ۰)، که به‌ترتیب با نانولوله‌های آرمچیر ذکرشده، تقریباً قطر برابر دارند، با طول تقریبی ۱۰ nm، مورد بررسی قرار می‌گیرند.

### ۳-۱-۱ کشش محوری

به‌منظور شبیه‌سازی کشش محوری نانولوله، یک انتهای نانولوله به‌طور کامل مهار می‌گردد، درحالی‌که انتهای دیگر آن تحت یک جابه‌جایی مشخص،  $u$ ، در راستای محور نانولوله قرار می‌گیرد. از خروجی‌های تحلیل در

نرم افزار اباکس، مجموع نیروهای واکنشی<sup>۱</sup>،  $F$ ، اثرکننده روی اتم‌های انتهایی آزاد نانولوله، در اثر اعمال جابه-جایی  $u$  روی آنها می‌باشد. سطح مقطع نانولوله،  $A_{CNT}$ ، به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌گردد:

$$A_{CNT} = \pi \times (r_{o,CNT}^2 - r_{i,CNT}^2) \quad ۱-۳$$

شعاع بیرونی نانولوله،  $r_{o,CNT}$ ، و شعاع داخلی نانولوله،  $r_{i,CNT}$ ، پیش‌تر توسط رابطه‌ی ۲-۱۵ تعریف گشته‌اند. با استفاده از شیب نمودار نیرو-جابه‌جایی،  $\frac{dF}{du}$ ، در جابه‌جایی بسیار کوچک، می‌توان مدول یانگ نانولوله،  $E_{CNT}$ ، را با استفاده از مکانیک مواد از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$E_{CNT} = \frac{dF}{du} \times \frac{L_{CNT}}{A_{CNT}} \quad ۲-۳$$

که  $L_{CNT}$ ، طول ابتدایی نانولوله می‌باشد.

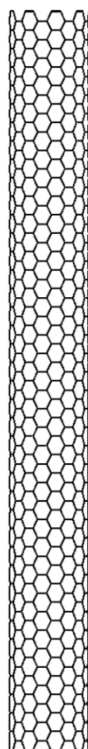
در شبیه‌سازی‌های در مقیاس اتمی، نیرو نسبت به تنش، در ارائه‌ی گزارش، معنی‌دارتر می‌باشد. اما، به‌منظور ارائه‌ی نتایج در یک صورت عموماً شناخته‌شده، و نیز به‌منظور مقایسه‌ی نتایج به‌دست‌آمده با دیگر نتایج موجود، به‌جای نمودار نیرو-جابه‌جایی، نمودار تنش-کرنش متناظر با آن، گزارش می‌گردد. از تقسیم  $F$  بر رابطه‌ی ۳-۱، مقدار تنش محوری مؤثر بر نانولوله به‌دست می‌آید. کرنش محوری نیز از تقسیم میزان جابه-جایی بر طول ابتدایی نانولوله حاصل می‌گردد.

برای نمونه نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) و نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶)، که تقریباً هم‌اندازه در قطر می‌باشند، در نظر گرفته‌شدند. شکل ۳-۱، نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) را پیش و پس از بارگذاری کشش محوری نمایش می‌دهد. شکل ۳-۲، نیز، نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶) را پیش و پس از بارگذاری کشش محوری نمایش می‌دهد. همچنین، منحنی‌های تنش-کرنش مربوط به نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) و نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶)، به‌دست‌آمده از بارگذاری کشش محوری، در شکل ۳-۳ نشان داده می‌شود. مدول‌های یانگ به‌دست‌آمده برای این دو نانولوله‌ی آرمچیر و زیگزاگ، به‌ترتیب برابر  $۱/۱۲۶$  TPa و  $۱/۱۲۰$  TPa می‌باشند.

روند کلی منحنی‌های شکل ۳-۳ با آنهایی که در پژوهش‌های قبلی [۴۹ و ۶۲] گزارش شده، به‌خوبی مطابقت می‌نماید.

نمودار تغییرات مدول یانگ نانولوله نسبت به قطر آن برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ مختلف در شکل ۳-۴ نشان داده می‌شود.

<sup>۱</sup> Reaction forces



ب

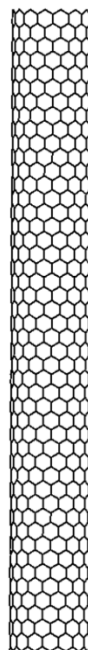


الف

شکل ۱-۳ نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $1/47 \text{ nm}$ .

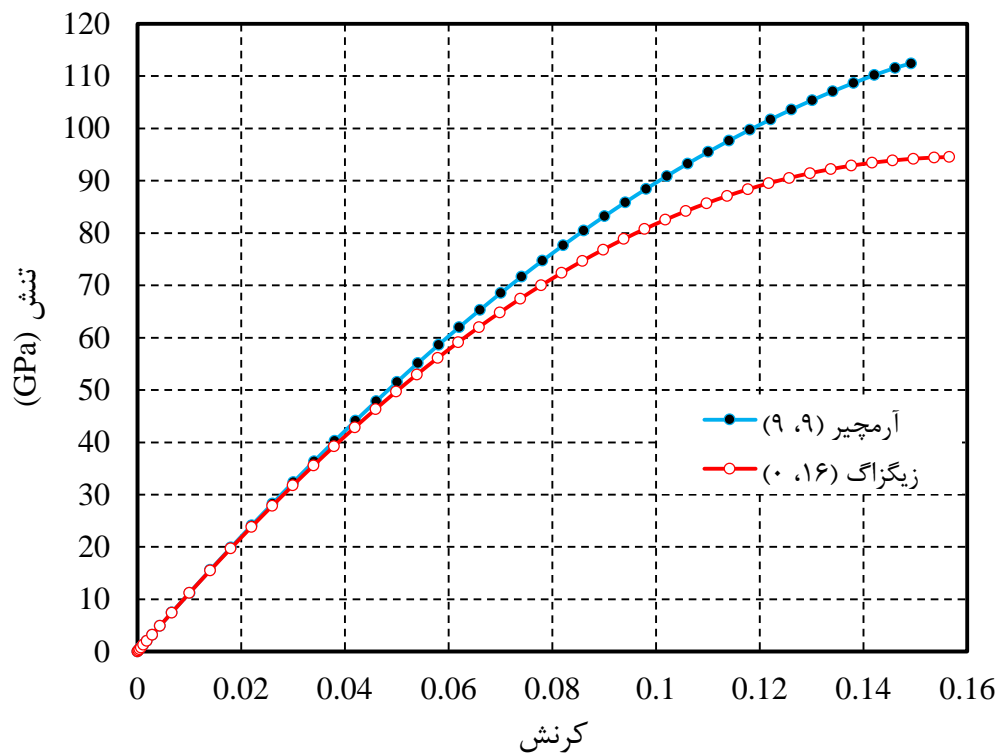


ب

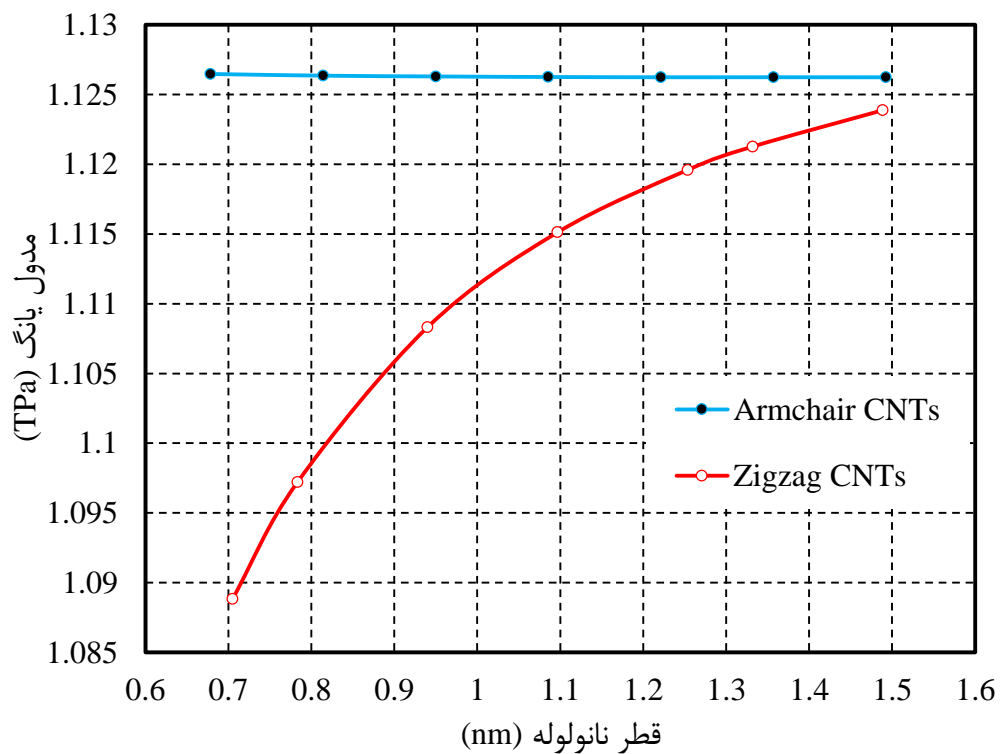


الف

شکل ۲-۳ نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶) الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان  $1/55 \text{ nm}$ .



شکل ۳-۳ منحنی‌های تنش-کرنش نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) و نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶) در بارگذاری کشش محوری.



شکل ۳-۴ نمودار تغییرات مدول یانگ نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها.

همان طور که از شکل ۳-۴ مشاهده می‌گردد، مدول یانگ نانولوله‌های آرمچیر با افزایش قطر نانولوله‌ها، تغییر محسوسی نمی‌نماید که روندی مشابه با پژوهش‌های پیشین دارد [۳۷، ۴۱ و ۷۳]، درحالی که مدول یانگ نانولوله‌های زیگزاگ با افزایش قطر نانولوله‌ها، روندی صعودی را در تشابه با برخی از پژوهش‌های قبلی دنبال می‌نماید [۳۷ و ۴۱]. همچنین، همواره مدول یانگ نانولوله‌های آرمچیر از مدول یانگ نانولوله‌های زیگزاگ هم‌قطرشان، بالاتر می‌باشد، که البته با افزایش قطر نانولوله‌ها، این اختلاف کمتر می‌گردد.

همچنین از شکل‌های ۳-۳ و ۴-۳ استنباط می‌گردد که نانولوله‌های آرمچیر، در مقایسه با نانولوله‌های زیگزاگ هم‌قطرشان، در بارگذاری کشش محوری استحکام بالاتری از خود نمایش می‌دهند.

به‌منظور محاسبه‌ی نسبت پواسون<sup>۱</sup> نانولوله‌ها، تحلیل خطی کشش محوری روی نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ نامبرده صورت پذیرفت. نسبت پواسون یک نانولوله با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود.

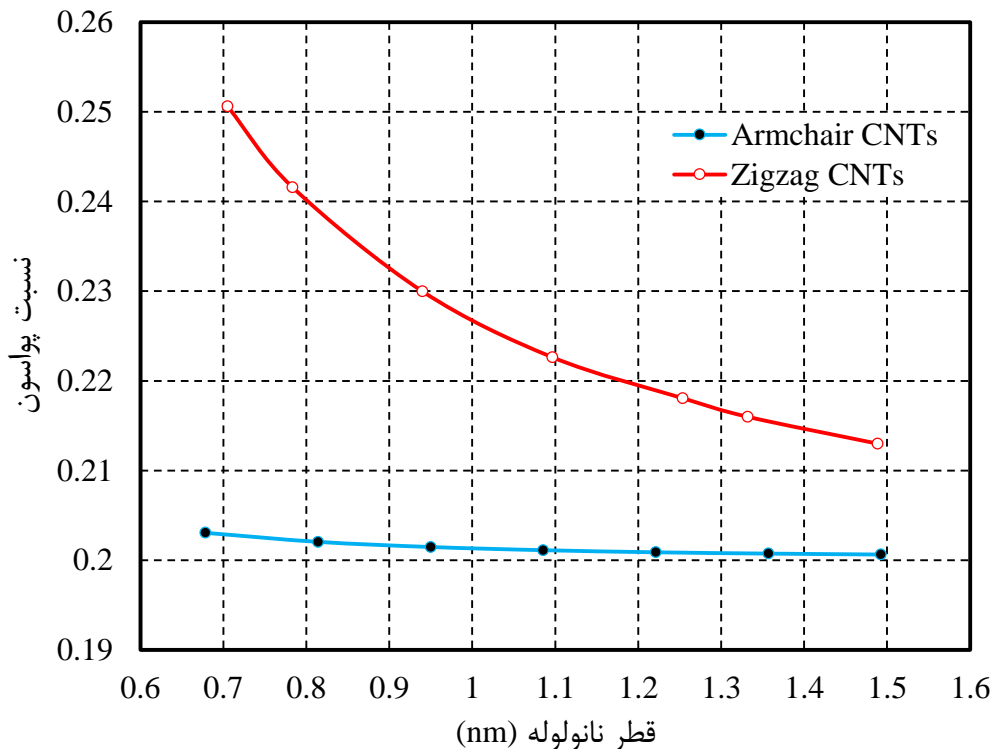
$$\nu = - \frac{\delta d_{\text{CNT}} / d_{\text{CNT}}}{\varepsilon_a} \quad 3-3$$

که در آن  $d_{\text{CNT}}$  قطر نانولوله،  $\delta d_{\text{CNT}}$  تغییر در قطر نانولوله در مقطع وسط آن، و  $\varepsilon_a$  کرنش محوری آن می‌باشند. شکل ۳-۵ نمودارهای تغییرات نسبت پواسون نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ مختلف بررسی شده را نمایش می‌دهد. همان‌طور که از شکل دیده می‌شود، هر دو نمودار روندی نزولی دارند به‌طوری که نسبت پواسون نانولوله‌های زیگزاگ در قطرهای کوچک به قطر نانولوله‌ها بسیار حساس می‌باشد، که با افزایش قطر نانولوله‌ها میزان این حساسیت کم و کمتر می‌شود، اما نسبت پواسون نانولوله‌های آرمچیر کاهش خفیفی را با افزایش قطر نانولوله‌ها نمایش می‌دهد. همچنین مشهود است که در قطرهای پایین، اختلاف مقادیر پیش-بینی شده برای نسبت پواسون نانولوله‌های زیگزاگ با نانولوله‌های آرمچیر هم‌قطرشان، زیاد است که رفته‌رفته با افزایش قطر نانولوله‌ها از این اختلاف کاسته می‌شود. مدل مکانیک ساختاری مولکولی اولیه مقادیر بسیار کمی (۰/۰۶ تا ۰/۰۸) را برای نسبت پواسون در اختیار قرار داد [۳۷]، که این مسأله به‌علت سفتی بالای مقطع المان تیر حول همه‌ی محورهای شعاعی، شامل محور منطبق بر وارونگی، بود. استفاده از المان تیر با مقطع مستطیلی [۴۴ و ۴۵] بجای المان تیر با مقطع دایره‌ای اولیه، سبب بهبود مقادیر پیش‌بینی شده برای نسبت پواسون نانولوله‌ها گشت. در [۴۵] با افزایش قطر نانولوله‌ها از ۳/۲-۰/۸ nm نسبت پواسون آنها در محدوده‌ی ۰/۲۲ تا ۰/۱ تغییر می‌نمود. اما مقدار حدی  $\nu = 0/1$  برای قطرهای بزرگ نانولوله‌ها، نسبتاً

<sup>۱</sup> Poisson's ratio



کوچک بود. نتایج گزارش شده در [۴۴] با مقادیر ارائه شده در پژوهش حاضر در مورد نانولوله‌های زیگزاگ، روندی یکسان، اما در مورد نانولوله‌های آرمچیر، روندی متفاوت دارد. ارتباط پیش‌بینی شده در پژوهش حاضر میان نسبت پواسون نانولوله‌ها با قطر و دست‌سازنی آنها، شباهت بسیار زیادی به نتایج مدل مکانیک ساختاری مولکولی تحلیلی [۳۹] دارد. همچنین مقدار ثابت  $\nu = 0.2$  ارائه شده در پژوهش حاضر برای نسبت پواسون قطرهای بزرگ نانولوله‌های آرمچیر، با نتایج پیش‌بینی شده برای گرافن (۰/۲۱) از محاسبات دینامیک شبکه توسط پوپوف و همکاران [۷۴] منطبق است. جین و یوان [۷۳] مقدار ۰/۲۶ را بر مبنای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی گزارش نمودند، اما آنها مقدار سفتی پیچشی را بسیار کوچک در نظر گرفتند. پژوهش‌های صورت‌گرفته در مورد اثر ثابت‌های سفتی پیچش و وارونگی روی خواص الاستیک نشان دادند که نسبت پواسون و در نتیجه سفتی شعاعی به این پارامترها وابستگی مستقیم دارند، در حالی که مدول یانگ تنها به صورت جزئی از این پارامترها تأثیر می‌پذیرد [۴۵]. بنابراین تأثیر استفاده از المان تیر با مقطع عمومی در پژوهش حاضر در محاسبه‌ی دقیق‌تر و واقع‌بینانه‌تر نسبت پواسون نانولوله‌ها نسبت به نتایج گزارش شده‌ی قبلی، مشهودتر از محاسبه‌ی دیگر خواص الاستیک آنها خواهد بود.



شکل ۳-۵ نمودار تغییرات نسبت پواسون نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها.

## ۳-۱-۲ پیچش

به منظور شبیه‌سازی پیچش نانولوله، یک انتهای نانولوله به‌طور کامل مهار می‌گردد، در حالی که تمامی گره‌های واقع در انتهای دیگر آن تحت یک دوران مشخص حول محور نانولوله،  $u_{r2}$ ، قرار می‌گیرند. از خروجی‌های تحلیل در نرم‌افزار اباکس، مجموع ممان‌های واکنشی<sup>۱</sup> اثرکننده حول محور نانولوله،  $T$ ، روی اتم‌های انتهای آزاد نانولوله، در اثر اعمال دوران  $u_{r2}$  روی آنها می‌باشد. ممان اینرسی قطبی سطح مقطع نانولوله،  $J_{CNT}$ ، به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌گردد:

$$J_{CNT} = \frac{\pi}{2} \times (r_{o,CNT}^4 - r_{i,CNT}^4) \quad ۴-۳$$

با استفاده از شیب نمودار ممان-دوران،  $\frac{dT}{du_{r2}}$ ، در دوران بسیار کوچک، می‌توان مدول برشی نانولوله،  $G_{CNT}$ ، را از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$G_{CNT} = \frac{dT}{du_{r2}} \times \frac{L_{CNT}}{J_{CNT}} \quad ۵-۳$$

به منظور ارائه نمودارهای تنش- کرنش، تنش برشی،  $\tau$ ، و کرنش برشی،  $\gamma$ ، با استفاده از روابط زیر تعیین می‌گردند.

$$\tau = \frac{T \times r_{CNT}}{J_{CNT}} \quad ۶-۳$$

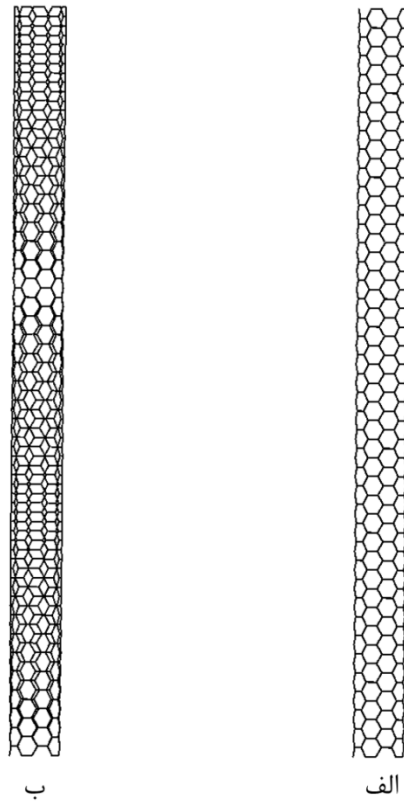
$$\gamma = \frac{r_{CNT} \times u_{r2}}{L_{CNT}} \quad ۷-۳$$

برای نمونه، شکل ۳-۶، نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵) را پیش و پس از بارگذاری پیچشی نمایش می‌دهد. همچنین، منحنی تنش-کرنش نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵)، به دست‌آمده از بارگذاری پیچشی، در شکل ۳-۷ مشاهده می‌گردد.

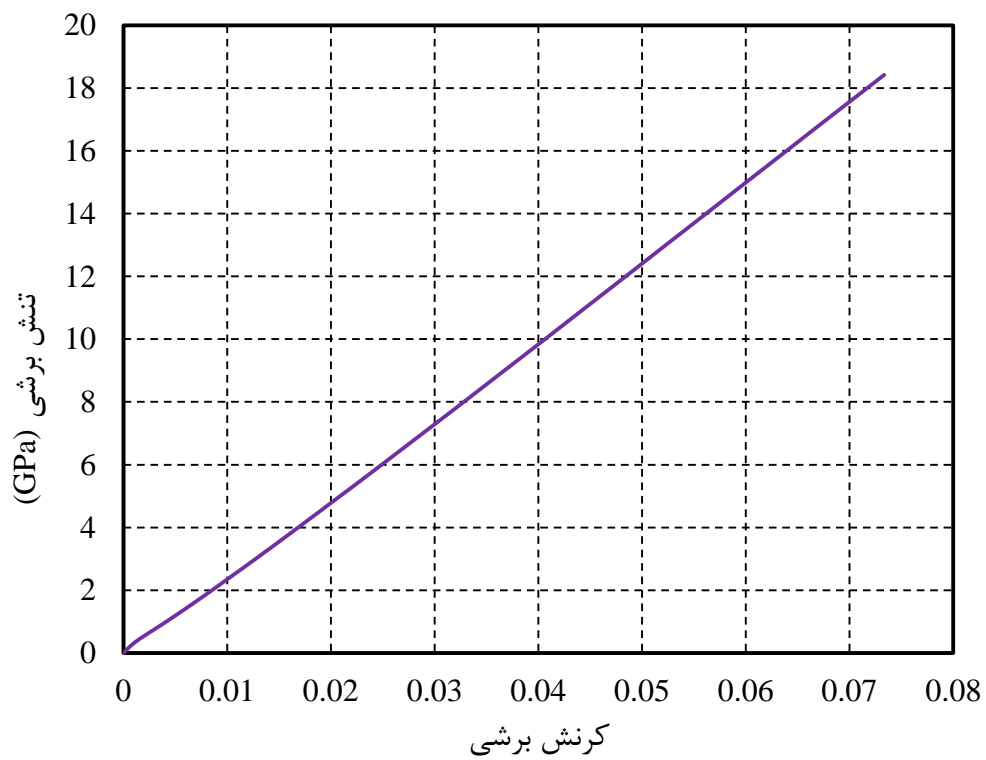
از شکل ۳-۷ می‌توان این نتیجه را دریافت که رابطه‌ی تنش برشی-کرنش برشی تقریباً خطی می‌باشد، که این دریافت، با نتایج گزارش شده در گذشته مطابقت می‌نماید [۴۹].

نمودار تغییرات مدول برشی نانولوله نسبت به قطر آن برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ مختلف در شکل ۳-۸ نشان داده می‌شود.

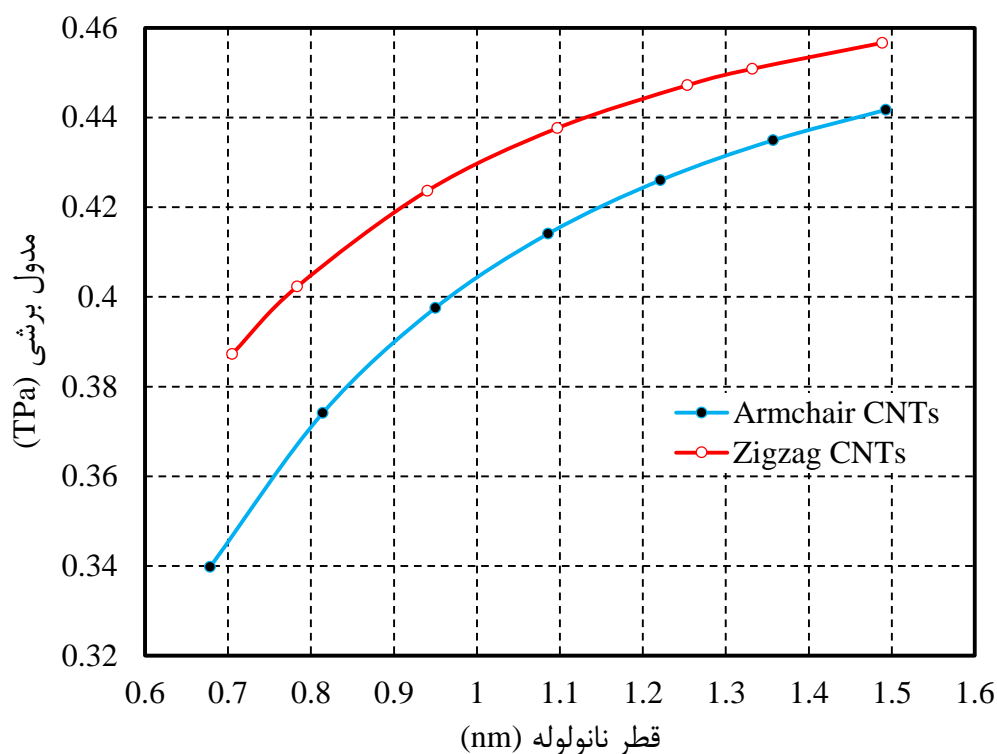
<sup>۱</sup> Reaction moments



شکل ۳-۶ نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵) (الف) پیش، و (ب) پس از اعمال پیچش به میزان  $۵۷/۳^\circ$ .



شکل ۳-۷ منحنی تنش برشی-کرنش برشی نانولوله‌ی آرمچیر (۵، ۵) در بارگذاری پیچشی.



شکل ۳-۸ نمودار تغییرات مدول برشی نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها.

از شکل ۳-۸ دیده می‌شود که نمودارهای تغییر مدول برشی نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ نسبت به قطر آنها دارای روندی مشابه هم بوده و صعودی می‌باشند. روند تغییرات مدول برشی نانولوله‌ها نسبت به قطر آنها مشابه با آنهایی است که در برخی از پژوهش‌های قبلی گزارش شده است [۳۷ و ۴۱]. همچنین در قطرهای مختلف از نانولوله‌ها، همواره مدول برشی نانولوله‌های زیگزاگ بالاتر از مدول برشی نانولوله‌های آرمچیر هم-قطرشان است، که این برخلاف چیزی است که در مورد مدول یانگ آنها پیش‌تر ذکر گردید.

مقادیر به دست آمده برای مدول یانگ و مدول برشی مربوط به نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹) و نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۶، ۰)، با نتایج موجود مربوط به این دو نانولوله در پژوهش انجام شده توسط ورنیک و میگوئید [۴۹]، و نیز سایر نتایج موجود در پژوهش‌های صورت گرفته در گذشته، اعم از مدل‌های نظری و روش‌های تجربی، مربوط به انواع نانولوله‌ها، در جدول ۳-۱ آورده می‌شوند تا بستر مناسبی برای مقایسه‌ی آنها فراهم آید.

همان‌طور که از جدول ۳-۱ مشهود است، نتایج حاصل از پژوهش حاضر، توافق خوبی با نتایج گزارش شده از پژوهش‌های گذشته دارد.

جدول ۱-۳ مقایسه‌ی مدول یانگ و مدول برشی نانولوله‌های آرمچیر (۹، ۹) و زیگزاگ (۰، ۱۶) با نتایج دیگر، موجود در مراجع.

$E_{CNT}$ (TPa)	$G_{CNT}$ (TPa)	مدل‌های نظری
۱/۱۲۶۰	۰/۴۲۶۰	پژوهش حاضر، نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹)
۱/۱۲۰۰	۰/۴۴۷۰	پژوهش حاضر، نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶)
۰/۹۴۴۸	۰/۳۴۳۴	ورنیک و میگوئید [۴۹]، نانولوله‌ی آرمچیر (۹، ۹)
۰/۹۲۰۲	۰/۳۴۴۲	ورنیک و میگوئید [۴۹]، نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۶)
۰/۹۹۴۷	۰/۳۹۲۱	لی و چو [۳۷]
۱/۲۴۷۸	۰/۳۲۴۵	جیانوپولوس و همکاران [۳۸]
۱/۰۲۹۳	۰/۴۳۳۰	تزرپس و همکاران [۵۲]
۰/۹۷۲۷	۰/۴۵۵۰	لو [۸]
۰/۹۰۰۰	۰/۳۰۰۰	سریواستاوا و وی [۷۵]
۱/۲۲۳۸	۰/۳۲۸۱	گوپتا و همکاران [۷۶]
۱/۲۳۶۰	۰/۴۹۲۰	جین و یوان [۷۳]
۱/۰۳۰۰	۰/۴۷۵۰	تو [۷۷]
<b>روش‌های تجربی</b>		
۱/۰۲۰۰	-	یو و همکاران [۹]
۱/۳۰۰۰	-	کریشنن و همکاران [۷۸]
۱/۲۰۰۰	-	تامبلر و همکاران [۷۹]
-	۰/۴۱۰۰	هال و همکاران [۸۰]

## ۳-۱-۳ خمش

به منظور شبیه‌سازی خمش نانولوله، یک انتهای نانولوله به‌طور کامل مهار می‌گردد، در حالی که تمامی گره‌های واقع در انتهای دیگر آن تحت یک دوران مشخص حول محور سطح مقطع،  $u_{r1}$ ، قرار می‌گیرند. از خروجی‌های تحلیل در نرم‌افزار اباکس، مجموع ممان‌های واکنشی اثرکننده حول محور سطح مقطع،  $M$ ، روی اتم‌های آزاد نانولوله، در اثر اعمال دوران  $u_{r1}$  روی آنها می‌باشد. ممان اینرسی سطح مقطع نانولوله،  $I_{CNT}$ ، به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌گردد:

$$I_{CNT} = \frac{\pi}{4} \times (r_{o,CNT}^4 - r_{i,CNT}^4) \quad ۸-۳$$

با استفاده از شیب نمودار ممان-دوران،  $\frac{dM}{du_{r1}}$ ، در دوران بسیار کوچک، می‌توان صلابت خمشی<sup>۱</sup> نانولوله،  $(EI)_{CNT}$ ، را از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$(EI)_{CNT} = \frac{dM}{du_{r1}} \times L_{CNT} \quad ۹-۳$$

مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله،  $E_{CNT,ben}$ ، نیز از تقسیم رابطه‌ی ۹-۳ بر رابطه‌ی ۸-۳ به دست می‌آید.

$$E_{CNT,ben} = \frac{dM}{du_{r1}} \times \frac{L_{CNT}}{I_{CNT}} \quad ۱۰-۳$$

به منظور ارائه‌ی نمودارهای تنش-کرنش، تنش خمشی،  $\sigma_b$ ، و کرنش خمشی،  $\varepsilon_b$ ، با استفاده از روابط زیر تعیین می‌گردند.

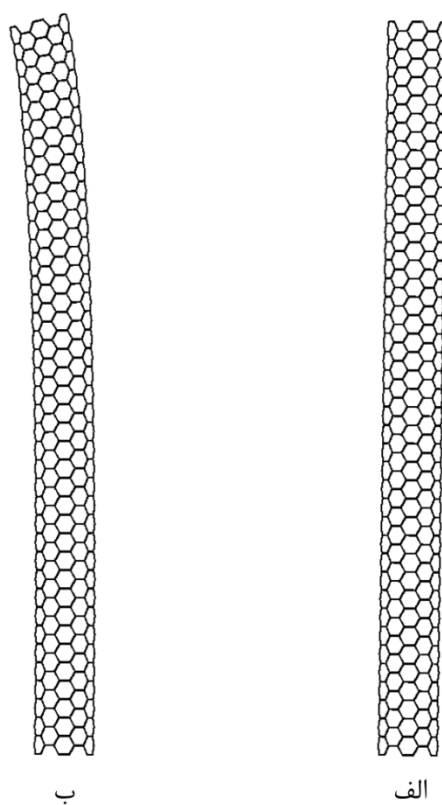
$$\sigma_b = \frac{M \times r_{CNT}}{I_{CNT}} \quad ۱۱-۳$$

$$\varepsilon_b = \frac{r_{CNT} \times u_{r1}}{L_{CNT}} \quad ۱۲-۳$$

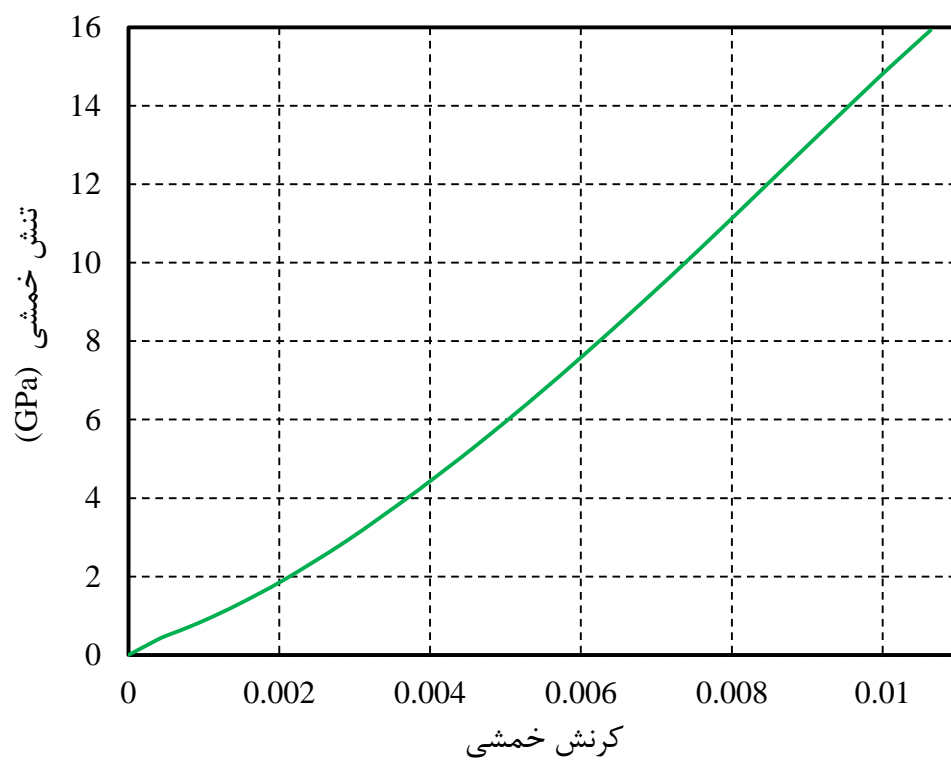
برای نمونه، شکل ۳-۹، نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶) را پیش و پس از بارگذاری خمشی نمایش می‌دهد. همچنین، منحنی تنش-کرنش نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، به دست آمده از بارگذاری خمشی، در شکل ۳-۱۰ مشاهده می‌گردد.

شکل ۳-۱۱ نیز، تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش مربوط به نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ با قطرهای مختلف را نشان می‌دهد.

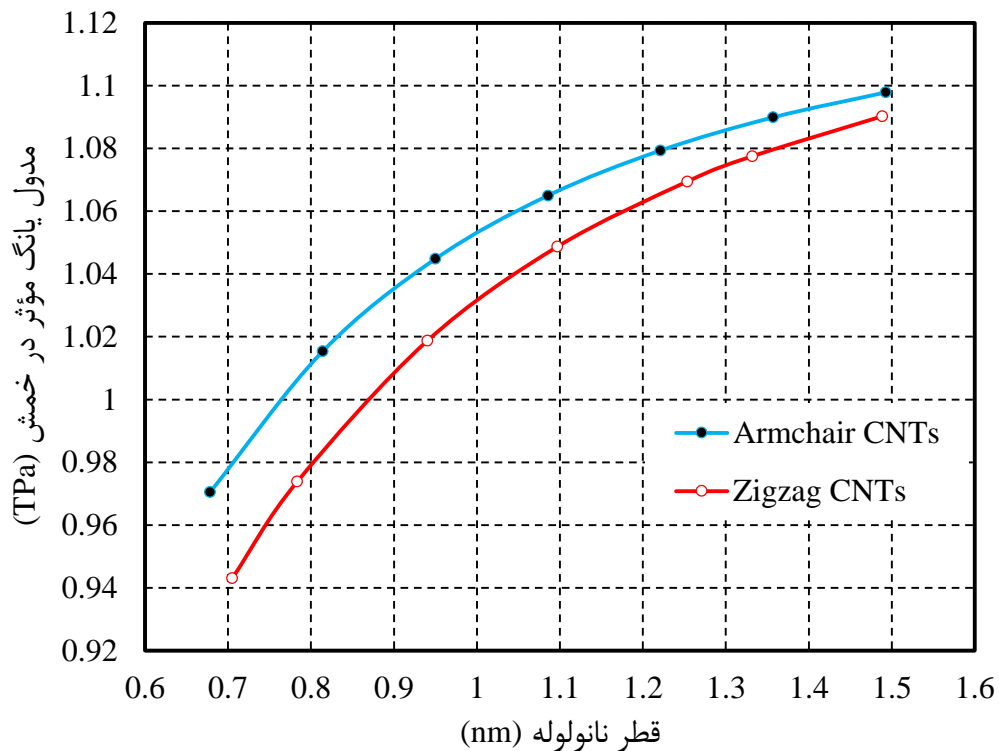
<sup>۱</sup> Flexural rigidity



شکل ۳-۹ نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶) (الف) پیش، و (ب) پس از اعمال خمش به میزان  $14/72^\circ$ .



شکل ۳-۱۰ منحنی تنش خمشی-کرنش خمشی مربوط به نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶) تحت بارگذاری خمشی.



شکل ۳-۱۱ نمودار تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌های مختلف نسبت به قطر آنها.

از شکل ۳-۱۱ ملاحظه می‌گردد که نمودار تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ نسبت به قطر آنها، صعودی می‌باشد. همچنین در قطرهای مختلف از نانولوله‌ها، همواره مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌های آرمچیر، بالاتر از مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌های زیگزاگ هم‌قطرشان است. که البته با افزایش قطر، از اختلاف موجود بین مدول یانگ مؤثر در خمش نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ هم‌قطر، کاسته می‌شود.

### ۳-۲- نانوکامپوزیت پایه پلیمری

اکنون که خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی مشخص شدند و با موارد ذکر شده در پژوهش‌های دیگر، به‌طور کلی توافق خوبی داشتند، خواص پلیمر تقویت‌شده با نانولوله‌ها بررسی می‌گردد. به‌علت تعداد زیاد درجات آزادی سیستم و به‌منظور محدود کردن زمان محاسباتی مورد نیاز برای شبیه‌سازی آن، طول المان حجمی نماینده حدود ۵ nm در نظر گرفته‌شد. المان حجمی نماینده در شرایط بارگذاری کششی، پیچشی و خمشی قرار گرفت تا ویژگی‌های آن تعیین گردد. در تمامی این شرایط بارگذاری، حجم پلیمر اطراف نانولوله‌ی مورد نظر، به‌منظور بررسی اثر جزء حجمی نانولوله روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت، تغییر داده



می‌شد. در تمامی موارد، نانولوله به صورت یک فیبر پیوسته<sup>۱</sup> درون المان حجمی نماینده، در نظر گرفته شد، که به این موضوع اشاره دارد که نانولوله، طولی برابر با پلیمر اطرافش دارد.

با توجه به اینکه در تشکیل المان حجمی نماینده، نانولوله‌ی مورد نظر در داخل پلیمر جاسازی شده و المان-های وان دروالس میان گره‌های سطح داخلی مدل اجزای محدود پلیمر و گره‌های مدل اجزای محدود نانولوله ایجاد می‌گردد، پیش از بارگذاری، بسیاری از المان‌های وان دروالس ایجاد شده، حامل بار کششی و یا فشاری بوده که سبب بروز تنش ابتدایی میان نانولوله و پلیمر اطرافش خواهد شد. بنابراین پیش از مرحله‌ی بارگذاری<sup>۲</sup>، مرحله‌ی آرامش<sup>۳</sup> تعریف می‌گردد که در این مرحله به المان حجمی نماینده اجازه داده می‌شود که تحت تأثیر برهم‌کنش‌های وان دروالس موجود، تغییر شکل دلخواه خود را بپذیرد. به صورتی که تمامی گره‌های یک انتهای نانولوله همراه با گره‌های انتهای پلیمر در همان سمت، به طور کامل مهار می‌گردند، درحالی-که سایر گره‌های نانولوله و پلیمر، آزاد گذاشته می‌شوند تا این گونه، المان حجمی نماینده از تنش‌های ابتدایی حاصل از برهم‌کنش‌های وان دروالس، رهایی یابد.

### ۳-۲-۱ کشش محوری

به منظور شبیه‌سازی کشش المان حجمی نماینده، تمامی گره‌های یک انتهای نانولوله همراه با گره‌های انتهای پلیمر در همان سمت، به طور کامل مهار می‌گردند، درحالی‌که تمامی گره‌های نانولوله و پلیمر در انتهای دیگر، تحت یک جابه‌جایی مشخص در راستای محور المان حجمی نماینده قرار می‌گیرند. از خروجی-های تحلیل در نرم‌افزار اباکس، مجموع نیروهای واکنشی اثرکننده روی گره‌های انتهای آزاد المان حجمی نماینده،  $F$ ، در اثر اعمال جابه‌جایی روی آنها می‌باشد. سطح مقطع المان حجمی نماینده،  $A_{RVE}$ ، به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌گردد:

$$A_{RVE} = \pi \times (R_{o,RVE}^2 - r_{i,CNT}^2) \quad ۱۳-۳$$

پیش‌تر شعاع داخلی نانولوله،  $r_{i,CNT}$ ، توسط رابطه‌ی ۲-۱۵ و شعاع بیرونی المان حجمی نماینده،  $R_{o,RVE}$ ، توسط رابطه‌ی ۲-۱۶ تعریف گشته‌اند.

<sup>۱</sup> Continuous fiber

<sup>۲</sup> Loading step

<sup>۳</sup> Relaxation step

با استفاده از شیب نمودار نیرو-جابجایی،  $\frac{dF}{du}$ ، در جابه‌جایی بسیار کوچک، می‌توان مدول یانگ المان حجمی نماینده،  $E_{RVE}$ ، را از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$E_{RVE} = \frac{dF}{du} \times \frac{L_{RVE}}{A_{RVE}} \quad ۱۴-۳$$

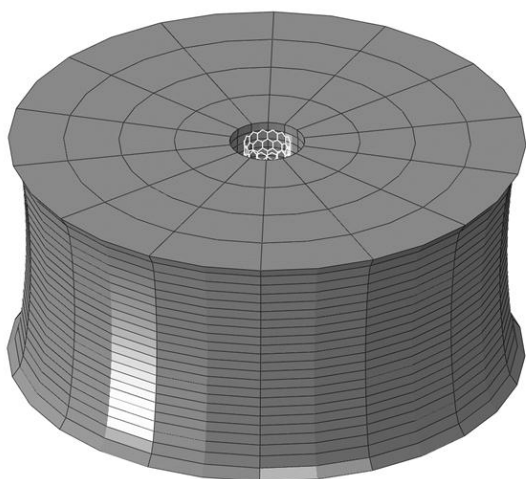
که  $L_{RVE}$ ، طول ابتدایی المان حجمی نماینده می‌باشد.

از تقسیم  $F$  بر رابطه‌ی ۱۳-۳، مقدار تنش محوری مؤثر بر المان حجمی نماینده به دست می‌آید. کرنش محوری نیز از تقسیم میزان جابه‌جایی بر طول ابتدایی المان حجمی نماینده حاصل می‌گردد.

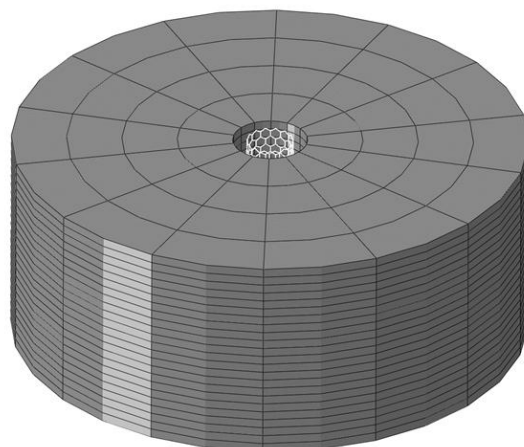
برای نمونه، شکل‌های ۱۲-۳ تا ۱۴-۳ المان حجمی نماینده را در جزءهای حجمی مختلف نانولوله، برای نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۴)، پیش و پس از بارگذاری کشش محوری نمایش می‌دهند. شکل‌های ۱۵-۳ تا ۱۷-۳ نیز، المان حجمی نماینده را در جزءهای حجمی مختلف نانولوله، برای نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، پیش و پس از بارگذاری کشش محوری نمایش می‌دهند.

همچنین، شکل‌های ۱۸-۳ و ۱۹-۳ منحنی‌های تنش-کرنش حاصل از کشش محوری المان حجمی نماینده را در جزءهای حجمی مختلف نانولوله، به ترتیب برای نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۴) و نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، نشان می‌دهند. از شکل‌های ۱۸-۳ و ۱۹-۳ به سادگی می‌توان مشاهده نمود که مطابق انتظار، با افزایش جزء حجمی نانولوله در المان حجمی نماینده، سفتی نانوکامپوزیت به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد.

برای مقایسه‌ی بهتر منحنی‌های دو شکل ۱۸-۳ و ۱۹-۳، تمامی منحنی‌های موجود در آنها در شکل ۲۰-۳ آورده می‌شوند، تا تمایز میان دو نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۴) و آرمچیر (۸، ۸)، با قطر تقریباً یکسان، به عنوان اجزای تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت تحت بارگذاری کششی، ملموس‌تر باشد. همان‌طور که از شکل ۲۰-۳ آشکار است، نانولوله‌ی آرمچیر در تقویت پلی‌پروپیلن، برای بارگذاری کشش محوری، در تمامی جزءهای حجمی نانولوله، از نانولوله‌ی زیگزاگ هم‌قطر خود بهتر عمل می‌نماید، به طوری که نانوکامپوزیت حاصل، سفتی بیشتری در بارگذاری کشش محوری نشان خواهد داد.

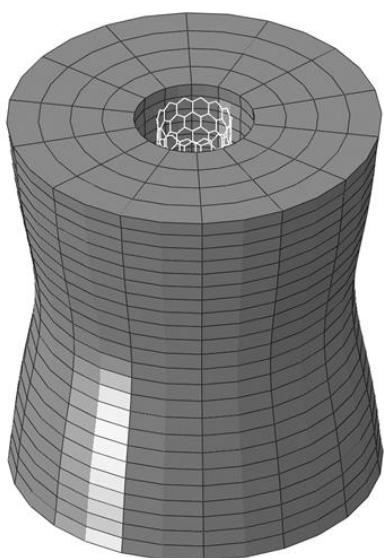


ب

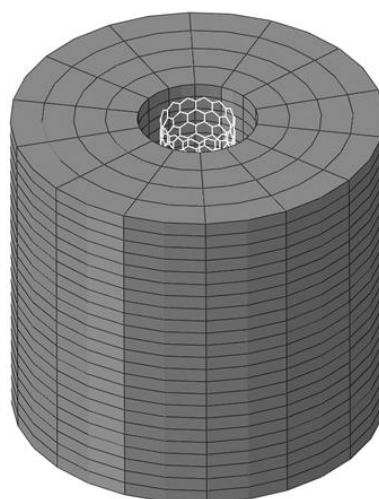


الف

شکل ۳-۱۲ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۰.۱٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۴، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۰.۷۹ nm.

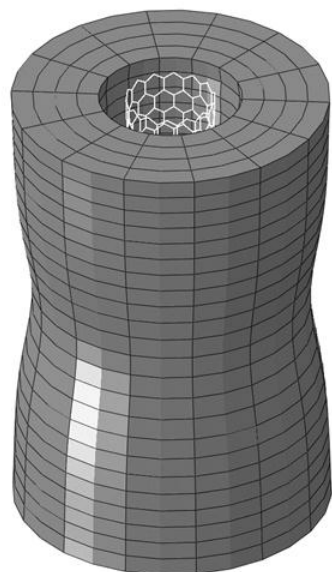


ب

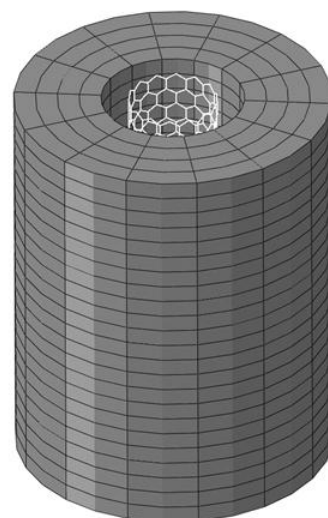


الف

شکل ۳-۱۳ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۰.۵٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۴، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۱.۰۵ nm.

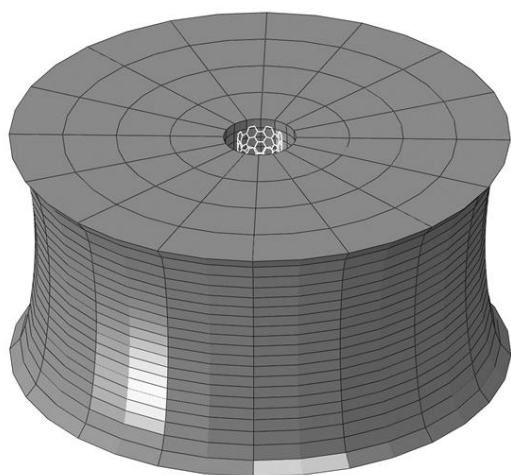


ب

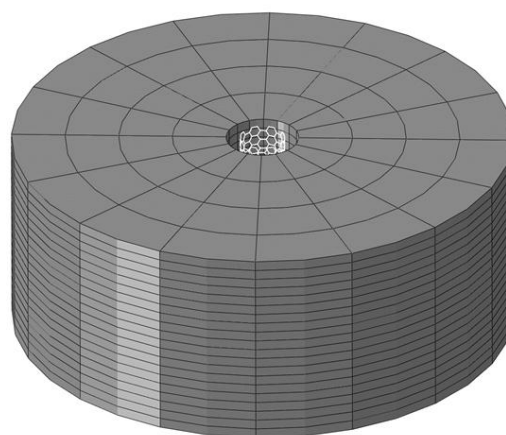


الف

شکل ۳-۱۴ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۰/۷۸ nm.

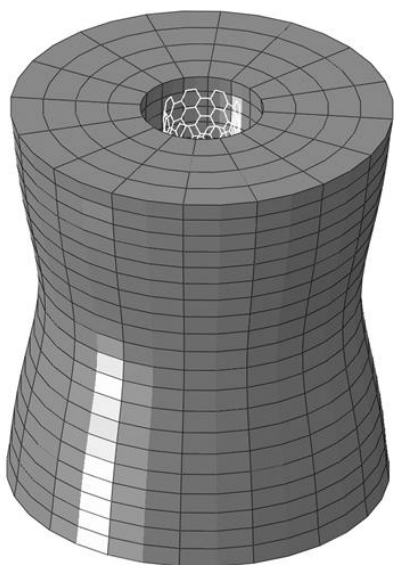


ب

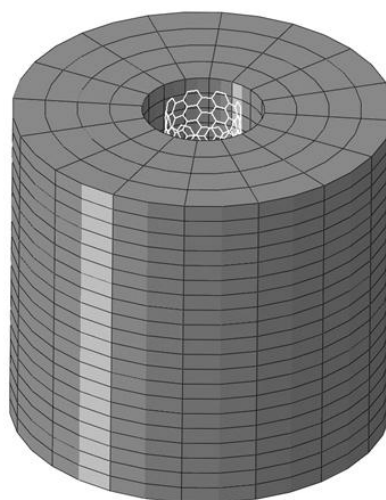


الف

شکل ۳-۱۵ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۱/۱ nm.

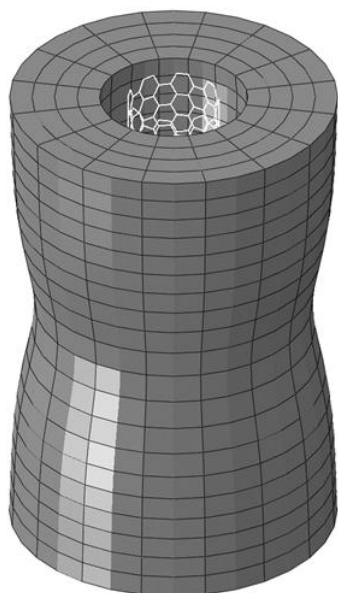


ب

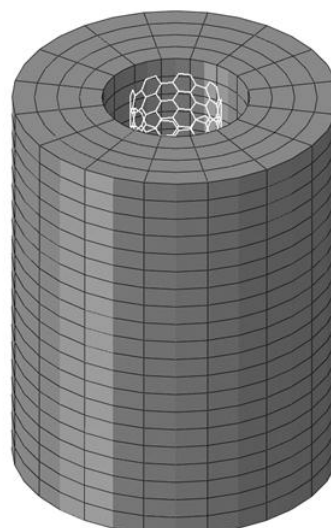


الف

شکل ۳-۱۶ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۰.۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۰.۱/۱ nm.

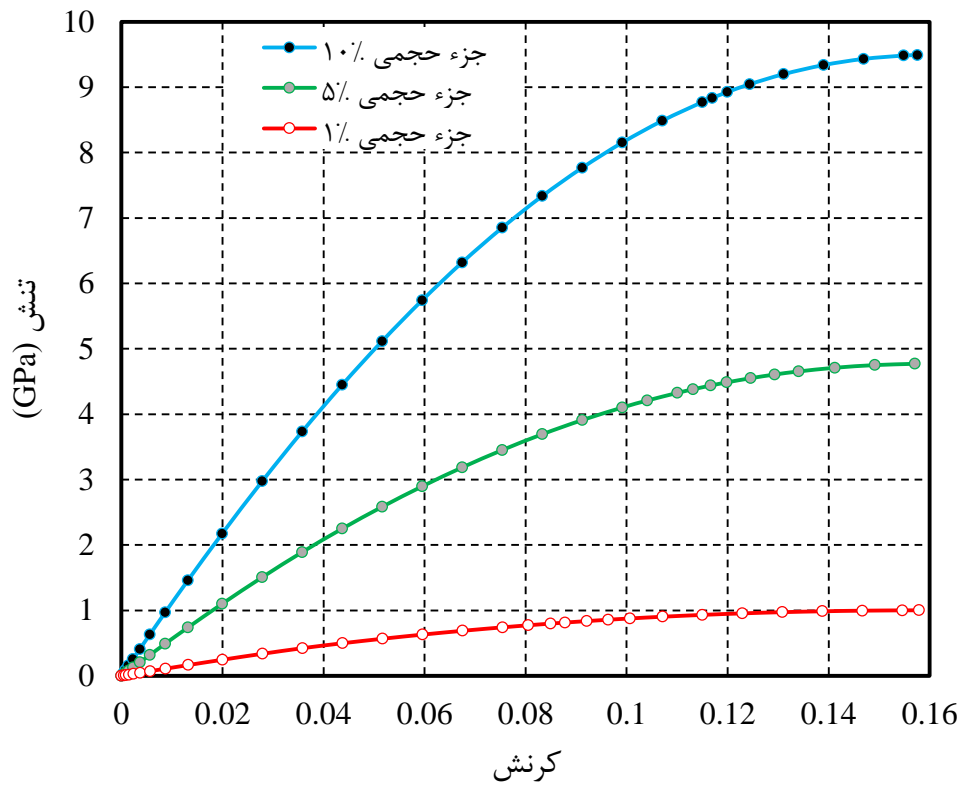


ب

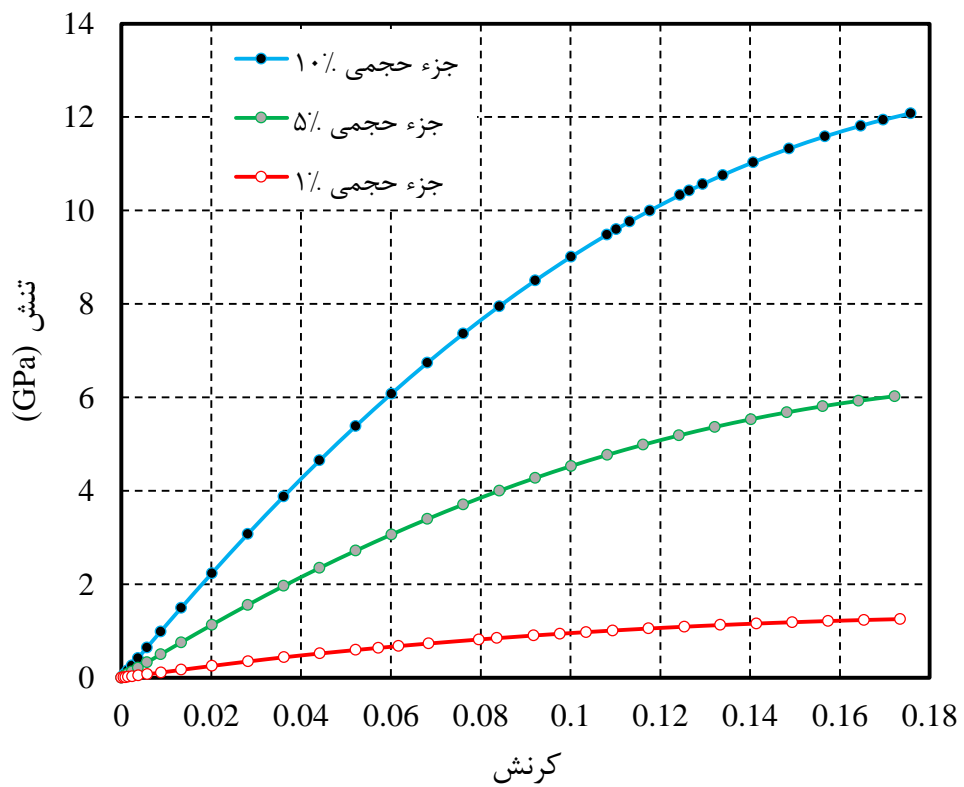


الف

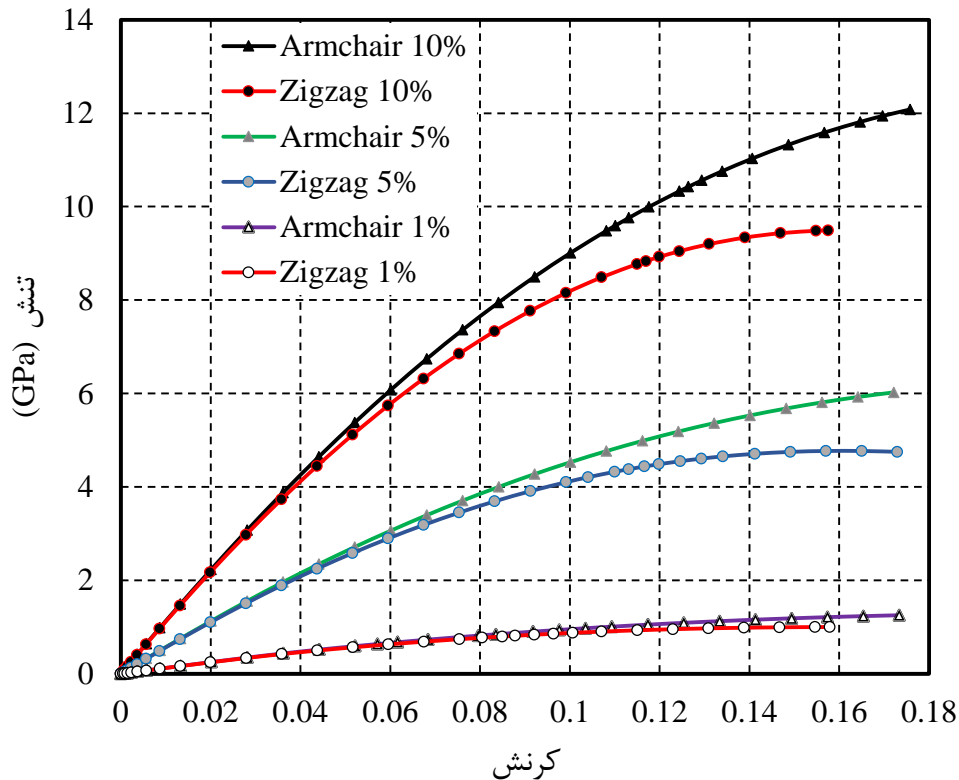
شکل ۳-۱۷ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۰.۱۰٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال کشش محوری به میزان ۰.۰/۸۶ nm.



شکل ۳-۱۸ منحنی‌های تنش-کرنش برای کشش المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی زیگزاگ (۰، ۱۴)، در جزء‌های حجمی مختلف نانولوله.



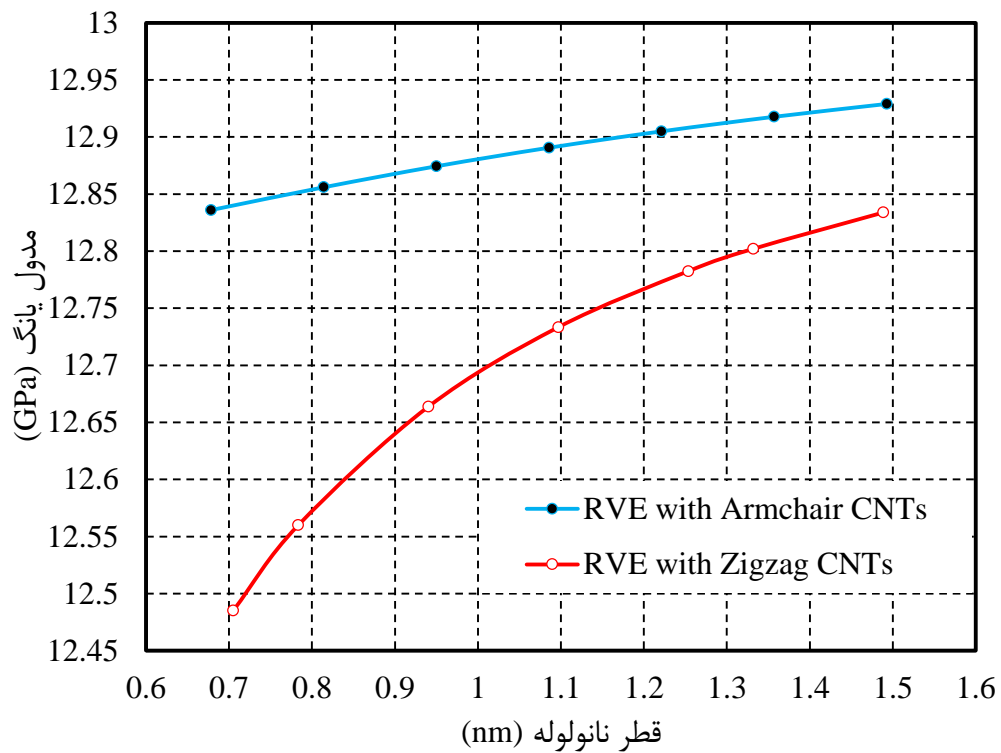
شکل ۳-۱۹ منحنی‌های تنش-کرنش برای کشش المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸)، در جزء‌های حجمی مختلف نانولوله.



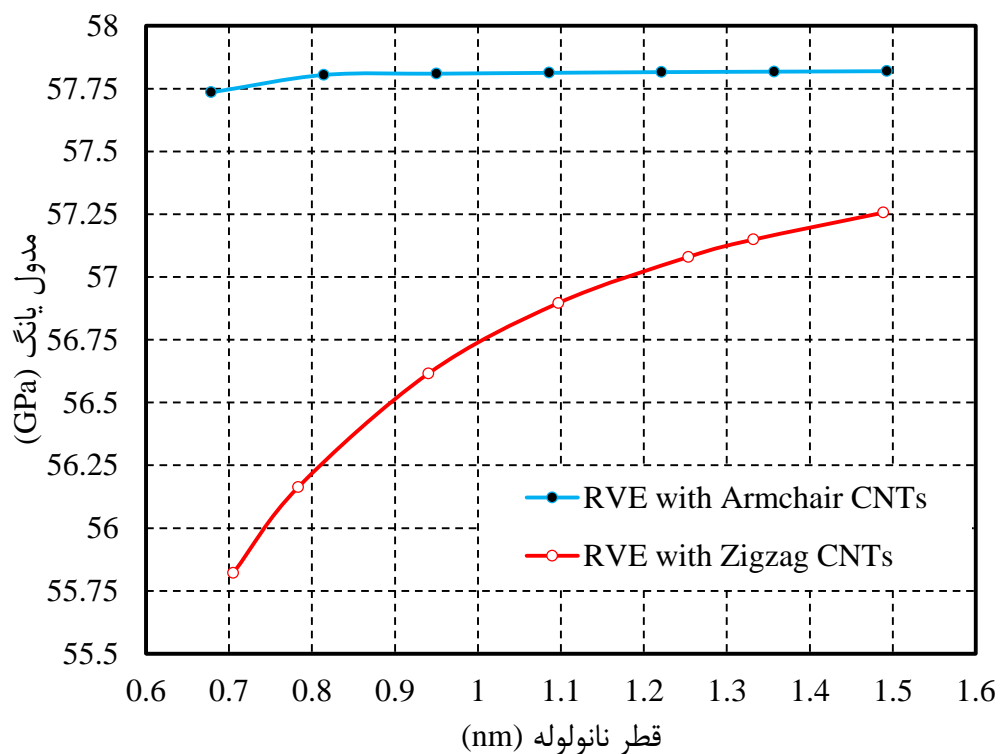
شکل ۳-۲۰ مقایسه‌ی منحنی‌های تنش-کرنش برای کشش المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۸، ۸) و نیز حاوی نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۴، ۰)، در جزء‌های حجمی مختلف نانولوله.

اکنون اثر استفاده از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ با قطرهای گوناگون، همان نانولوله‌های بررسی شده در بخش ۱-۳، به‌عنوان جزء تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت، روی مدول یانگ نانوکامپوزیت بررسی می‌شود. در راستای این هدف، منحنی‌های تغییرات مدول یانگ نانوکامپوزیت با جزء‌های حجمی نانولوله‌ی ۰.۱، ۰.۵، و ۱.۰، نسبت به قطر نانولوله‌های مختلف، برای هر دو گروه نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ، رسم می‌گردند (شکل‌های ۳-۲۱، ۳-۲۲، و ۳-۲۳). اندازه‌های مدول یانگ این نانوکامپوزیت‌ها نیز در جدول ۳-۲ ارائه می‌گردند.

همان‌طور که از شکل‌های ۳-۲۱، ۳-۲۲، و ۳-۲۳ مشاهده می‌شود، با افزایش قطر نانولوله بکاررفته در نانوکامپوزیت، مدول یانگ نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد، که البته شیب تغییرات مدول یانگ نانوکامپوزیت با نانولوله‌های زیگزاگ نسبت به قطر نانولوله، از شیب تغییرات مدول یانگ نانوکامپوزیت با نانولوله‌های آرمچیر نسبت به قطر نانولوله، بیشتر می‌باشد. همچنین با مقایسه‌ی دو منحنی موجود در هر یک از شکل‌ها، مشاهده می‌گردد که نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی آرمچیر در مقایسه با نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی زیگزاگ هم‌قطر، مدول یانگ بالاتری از خود ارائه می‌دهد.

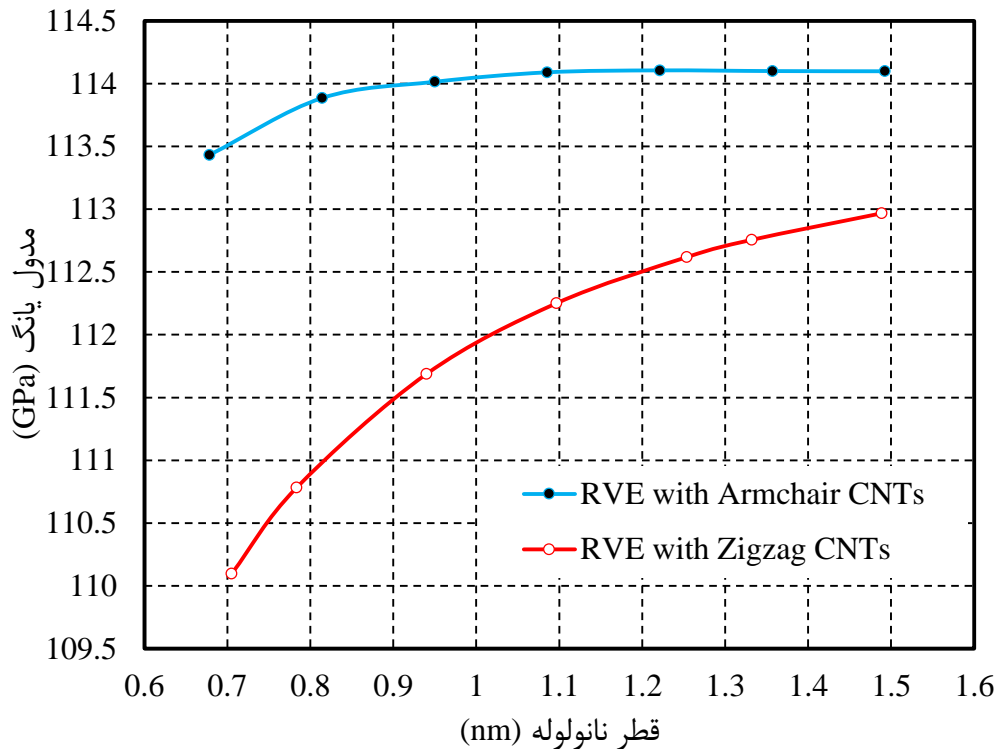


شکل ۳-۲۱ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.



شکل ۳-۲۲ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۵٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.





شکل ۳-۲۳ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱۰٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزراگ.

همچنین از شکل‌های ۳-۲۰، ۳-۲۱، ۳-۲۲ و ۳-۲۳ استنباط می‌گردد که، نانولوله‌های آرمچیر به‌عنوان جزء تقویت‌کننده در مواد کامپوزیتی، در مقایسه با نانولوله‌های زیگزراگ هم‌قطرشان، در شرایط مناسب انتشار و هم‌ترازی نانولوله‌ها، در بارگذاری کشش محوری بهتر عمل می‌نمایند.

از بررسی نتایج دریافت می‌شود که در جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ها، ۹/۳ تا ۹/۳۷، و ۹/۰۵ تا ۹/۳، در جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ها، ۴۱/۸۷ تا ۴۱/۹۳، و ۴۰/۴۸ تا ۴۱/۵۲، و در جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ها، ۸۲/۲۶ تا ۸۲/۷۴، و ۷۹/۸۴ تا ۸۱/۹۲، برابر افزایش در مدول یانگ نانوکامپوزیت نسبت به مدول یانگ پلیمر خالص اولیه، به‌ترتیب با بهره‌گیری از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزراگ گوناگون، حاصل گشته‌است؛ که بهبود خوبی در خواص نانوکامپوزیت، نسبت به پلیمر خالص را نشان می‌دهد.

ورنیک و میگوئید [۴۹] مقدار  $50/3$  GPa را برای مدول یانگ پلیمر تقویت‌شده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌های آرمچیر (۹، ۹) محاسبه نمودند که در پژوهش حاضر برای این حالت مقدار  $57/81578$  GPa تعیین شده‌است. همچنین، زوبری و ایست [۸۱] مدول یانگ پلیمر تقویت‌شده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌های آرمچیر (۱۰، ۱۰) را  $52/04$  GPa پیش‌بینی نمودند که در پژوهش حاضر برای این حالت مقدار  $57/81762$  GPa محاسبه شده‌است. روشن است که توافق خوبی میان نتایج به‌دست‌آمده در پژوهش حاضر

با دو پژوهش صورت گرفته در گذشته مشاهده می‌شود، اختلاف موجود میان آنها را می‌توان به شیوه‌های مدل‌سازی متفاوت بکاررفته در آنها و نیز پلیمرهای مختلف استفاده‌شده در آنها نسبت داد.

جدول ۲-۳ مدول یانگ نانوکامپوزیت، در جزءهای حجمی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪ از نانولوله‌های تقویت‌کننده مختلف.

$E_{RVE}$ (GPa)			
جزء حجمی ۱٪	جزء حجمی ۵٪	جزء حجمی ۱۰٪	
۱۲/۸۳۵۹۹	۵۷/۷۳۵۰۳	۱۱۳/۴۳۲۳	آرمچیر (۵، ۵)
۱۲/۴۸۵۰۵	۵۵/۸۲۰۹	۱۱۰/۰۹۵۹	زیگزاگ (۰، ۹)
۱۲/۸۵۵۹۵	۵۷/۸۰۴۳۷	۱۱۳/۸۸۵۲	آرمچیر (۶، ۶)
۱۲/۵۵۹۸۸	۵۶/۱۶۳۱۱	۱۱۰/۷۸۲۱	زیگزاگ (۰، ۱۰)
۱۲/۸۷۴۳۳	۵۷/۸۰۹۵	۱۱۴/۰۱۴۵	آرمچیر (۷، ۷)
۱۲/۶۶۳۶۶	۵۶/۶۱۵	۱۱۱/۶۸۸۲	زیگزاگ (۰، ۱۲)
۱۲/۸۹۰۵۸	۵۷/۸۱۲۹۳	۱۱۴/۰۹	آرمچیر (۸، ۸)
۱۲/۷۳۳۳۳	۵۶/۸۹۵۹۶	۱۱۲/۲۵۱۳	زیگزاگ (۰، ۱۴)
۱۲/۹۰۴۹۵	۵۷/۸۱۵۷۸	۱۱۴/۱۰۵۵	آرمچیر (۹، ۹)
۱۲/۷۸۲۴۳	۵۷/۰۷۹۵۶	۱۱۲/۶۱۷۶	زیگزاگ (۰، ۱۶)
۱۲/۹۱۷۶۷	۵۷/۸۱۷۶۲	۱۱۴/۱	آرمچیر (۱۰، ۱۰)
۱۲/۸۰۲	۵۷/۱۴۸۷۹	۱۱۲/۷۵۵۵	زیگزاگ (۰، ۱۷)
۱۲/۹۲۸۹۴	۵۷/۸۱۹۴۷	۱۱۴/۰۹۸۶	آرمچیر (۱۱، ۱۱)
۱۲/۸۳۳۸۳	۵۷/۲۵۶۱۴	۱۱۲/۹۶۷۳	زیگزاگ (۰، ۱۹)

### ۲-۲-۳ پیچش

به‌منظور شبیه‌سازی پیچش المان حجمی نماینده، تمامی گره‌های یک انتهای نانولوله همراه با گره‌های انتهای پلیمر در همان سمت، به‌طور کامل مهار می‌گردند، درحالی‌که تمامی گره‌های نانولوله و پلیمر در انتهای دیگر، تحت یک دوران مشخص حول محور المان حجمی نماینده،  $u_{r2}$ ، قرار می‌گیرند. از خروجی‌های تحلیل در نرم‌افزار اباکس، مجموع ممان‌های واکنشی حول محور المان حجمی نماینده،  $T$ ، اثرکننده روی گره‌های انتهای آزاد المان حجمی نماینده، در اثر اعمال دوران  $u_{r2}$  روی آنها می‌باشد. ممان اینرسی قطبی سطح مقطع المان حجمی نماینده،  $J_{RVE}$ ، به‌صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌گردد:

$$J_{RVE} = \frac{\pi}{2} \times (R_{o,RVE}^4 - r_{i,CNT}^4)$$

با استفاده از شیب نمودار ممان-دوران،  $\frac{dT}{du_{r2}}$ ، در دوران بسیار کوچک، می توان مدول برشی آن،  $G_{RVE}$ ، را از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$G_{RVE} = \frac{dT}{du_{r2}} \times \frac{L_{RVE}}{J_{RVE}} \quad ۱۶-۳$$

به منظور ارائه نمودارهای تنش- کرنش، تنش برشی،  $\tau$ ، و کرنش برشی،  $\gamma$ ، با استفاده از روابط زیر تعیین می-گردند.

$$\tau = \frac{T \times R_{o,RVE}}{J_{RVE}} \quad ۱۷-۳$$

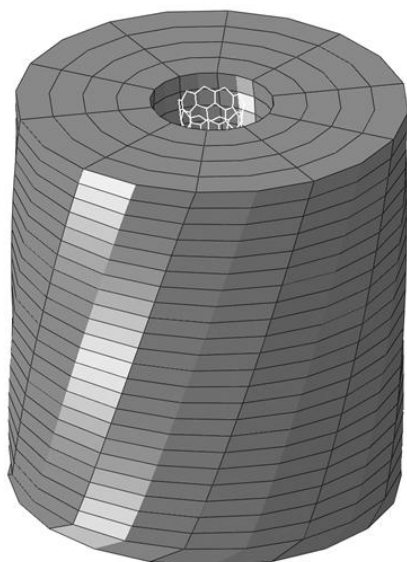
$$\gamma = \frac{R_{o,RVE} \times u_{r2}}{L_{RVE}} \quad ۱۸-۳$$

برای نمونه، شکل ۳-۲۴، المان حجمی نماینده را در جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰، ۰)، پیش و پس از بارگذاری پیچشی نمایش می‌دهد. شکل ۳-۲۵ نیز، المان حجمی نماینده را در جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، پیش و پس از بارگذاری پیچشی نشان می‌دهد.

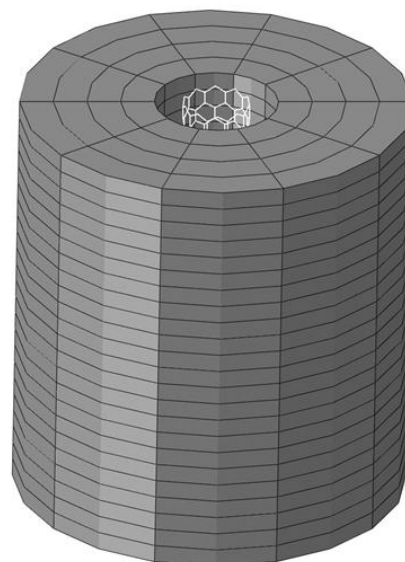
همچنین، شکل ۳-۲۶ منحنی‌های تنش برشی-کرنش برشی حاصل از بارگذاری پیچشی این دو المان حجمی نماینده نامبرده، حاوی نانولوله‌های تقریباً هم‌قطر آرمچیر (۶، ۶) و زیگزاگ (۱۰، ۰)، با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ها، را نشان می‌دهد.

همان‌طور که از شکل ۳-۲۶ مشهود است، نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰، ۰) در مقایسه با نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، در کرنش‌های کوچک، سفتی بالاتری از خود نشان می‌دهد، که در نتیجه مدول برشی بالاتری برای آن محاسبه خواهد گشت. اما در کرنش‌های بزرگ، نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶) در مقایسه با نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰، ۰)، مقاومت بالاتری در برابر تغییرشکل برشی از خود نمایش می‌دهد.

اکنون اثر استفاده از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ با قطرهای گوناگون، روی مدول برشی نانوکامپوزیت بررسی می‌شود. بدین منظور، منحنی‌های تغییرات مدول برشی نانوکامپوزیت با جزءهای حجمی نانولوله‌ی ۱٪، ۵٪، و ۱۰٪، نسبت به قطر نانولوله‌های مختلف، برای هر دو گروه نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ، رسم می‌گردند (شکل‌های ۳-۲۷، ۳-۲۸، و ۳-۲۹). اندازه‌های مدول برشی این نانوکامپوزیت‌ها نیز در جدول ۳-۳ ارائه می‌گردند.

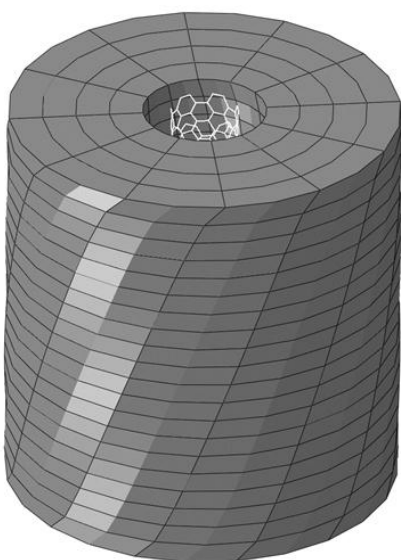


ب

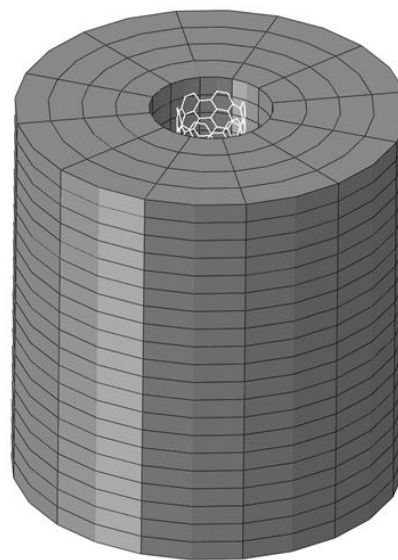


الف

شکل ۳-۲۴ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی زیگزاگ  $(۱۰, ۰)$ ، الف) پیش، و ب) پس از اعمال پیچش به میزان  $۴۴/۴۷^\circ$ .

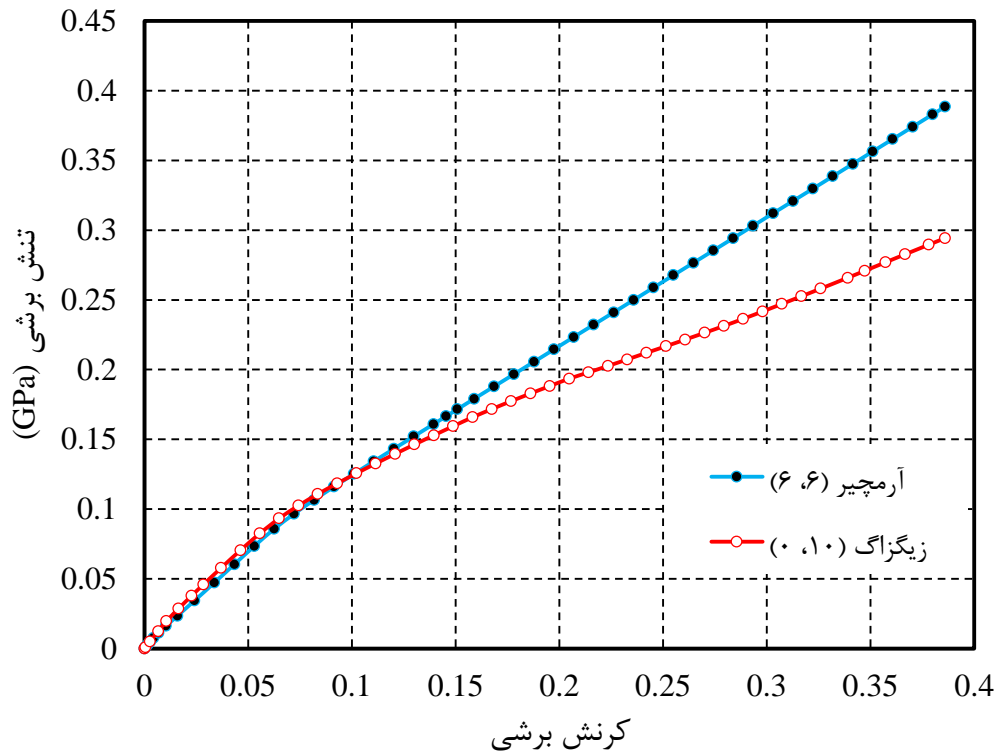


ب

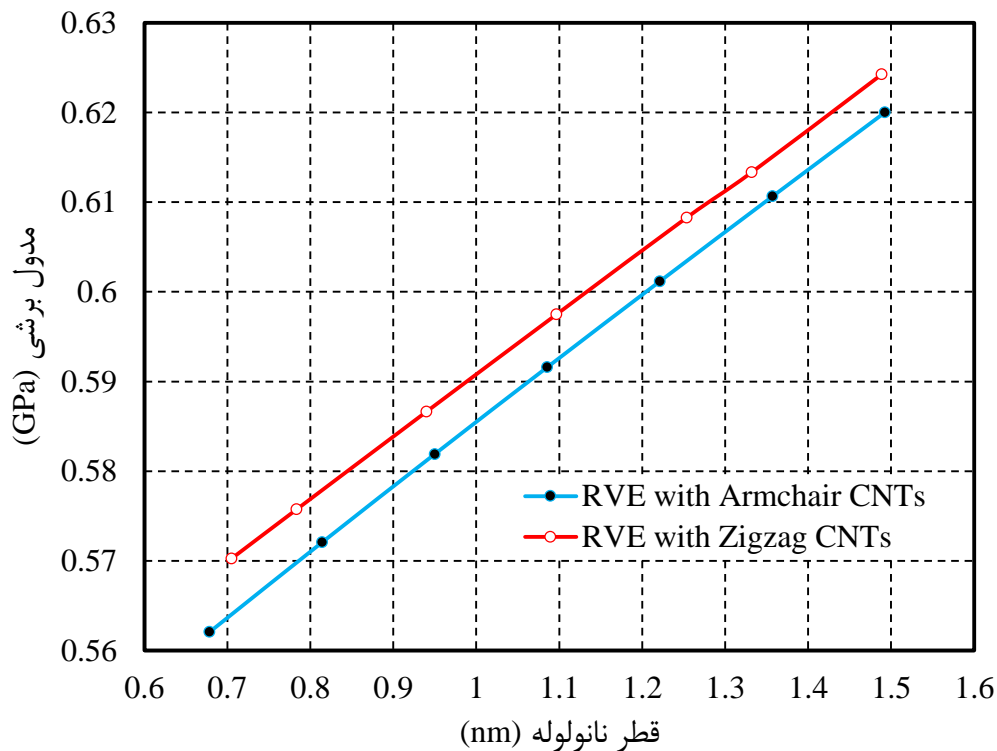


الف

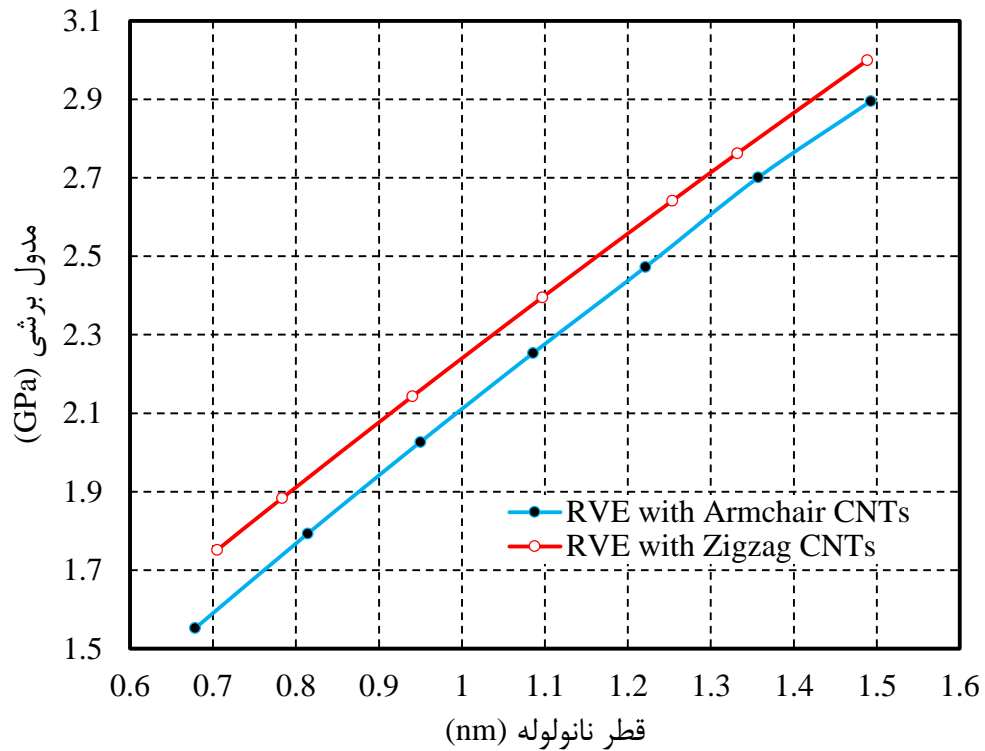
شکل ۳-۲۵ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر  $(۶, ۶)$ ، الف) پیش، و ب) پس از اعمال پیچش به میزان  $۷۵/۵۵^\circ$ .



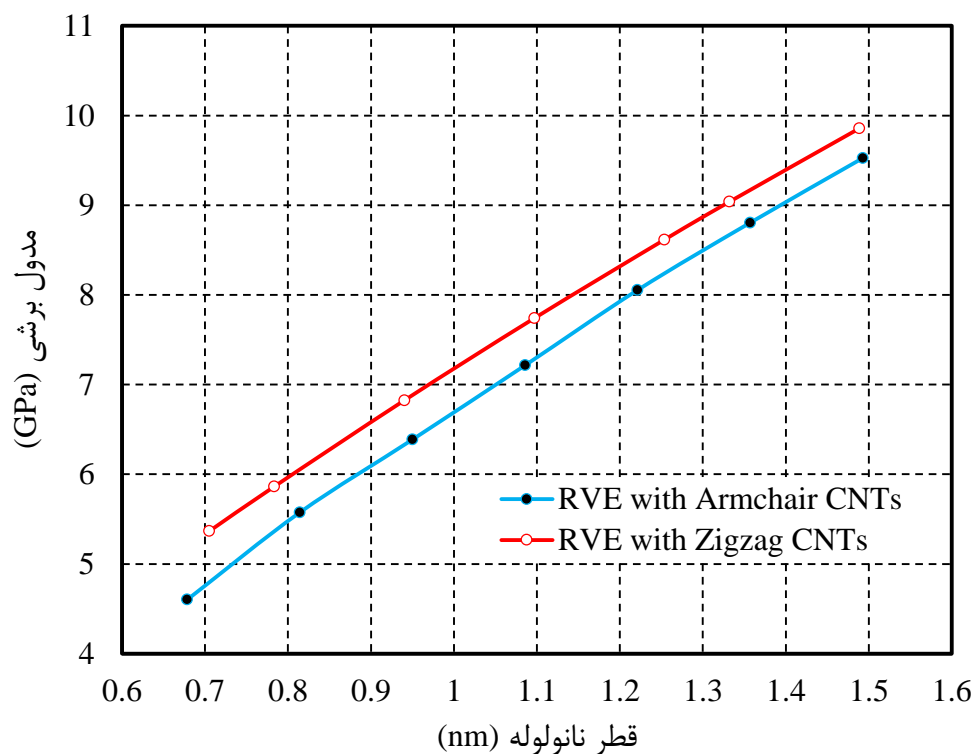
شکل ۳-۲۶ منحنی‌های تنش برشی-کرنش برشی حاصل از بارگذاری پیچشی دو المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌های آرمچیر (۶،۶) و زیگزاگ (۰،۱۰)، با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ها.



شکل ۳-۲۷ منحنی‌های تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.



شکل ۲۸-۳ منحنی‌های تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۵٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.



شکل ۲۹-۳ منحنی‌های تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱۰٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.

همان‌طور که از شکل‌های ۳-۲۷، ۳-۲۸، و ۳-۲۹ مشاهده می‌شود، با افزایش قطر نانولوله بکاررفته در نانوکامپوزیت، مدول برشی نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد، به‌صورتی که شیب تغییرات مدول برشی المان حجمی نماینده نسبت به قطر نانولوله، برای هر دو حالت، المان حجمی نماینده با نانولوله‌ی آرمچیر و نیز با نانولوله‌ی زیگزاگ، تقریباً یکسان می‌باشند. همچنین با مقایسه‌ی دو منحنی موجود در هر یک از شکل‌ها، مشاهده می‌گردد که نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی زیگزاگ در مقایسه با نانوکامپوزیت حاصل از نانولوله‌ی آرمچیر هم‌قطر، مدول برشی بالاتری از خود نمایش می‌دهد.

از بررسی نتایج دریافت می‌شود که در جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ها، ۱/۰۸ تا ۱/۱۹، و ۱/۱ تا ۱/۲، در جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ها، ۲/۹۸ تا ۵/۵۷، و ۳/۳۷ تا ۵/۷۷، و در جزء حجمی ۱۰٪ از نانولوله‌ها، ۸/۸۵ تا ۱۸/۳۲، و ۱۰/۳۲ تا ۱۸/۹۵، برابر افزایش در مدول برشی نانوکامپوزیت نسبت به مدول برشی پلیمر خالص اولیه، به‌ترتیب با بهره‌گیری از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ گوناگون، حاصل گشته‌است؛ که بهبود در خواص نانوکامپوزیت، نسبت به پلیمر خالص را نشان می‌دهد.

جدول ۳-۳ مدول برشی نانوکامپوزیت، در جزء‌های حجمی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪ از نانولوله‌های تقویت‌کننده مختلف.

$G_{RVE}$ (GPa)			
جزء حجمی ۱۰٪	جزء حجمی ۵٪	جزء حجمی ۱٪	
۴/۶۰۱۲۲۲	۱/۵۵۲۰۱۳	۰/۵۶۲۰۶۱	آرمچیر (۵، ۵)
۵/۳۶۵۲۳۷	۱/۷۵۱۵۳۵	۰/۵۷۰۲۶	زیگزاگ (۰، ۹)
۵/۵۷۴۰۵۸	۱/۷۹۳۰۳۳	۰/۵۷۲۰۶۴	آرمچیر (۶، ۶)
۵/۸۶۲۹۸۶	۱/۸۸۳۶۸۳	۰/۵۷۵۷۳۷	زیگزاگ (۰، ۱۰)
۶/۳۸۶۳۳۷	۲/۰۲۶۴۸۴	۰/۵۸۱۸۹۷	آرمچیر (۷، ۷)
۶/۸۲۳۲۸۵	۲/۱۴۲۶۹۱	۰/۵۸۶۶۴۵	زیگزاگ (۰، ۱۲)
۷/۲۱۳۵۱۳	۲/۲۵۲۷۹۱	۰/۵۹۱۵۹۲	آرمچیر (۸، ۸)
۷/۷۳۹۴۵۵	۲/۳۹۵۱۱۷	۰/۵۹۷۴۸۷	زیگزاگ (۰، ۱۴)
۸/۰۵۳۵۷۸	۲/۴۷۲۵۹۵	۰/۶۰۱۱۶۸	آرمچیر (۹، ۹)
۸/۶۱۴۴۵۱	۲/۶۴۱۳۸	۰/۶۰۸۲۶۵	زیگزاگ (۰، ۱۶)
۸/۸۰۴۱۹۵	۲/۷۰۰۵۱۵	۰/۶۱۰۶۳۲	آرمچیر (۱۰، ۱۰)
۹/۰۳۷۳۶۲	۲/۷۶۲۲۵۶	۰/۶۱۳۳۱۳	زیگزاگ (۰، ۱۷)
۹/۵۲۴۶۵۹	۲/۸۹۴۷۴۷	۰/۶۲۰۰۰۹	آرمچیر (۱۱، ۱۱)
۹/۸۵۶۰۴۶	۲/۹۹۹۴۱۹	۰/۶۲۴۲۳۳	زیگزاگ (۰، ۱۹)

## ۳-۲-۳ خمش

به منظور شبیه‌سازی خمش المان حجمی نماینده، تمامی گره‌های یک انتهای نانولوله همراه با گره‌های انتهای پلیمر در همان سمت، به طور کامل مهار می‌گردند، درحالی‌که تمامی گره‌های نانولوله و پلیمر در انتهای دیگر، تحت یک دوران مشخص حول محور سطح مقطع المان حجمی نماینده،  $u_{r1}$  قرار می‌گیرند. از خروجی‌های تحلیل در نرم‌افزار اباکس، مجموع ممان‌های واکنشی حول محور سطح مقطع المان حجمی نماینده،  $M$ ، اثرکننده روی گره‌های انتهای آزاد المان حجمی نماینده، در اثر اعمال دوران  $u_{r1}$  روی آنها می‌باشد. ممان اینرسی سطح مقطع المان حجمی نماینده،  $I_{RVE}$ ، به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌گردد:

$$I_{RVE} = \frac{\pi}{4} \times (R_{o,RVE}^4 - r_{i,CNT}^4) \quad ۱۹-۳$$

با استفاده از شیب نمودار ممان-دوران،  $\frac{dM}{du_{r1}}$ ، در دوران بسیار کوچک، می‌توان صلابت خمشی آن،  $(EI)_{RVE}$ ، را از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$(EI)_{RVE} = \frac{dM}{du_{r1}} \times L_{RVE} \quad ۲۰-۳$$

مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت،  $E_{RVE,ben}$ ، نیز از تقسیم رابطه‌ی ۲۰-۳ بر رابطه‌ی ۱۹-۳ به دست می‌آید.

$$E_{RVE,ben} = \frac{dM}{du_{r1}} \times \frac{L_{RVE}}{I_{RVE}} \quad ۲۱-۳$$

به منظور ارائه‌ی نمودارهای تنش-کرنش، تنش خمشی،  $\sigma_b$ ، و کرنش خمشی،  $\varepsilon_b$ ، با استفاده از روابط زیر تعیین می‌گردند.

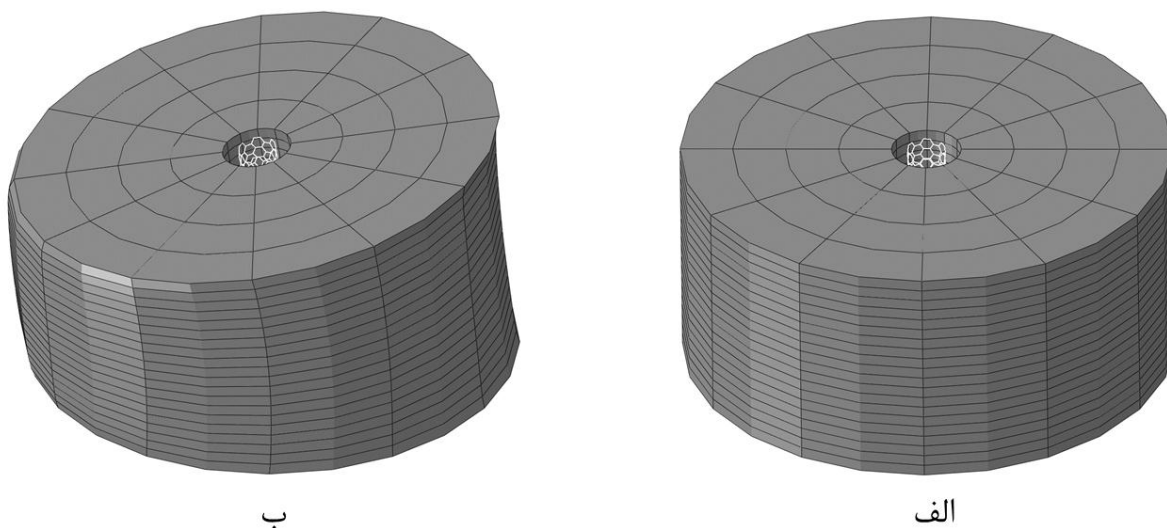
$$\sigma_b = \frac{M \times R_{o,RVE}}{I_{RVE}} \quad ۲۲-۳$$

$$\varepsilon_b = \frac{R_{o,RVE} \times u_{r1}}{L_{RVE}} \quad ۲۳-۳$$

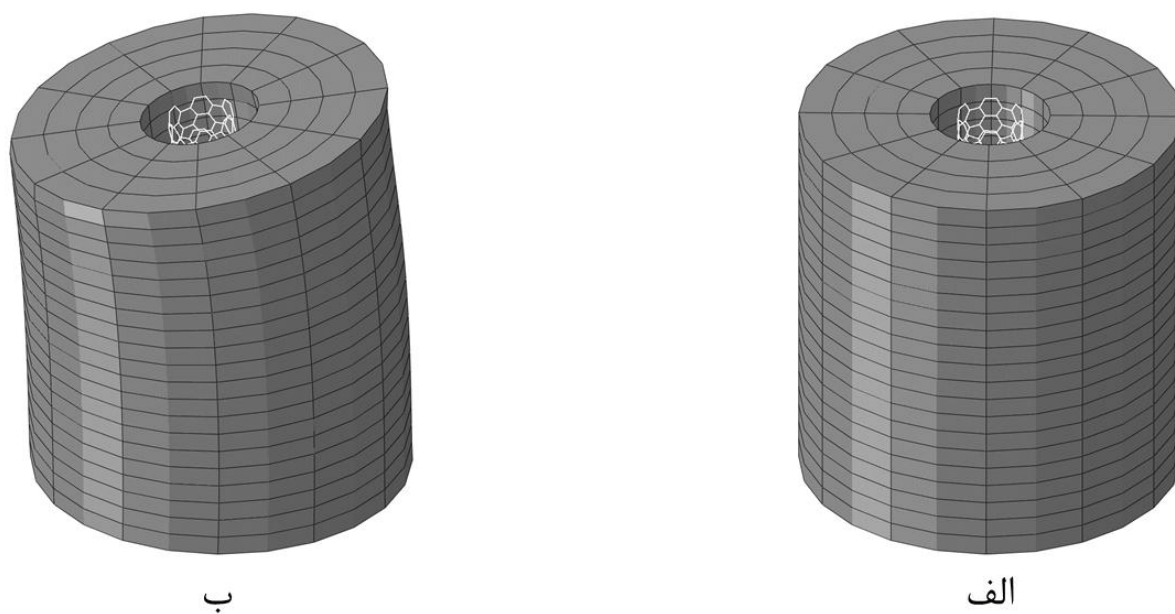
برای نمونه، شکل ۳-۳۰، المان حجمی نماینده را در جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، پیش و پس از بارگذاری خمشی نمایش می‌دهد. شکل ۳-۳۱ نیز، المان حجمی نماینده را در جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، پیش و پس از بارگذاری خمشی نشان می‌دهد.

همچنین، شکل‌های ۳-۳۲ و ۳-۳۳، منحنی‌های تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی دو المان حجمی نماینده نامبرده، با جزء‌های حجمی ۱٪ و ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، را نمایش می‌دهند.

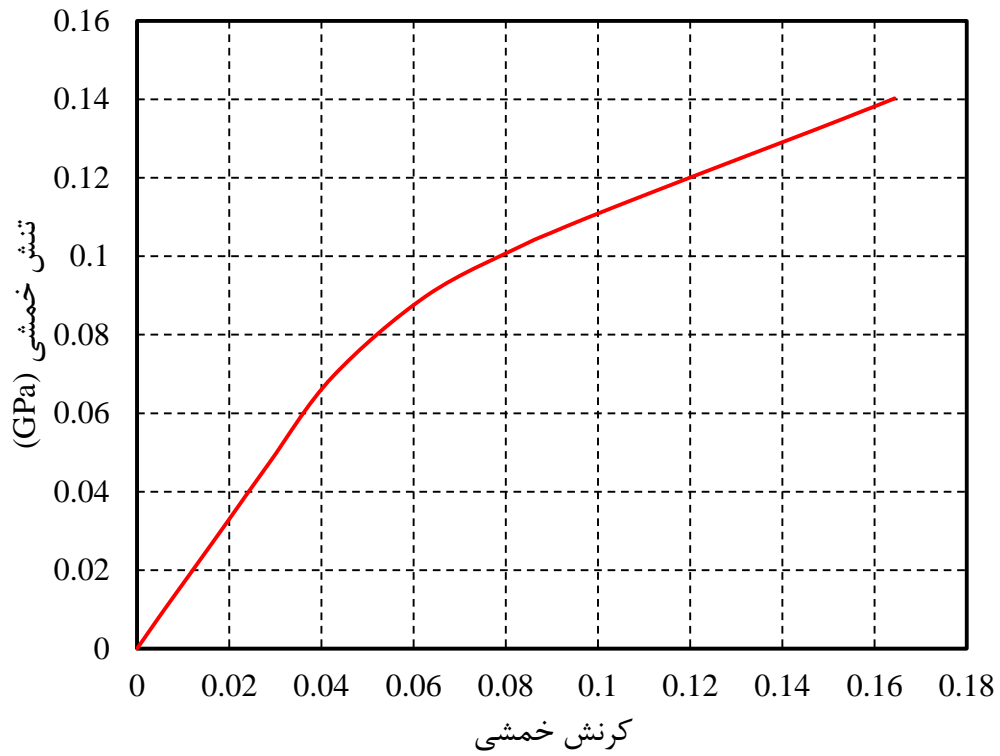




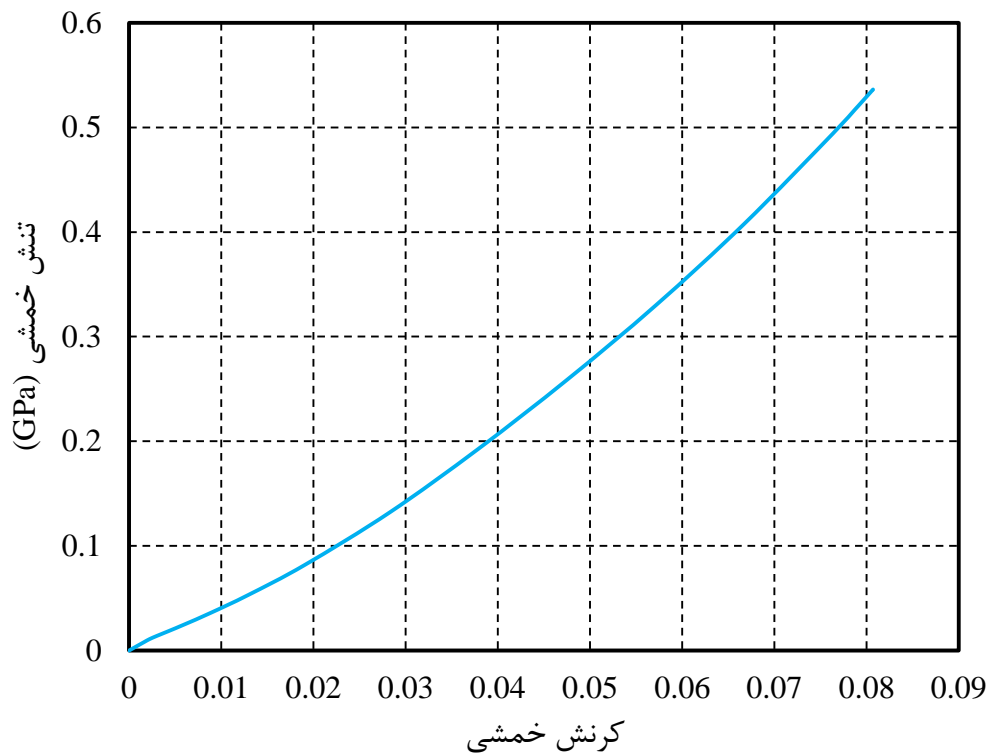
شکل ۳-۳۰ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال خمش به میزان  $8/82^\circ$ .



شکل ۳-۳۱ المان حجمی نماینده با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، الف) پیش، و ب) پس از اعمال خمش به میزان  $9/63^\circ$ .



شکل ۳۲-۳ منحنی تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، با جزء حجمی ۱٪ از نانولوله‌ها.

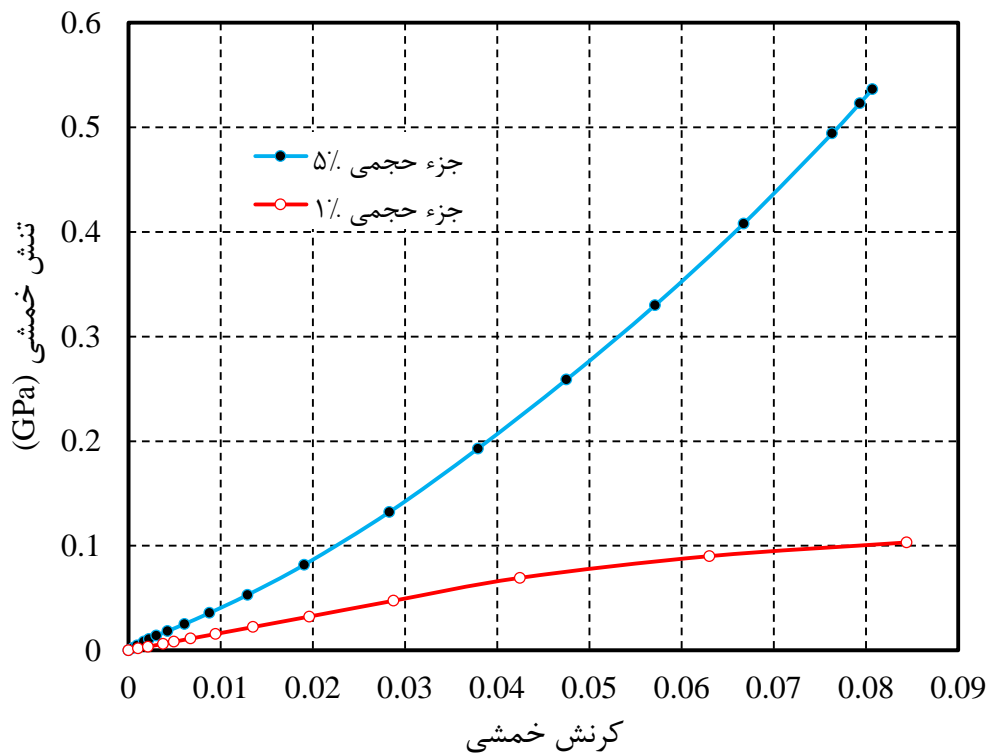


شکل ۳۳-۳ منحنی تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، با جزء حجمی ۵٪ از نانولوله‌ها.

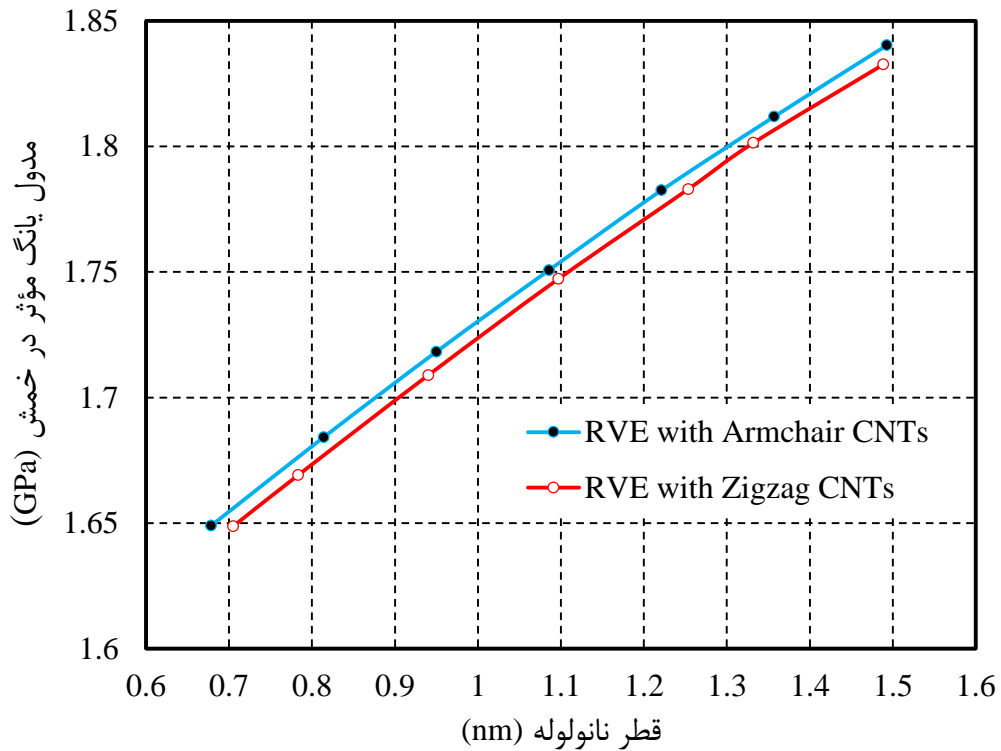
به منظور درک بهتر تأثیر تغییر جزء حجمی نانولوله روی نمودارها، دو منحنی مربوط به شکل‌های ۳-۳۲ و ۳-۳۳، در شکل ۳-۳۴، با یکدیگر نمایش داده می‌شوند. از شکل ۳-۳۴ به سادگی می‌توان مشاهده نمود که مطابق انتظار، با افزایش جزء حجمی نانولوله در المان حجمی نماینده، مقاومت نانوکامپوزیت در برابر تغییر شکل خمشی به طور چشمگیری افزایش می‌یابد.

اکنون اثر استفاده از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ با قطرهای گوناگون، روی مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت بررسی می‌شود. بدین منظور، منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت با جزءهای حجمی نانولوله‌ی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪، نسبت به قطر نانولوله‌های مختلف، برای هر دو گروه نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ، رسم می‌گردند (شکل‌های ۳-۳۵، ۳-۳۶ و ۳-۳۷). همچنین، اندازه‌های مدول یانگ مؤثر در خمش این نانوکامپوزیت‌ها در جدول ۳-۴ ارائه می‌گردند.

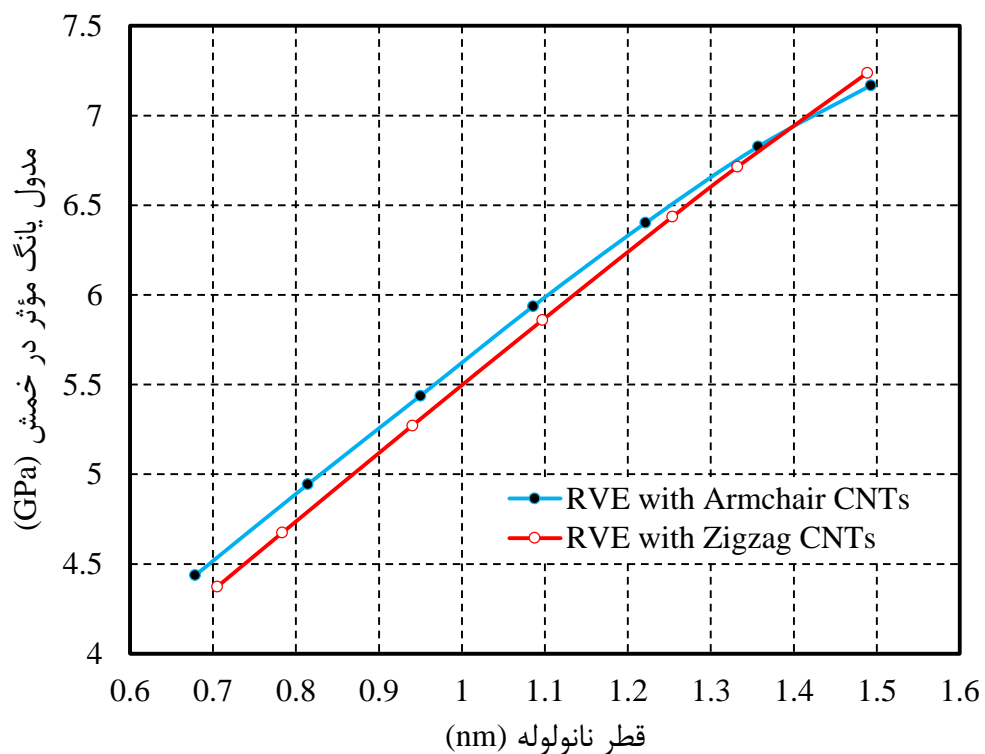
همان‌طور که از شکل‌های ۳-۳۵، ۳-۳۶ و ۳-۳۷ مشاهده می‌شود، با افزایش قطر نانولوله موجود در نانوکامپوزیت، مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد، که البته شیب تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با نانولوله‌های زیگزاگ نسبت به قطر نانولوله، از شیب تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با نانولوله‌های آرمچیر نسبت به قطر نانولوله، اندکی بیشتر می‌باشد.



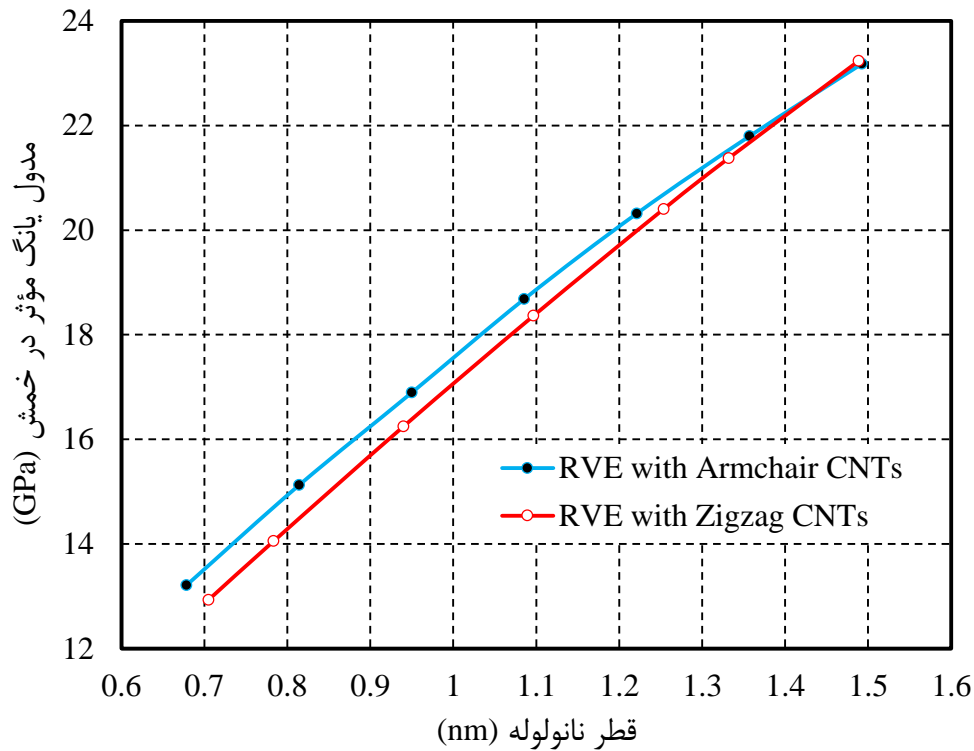
شکل ۳-۳۴ منحنی‌های تنش خمشی-کرنش خمشی حاصل از بارگذاری خمشی دو المان حجمی نماینده، حاوی نانولوله‌ی آرمچیر (۶، ۶)، با جزءهای حجمی ۱٪ و ۵٪ از نانولوله‌ها.



شکل ۳۵-۳ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.



شکل ۳۶-۳ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۵٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.



شکل ۳-۳۷ منحنی‌های تغییرات مدول یانگ مؤثر در خمش المان حجمی نماینده با جزء حجمی نانولوله ۱۰٪، نسبت به قطرهای مختلفی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ.

همچنین با مقایسه‌ی دو منحنی موجود در هر یک از شکل‌های ۳-۳۵، ۳-۳۶، و ۳-۳۷، مشاهده می‌گردد که المان حجمی نماینده حاصل از نانولوله‌ی آرمچیر در مقایسه با المان حجمی نماینده حاصل از نانولوله‌ی زیگزاگ هم‌قطر، تقریباً در تمامی موارد، مدول یانگ مؤثر در خمش بالاتری از خود ارائه می‌دهد.

در فصل بعد، نتیجه‌گیری دریافت‌شده از انجام این پژوهش، همراه با پیشنهادهایی به‌منظور انجام پژوهش‌های آتی ارائه می‌گردند.

جدول ۳-۴ مدول یانگ مؤثر در خمش نانوکامپوزیت، در جزءهای حجمی ۱٪، ۵٪ و ۱۰٪ از نانولوله‌های تقویت‌کننده مختلف.

$E_{RVE,ben}$ (GPa)			
جزء حجمی ۱٪	جزء حجمی ۵٪	جزء حجمی ۱۰٪	
۱/۶۴۸۹۳۸	۴/۴۳۶۱۹۷	۱۳/۲۱۲۴۳	آرمچیر (۵، ۵)
۱/۶۴۸۷۳۲	۴/۳۷۳۰۵۷	۱۲/۹۳۳۷۳	زیگزاگ (۰، ۹)
۱/۶۸۴۲۰۶	۴/۹۴۳۵۸۴	۱۵/۱۲۵۹۱	آرمچیر (۶، ۶)
۱/۶۶۹۱۲	۴/۶۷۳۷۲۱	۱۴/۰۵۴۴	زیگزاگ (۰، ۱۰)
۱/۷۱۸۲۰۵	۵/۴۳۷۰۷۹	۱۶/۸۹۲۴۷	آرمچیر (۷، ۷)
۱/۷۰۸۸۶۸	۵/۲۷۰۸۳۶	۱۶/۲۴۹۰۸	زیگزاگ (۰، ۱۲)
۱/۷۵۰۶۹۳	۵/۹۳۵۲۵۶	۱۸/۶۸۱۹۵	آرمچیر (۸، ۸)
۱/۷۴۷۱۷۵	۵/۸۵۸۶۴۳	۱۸/۳۶۴	زیگزاگ (۰، ۱۴)
۱/۷۸۲۵۱۴	۶/۴۰۰۸۷۵	۲۰/۳۱۸۱۷	آرمچیر (۹، ۹)
۱/۷۸۲۹۵۷	۶/۴۳۴۸۳۱	۲۰/۴۰۲۱۴	زیگزاگ (۰، ۱۶)
۱/۸۱۱۸۲	۶/۸۲۶۲۳۸	۲۱/۷۹۳۸۹	آرمچیر (۱۰، ۱۰)
۱/۸۰۱۳۵۶	۶/۷۱۳۲۷۴	۲۱/۳۷۳۷۱	زیگزاگ (۰، ۱۷)
۱/۸۴۰۲۲۴	۷/۱۶۷۳۴۹	۲۳/۱۸۰۰۵	آرمچیر (۱۱، ۱۱)
۱/۸۳۲۵۹۹	۷/۲۳۷۳۴۳	۲۳/۲۳۳۰۱	زیگزاگ (۰، ۱۹)



## فصل ۴ نتیجه‌گیری و پیشنهادهایی برای پژوهش‌های آتی

### ۴-۱- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک مدل اجزای محدود سه‌بعدی پیوسته بر مبنای تئوری اتمی، به‌منظور تعیین رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره ارائه شد. نانولوله‌ها در مقیاس اتمی و بر اساس مکانیک ساختاری مولکولی اصلاح‌شده، به‌صورت یک قاب فضایی با المان‌های تیر با مقطع عمومی، مدل‌سازی شدند. المان تیر با مقطع عمومی، امکان تمایز میان سفتی‌های خمش درون‌صفحه‌ای و خمش برون‌صفحه‌ای را ایجاد می‌نماید، در صورتی‌که این امکان در پژوهش‌های صورت‌گرفته در گذشته بر اساس مدل‌سازی با المان تیر با مقطع دایره‌ای وجود نداشت. تعدادی نانولوله‌ی آرمچیر همراه با نانولوله‌های زیگزاگ هم‌قطرشان، تحت شرایط بارگذاری کششی، پیچشی، و خمشی قرار گرفتند، تا مشخصه‌های مکانیکی متناظر با شرایط مختلف بارگذاری، همراه با رفتار مکانیکی آنها تحت این شرایط حاصل گردند. نتایج حاصل با نتایج موجود در پژوهش‌های گذشته مقایسه شد، که توافق خوبی مشاهده گردید. مدل‌سازی پلیمر نیز به‌صورت پیوسته صورت پذیرفت. المان حجمی نماینده از طریق قراردادن نانولوله درون مدل پلیمر ایجاد گشت. المان‌های حجمی نماینده حاصل از قراردادن هر یک از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ، در جزء‌های حجمی مختلف از نانولوله، تحت شرایط بارگذاری کششی، پیچشی، و خمشی قرار گرفتند، تا ویژگی‌های مکانیکی متناظر با شرایط مختلف بارگذاری، همراه با رفتار مکانیکی آنها تحت این شرایط معین گردند. نتایج به‌دست‌آمده، بهبود چشمگیری در خواص نانوکامپوزیت، نسبت به پلیمر خالص، را نشان دادند.



## ۴-۲- پیشنهادهایی برای پژوهش‌های آتی

در انجام این پژوهش فرض‌هایی اعمال شدند؛ مانند اینکه نانولوله‌ها صاف و مستقیم در نظر گرفته شدند، که می‌دانیم در عمل این‌طور نمی‌باشد، به‌طوری‌که آنها کج و دارای اعوجاج می‌باشند. فرض دیگر اینکه استفاده از المان حجمی نماینده به این معنی است که تمامی نانولوله‌ها درون زمینه به‌صورت یکنواخت و منظم پخش شده‌اند و همگی آنها با یکدیگر هم‌راستا می‌باشند، درحالی‌که در عمل و بدون اعمال شرایط خاص، این‌طور نیست؛ به‌صورتی‌که نانولوله‌ها به‌طور تصادفی در قسمت‌های مختلف زمینه، با جهت‌گیری‌های مختلف، قرار می‌گیرند. تمرکز روی پژوهش‌های آتی را می‌توان در جهت حذف فرض‌های مذکور در بالا قرار داد، به‌صورتی‌که شبیه‌سازی‌ها هرچه بیشتر به واقعیت نزدیک گردند، تا نتایج قابل اعتمادتری به‌دست آیند.

## مراجع

- [1] Kim, P., et al. "Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes." *Physical review letters* 87.21 (2001): 215502.
- [2] Jorio, Ado, Gene Dresselhaus, and Mildred S. Dresselhaus, eds. *Carbon nanotubes: advanced topics in the synthesis, structure, properties and applications*. Vol. 111. Springer Science & Business Media, 2007.
- [3] O'connell, Michael J. *Carbon nanotubes: properties and applications*. CRC press, 2006.
- [4] Reich, Stephanie, Christian Thomsen, and Janina Maultzsch. *Carbon nanotubes: basic concepts and physical properties*. John Wiley & Sons, 2008.
- [5] Rotkin, Slava V., and Shekhar Subramoney, eds. *Applied physics of carbon nanotubes: fundamentals of theory, optics and transport devices*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [6] Loiseau, Annick, et al. "Understanding carbon nanotubes." *Lect. Notes Phys* 677 (2006): 495-543.
- [7] Overney, G., W. Zhong, and D. Tomanek. "Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules." *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters* 27.1 (1993): 93-96.
- [8] Lu, Jian Ping. "Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes." *Physical Review Letters* 79.7 (1997): 1297.
- [9] Yu, Min-Feng, et al. "Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties." *Physical review letters* 84.24 (2000): 5552.
- [10] Yu, Min-Feng, et al. "Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load." *Science* 287.5453 (2000): 637-640.
- [11] Wong, Eric W., Paul E. Sheehan, and Charles M. Lieber. "Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes." *Science* 277.5334 (1997): 1971-1975.
- [12] Lau, Alan Kin-Tak, and David Hui. "The revolutionary creation of new advanced materials—carbon nanotube composites." *Composites Part B: Engineering* 33.4 (2002): 263-277.

- [13] Vigolo, Brigitte, et al. "Macroscopic fibers and ribbons of oriented carbon nanotubes." *Science* 290.5495 (2000): 1331-1334.
- [14] Jiang, Kaili, Qunqing Li, and Shoushan Fan. "Nanotechnology: spinning continuous carbon nanotube yarns." *Nature* 419.6909 (2002): 801-801.
- [15] Zhang, Mei, Ken R. Atkinson, and Ray H. Baughman. "Multifunctional carbon nanotube yarns by downsizing an ancient technology." *Science* 306.5700 (2004): 1358-1361.
- [16] Dalton, Alan B., et al. "Super-tough carbon-nanotube fibres." *Nature* 423.6941 (2003): 703-703.
- [17] Suhr, Jonghwan, et al. "Temperature-activated interfacial friction damping in carbon nanotube polymer composites." *Nano letters* 6.2 (2006): 219-223.
- [18] Coleman, Jonathan N., Umar Khan, and Yurii K. Gun'ko. "Mechanical reinforcement of polymers using carbon nanotubes." *Advanced Materials* 18.6 (2006): 689-706.
- [19] Zheng, L. X., et al. "Ultralong single-wall carbon nanotubes." *Nature materials* 3.10 (2004): 673-676.
- [20] Velasco-Santos, Carlos, et al. "Improvement of thermal and mechanical properties of carbon nanotube composites through chemical functionalization." *Chemistry of Materials* 15.23 (2003): 4470-4475.
- [21] Breuer, O., and Uttandaraman Sundararaj. "Big returns from small fibers: a review of polymer/carbon nanotube composites." *Polymer composites* 25.6 (2004): 630-645.
- [22] Kim, Philip, et al. "Mesoscopic thermal transport and energy dissipation in carbon nanotubes." *Physica B: Condensed Matter* 323.1 (2002): 67-70.
- [23] Xie, Xiao-Lin, Yiu-Wing Mai, and Xing-Ping Zhou. "Dispersion and alignment of carbon nanotubes in polymer matrix: a review." *Materials Science and Engineering: R: Reports* 49.4 (2005): 89-112.
- [24] Thostenson, Erik T., Zhifeng Ren, and Tsu-Wei Chou. "Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review." *Composites science and technology* 61.13 (2001): 1899-1912.
- [25] Coleman, Jonathan N., et al. "Small but strong: a review of the mechanical properties of carbon nanotube-polymer composites." *Carbon* 44.9 (2006): 1624-1652.

- [26] Chae, Han Gi, et al. "A comparison of reinforcement efficiency of various types of carbon nanotubes in polyacrylonitrile fiber." *Polymer* 46.24 (2005): 10925-10935.
- [27] Moniruzzaman, Mohammad, and Karen I. Winey. "Polymer nanocomposites containing carbon nanotubes." *Macromolecules* 39.16 (2006): 5194-5205.
- [28] Bhattacharyya, Arup R., et al. "Crystallization and orientation studies in polypropylene/single wall carbon nanotube composite." *Polymer* 44.8 (2003): 2373-2377.
- [29] Lau, Kin-tak, and San-qiang Shi. "Failure mechanisms of carbon nanotube/epoxy composites pretreated in different temperature environments." *Carbon* 40.15 (2002): 2965-2968.
- [30] Qian, D., et al. "Load transfer and deformation mechanisms in carbon nanotube-polystyrene composites." *Applied physics letters* 76.20 (2000): 2868-2870.
- [31] Liu, Tianxi, et al. "Morphology and mechanical properties of multiwalled carbon nanotubes reinforced nylon-6 composites." *Macromolecules* 37.19 (2004): 7214-7222.
- [32] Ganguli, Sabyasachi, Heshmat Aglan, and Derrick Dean. "Microstructural origin of strength and toughness of epoxy nanocomposites." *Journal of elastomers and plastics* 37.1 (2005): 19-35.
- [33] Baykasoglu, Cengiz, Mesut Kirca, and Ata Mugan. "Nonlinear failure analysis of carbon nanotubes by using molecular-mechanics based models." *Composites Part B: Engineering* 50 (2013): 150-157.
- [34] Tiano, Thomas, Margaret Roylance, and John Gassner. "Functionalization of single-wall nanotubes for improved structural composites." *International SAMPE Technical Conference*. Vol. 32. 2000.
- [35] Shen, Shengping, and S. N. Atluri. "Atomic-level stress calculation and continuum-molecular system equivalence." *Computer Modeling in Engineering and Sciences* 6 (2004): 91-104.
- [36] Odegard, Gregory M., et al. "Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials." *Composites Science and Technology* 62.14 (2002): 1869-1880.
- [37] Li, Chunyu, and Tsu-Wei Chou. "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes." *International Journal of Solids and Structures* 40.10 (2003): 2487-2499.
- [38] Natsuki, Toshiaki, and Morinobu Endo. "Stress simulation of carbon nanotubes in tension and compression." *Carbon* 42.11 (2004): 2147-2151.

- [39] Xiao, J. R., B. A. Gama, and J. W. Gillespie. "An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes." *International Journal of Solids and Structures* 42.11 (2005): 3075-3092.
- [40] Lau, Kin-Tak, et al. "On the effective elastic moduli of carbon nanotubes for nanocomposite structures." *Composites Part B: Engineering* 35.2 (2004): 95-101.
- [41] Tserpes, K. I., and P. Papanikos. "Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes." *Composites Part B: Engineering* 36.5 (2005): 468-477.
- [42] Meo, Michele, and Marco Rossi. "Prediction of Young's modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modelling." *Composites Science and Technology* 66.11 (2006): 1597-1605.
- [43] Giannopoulos, G. I., P. A. Kakavas, and N. K. Anifantis. "Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach." *Computational Materials Science* 41.4 (2008): 561-569.
- [44] Li, Haijun, and Wanlin Guo. "Transversely isotropic elastic properties of single-walled carbon nanotubes by a rectangular beam model for the C-C bonds." *Journal of Applied Physics* 103.10 (2008): 103501.
- [45] Chen, Wen-Hwa, Hsien-Chie Cheng, and Yang-Lun Liu. "Radial mechanical properties of single-walled carbon nanotubes using modified molecular structure mechanics." *Computational Materials Science* 47.4 (2010): 985-993.
- [46] Valavala, P. K., and G. M. Odegard. "Modeling techniques for determination of mechanical properties of polymer nanocomposites." *Rev. Adv. Mater. Sci* 9 (2005): 34-44.
- [47] Wernik, J. M., and Shaker A. Meguid. "Coupling atomistics and continuum in solids: status, prospects, and challenges." *International Journal of Mechanics and Materials in Design* 5.1 (2009): 79-110.
- [48] Meguid, S. A., J. M. Wernik, and Z. Q. Cheng. "Atomistic-based continuum representation of the effective properties of nano-reinforced epoxies." *International Journal of Solids and Structures* 47.13 (2010): 1723-1736.
- [49] Wernik, J. M., and S. A. Meguid. "Multiscale modeling of the nonlinear response of nano-reinforced polymers." *Acta Mechanica* 217.1-2 (2011): 1-16.

- [50] Liu, Y. J., and X. L. Chen. "Evaluations of the effective material properties of carbon nanotube-based composites using a nanoscale representative volume element." *Mechanics of materials* 35.1 (2003): 69-81.
- [51] Hu, N., et al. "Prediction of elastic properties of carbon nanotube reinforced composites." *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 461.2058 (2005): 1685-1710.
- [52] Tserpes, K. I., et al. "Multi-scale modeling of tensile behavior of carbon nanotube-reinforced composites." *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 49.1 (2008): 51-60.
- [53] Li, Chunyu, and Tsu-Wei Chou. "Multiscale modeling of compressive behavior of carbon nanotube/polymer composites." *Composites science and technology* 66.14 (2006): 2409-2414.
- [54] Shokrieh, Mahmood M., and Roham Rafiee. "On the tensile behavior of an embedded carbon nanotube in polymer matrix with non-bonded interphase region." *Composite Structures* 92.3 (2010): 647-652.
- [55] Ayatollahi, M. R., S. Shadlou, and M. M. Shokrieh. "Multiscale modeling for mechanical properties of carbon nanotube reinforced nanocomposites subjected to different types of loading." *Composite Structures* 93.9 (2011): 2250-2259.
- [56] Behfar, K., and R. Naghdabadi. "Nanoscale modeling of an embedded multi-shell fullerene and its application to vibrational analysis." *International journal of engineering science* 44.17 (2006): 1156-1163.
- [57] Rappé, Anthony K., et al. "UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations." *Journal of the American Chemical Society* 114.25 (1992): 10024-10035.
- [58] Cornell, Wendy D., et al. "A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules." *Journal of the American Chemical Society* 117.19 (1995): 5179-5197.
- [59] Gelin, Bruce R. "Molecular modeling of polymer structures and properties." (1994).
- [60] Belytschko, T., et al. "Atomistic simulations of nanotube fracture." *Physical Review B* 65.23 (2002): 235430.

- [61] Esfarjani, Keivan, Narjes Gorjizadeh, and Zahra Nasrollahi. "Molecular dynamics of single wall carbon nanotube growth on nickel surface." *Computational materials science* 36.1 (2006): 117-120.
- [62] Xiao, J. R., J. Staniszewski, and J. W. Gillespie. "Fracture and progressive failure of defective graphene sheets and carbon nanotubes." *Composite structures* 88.4 (2009): 602-609.
- [63] Natsuki, T., and M. Endo. "Structural dependence of nonlinear elastic properties for carbon nanotubes using a continuum analysis." *Applied Physics A* 80.7 (2005): 1463-1468.
- [64] Wernik, Jacob M., and Shaker A. Meguid. "Atomistic-based continuum modeling of the nonlinear behavior of carbon nanotubes." *Acta Mechanica* 212.1-2 (2010): 167-179.
- [65] Arroyo, Marino, and Ted Belytschko. "Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes." *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 59.3 (2004): 419-456.
- [66] Mayo, Stephen L., Barry D. Olafson, and William A. Goddard. "DREIDING: a generic force field for molecular simulations." *Journal of Physical Chemistry* 94.26 (1990): 8897-8909.
- [67] Georgantzinos, S. K., G. I. Giannopoulos, and N. K. Anifantis. "Investigation of stress-strain behavior of single walled carbon nanotube/rubber composites by a multi-scale finite element method." *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 52.3 (2009): 158-164.
- [68] Yang, Seunghwa, et al. "Nonlinear multiscale modeling approach to characterize elastoplastic behavior of CNT/polymer nanocomposites considering the interphase and interfacial imperfection." *International Journal of Plasticity* 41 (2013): 124-146.
- [69] Rouhi, S., Y. Alizadeh, and R. Ansari. "Molecular dynamics simulations of the single-walled carbon nanotubes/poly (phenylacetylene) nanocomposites." *Superlattices and Microstructures* 72 (2014): 204-218.
- [70] Dresselhaus, M. S., G. Dresselhaus, and R. Saito. "Physics of carbon nanotubes." *Carbon* 33.7 (1995): 883-891.
- [71] Hu, Yanhong, et al. "Carbon nanostructures for advanced composites." *Reports on Progress in Physics* 69.6 (2006): 1847.
- [72] Battezzati, L., C. Pisani, and F. Ricca. "Equilibrium conformation and surface motion of hydrocarbon molecules physisorbed on graphit." *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics* 71 (1975): 1629-1639.

- [73] Jin, Y., and F. G. Yuan. "Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes." *Composites Science and Technology* 63.11 (2003): 1507-1515.
- [74] Popov, V. N., V. E. Van Doren, and M. Balkanski. "Elastic properties of single-walled carbon nanotubes." *Physical Review B* 61.4 (2000): 3078.
- [75] Srivastava, Deepak, Chenyu Wei, and Kyeongjae Cho. "Nanomechanics of carbon nanotubes and composites." *Applied Mechanics Reviews* 56.2 (2003): 215-230.
- [76] Gupta, Shuchi, K. Dharamvir, and V. K. Jindal. "Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes." *Physical Review B* 72.16 (2005): 165428.
- [77] To, Cho WS. "Bending and shear moduli of single-walled carbon nanotubes." *Finite Elements in Analysis and Design* 42.5 (2006): 404-413.
- [78] Krishnan, A., et al. "Young's modulus of single-walled nanotubes." *Physical Review B* 58.20 (1998): 14013.
- [79] Tomblor, Thomas W., et al. "Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation." *Nature* 405.6788 (2000): 769-772.
- [80] Hall, A. R., et al. "Experimental measurement of single-wall carbon nanotube torsional properties." *Physical review letters* 96.25 (2006): 256102.
- [81] Zuberi, Muhammad Jibrán Shahzad, and Volkan Esat. "Investigating the mechanical properties of single walled carbon nanotube reinforced epoxy composite through finite element modelling." *Composites Part B: Engineering* 71 (2015): 1-9.



## Abstract

In this study a new multiscale model for determining nonlinear behavior of carbon nanotube/polymer composite is proposed. Carbon nanotube (CNT) was modeled at the atomistic level based on modified molecular structural mechanics using 3D beam elements of general section. The beam element of general section distinguishes the in-plane and out-of-plane bending stiffnesses, so that in this case the beam section geometry and its material descriptions are combined. The modified Morse interatomic potential was used for description of atomic interactions in the CNTs. Some of armchair CNTs together with their equivalent zigzag CNTs in diameter, were subjected to tensile, torsional, and bending loading conditions to extract their mechanical properties from these loading conditions. The Young's modulus and the Poisson's ratio, the shear modulus, and the effective Young's modulus in bending of the CNTs were calculated from tensile, torsional, and bending loading conditions respectively. The obtained results were compared with the results existing in the literature, which showed good agreement. The polymer was taken into account as a continuum medium, and its 3D finite element model (FEM) was constructed using solid elements by considering its elastoplastic behavior. Using multiscale modeling, the representative volume element (RVE) was built through embedding the CNT within the polymer's model. The Interface between CNT and its surrounding polymer was considered as van der Waals forces defined by Lennard-Jones relation, which were modeled using nonlinear connector elements in Abaqus code. The RVE was subjected to tensile, torsional and bending loading conditions to extract its mechanical properties. The Young's modulus, the shear modulus, and the effective Young's modulus in bending of nanocomposite were calculated from tensile, torsional, and bending loading conditions respectively, and their variation with different volume fractions of CNT were investigated. The stress-strain curves resulting from tensile, torsional and bending loading conditions were reported. The obtained results indicated a magnificent improvement in the mechanical properties of the nanocomposite with respect to the pure polymer.

**Keywords:** - Carbon nanotube (CNT), Polymer-based nanocomposite, Multiscale modeling, Finite element analysis (FEA), Representative volume element (RVE)



دانشگاه شاهرود

Shahrood University  
Faculty: Mechanic

# **Multiscale Modeling of Nonlinear Behavior of Carbon Nanotube-Reinforced Polymer Composites Subjected to Different Types of Loading**

**Seyed Nasser-eddin Mohseni**

Supervisors

**Dr. Mohammad Jafari**

**Dr. Seyed Hadi Ghaderi**

September 2015