

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک

گروه طراحی کاربردی

تعیین مدول یانگ نانو کامپوزیتهای پایه پلیمری به روش FEM

دانشجو:

کیان حصاری

استاد راهنما:

دکتر محمود شریعتی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیر ماه سال ۱۳۸۸

دانشکده: مهندسی مکانیک

گروه: طراحی کاربردی

پایان نامه کارشناسی ارشد آقای کیان حصاری

تحت عنوان:

تعیین مدول یانگ نانو کامپوزیت‌های پایه پلیمری به روش FEM

در تاریخ ۱۳۸۸/۰۴/۳۰ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با درجه عالی .
مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

❖ تقدیم به مادرم که یادش همواره آرامش بخش روح و جانم بوده است.

❖ تقدیم به پدر زحمتکش و دلسوزم که همواره مشوق و راهنمایم بوده است.

❖ تقدیم به همسر مهربان و فداکارم که بدون کمکهای بی دریغ او انجام این پایان نامه امکان پذیر نبود.

حمد و سپاس خداوند یگانه را که هر زمان او را خواندم اجابت نمود و هر زمان او مرا فرا خواند کوتاهی کردم، اما باز هم مورد مهر خود قرار داد تا از جویندگان علم بی‌نهایتش باشم.

انجام این پایان نامه بدون مساعدت بزرگوارانی که نامشان در ذیل درج شده است، ممکن نبود. فرصتی است مغتنم تا زحمات بی دریغ آنها را ارج نهاده و از خداوند منان توفیق روز افزون آنها را آرزو نمایم.

از استاد راهنمای گرانقدر و عزیزم آقای دکتر محمود شریعتی به خاطر قبول زحمت راهنمایی و همراهی بنده در انجام این پایان نامه نهایت قدردانی و سپاس را دارم.

از اساتید بزرگوارم آقایان دکتر ایپک‌چی، دکتر مغربی، دکتر شاه‌مردان که در طول این دوره از محضرشان بهره بسیار بردم، سپاسگزارم.

از همسر عزیز، پدر مهربان و مادر مرحومم که تمام موفقیت‌های زندگی‌ام مرهون زحمات بی‌دریغ و دلسوزانه آنهاست و با صبرشان بنده را در این مدت همراهی نمودند، کمال تشکر را دارم.

از دوستان گرامیم آقایان مهندس پروانه، مهندس مجد، دکتر میرزایی و دکتر آریافر که در طول انجام پایان نامه از راهنماییها و کمکهای مشفقانه و برادرانشان بهره فراوان بردم سپاسگزارم.

تعهد نامه

اینجانب دانشجوی دوره کارشناسی ارشد / دکتری رشته
دانشکده دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه / رساله
..... تحت راهنمایی متعهد می شوم .

- تحقیقات در این پایان نامه / رساله توسط اینجانب انجام شده 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 پایان نامه / رساله 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 صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « **Shahrood University of Technology** » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه / رساله تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه / رساله رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه / رساله ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه / رساله ، در مواردی که به حوزه 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

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه / رساله بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد .

* متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه / رساله وجود داشته باشد .

چکیده :

باتوجه به پیشرفت روزافزون فناوریهای نانو بویژه نانو کامپوزیتها، تعیین خواص مکانیکی نانوکامپوزیتها بویژه نانو کامپوزیتهای پایه پلیمر با توجه به گستردگی کاربرد و نیاز روزافزون به این مواد از جایگاه ویژه ای از اهمیت ویژه ای برخوردار است که این مهم در این پایان نامه به روش اجزاء محدود و توسط نرم افزار ABAQUS تحقق می یابد.

با توجه به شبیه سازی نانو تیوب در مقیاس مولکولی و شبیه سازی پلیمر به صورت محیطی پیوسته، مدل سازی نانو کامپوزیت به صورت چند مقیاسه و توسط به کارگیری المان حجمی جایگزین انجام می پذیرد. نیروهای بین اتمی میان اتمهای کربن در نانوتیوب و دیواره پلیمری که عامل مهمی در تعیین خواص مکانیکی این دسته از مواد است و از نوع نیروهای ون در والس می باشد (با توجه به ماهیت این نیروها)، توسط فنرهای غیرخطی و با استفاده از axial connector مدل شده است .

جهت بررسی نقش و تاثیر پیوند میان نانو تیوب کربنی و پلیمر، نانو کامپوزیتهای مدل شده با اعمال شرایط مرزی متفاوت در دو انتهای المان حجمی جایگزین مورد آزمایش قرار می گیرند؛ به طوری که در مرحله اول قیود انتهایی تنها بر روی ماتریس (پلیمر) اعمال می شود و در حالت دوم قیود انتهایی المان، بر روی ماتریس و نانو تیوب کربنی ، بصورت همزمان وارد می گردد. نهایتاً با قرار دادن نانو کامپوزیت مدل شده تحت بار گذاری کششی با استفاده از نمودارهای تنش - کرنش حاصله، مدول یانگ الاستیک بدست آمده است.

نتایج تحلیل عددی حاکی از آن است که در وضعیت اول، درمدول یانگ نانو کامپوزیت تغییر محسوسی حاصل نمی شود، ولیکن با افزایش طول نانو تیوب و همچنین افزایش نسبت طول به قطر نانو تیوب (Aspect Ratio)، تاثیر افزایش نانو تیوب کربنی به ماتریس پلیمری بیشتر نمود پیدا می کند.

اما در حالت دوم مدول یانگ نانو کامپوزیت افزایش چشمگیری خواهد داشت و با افزایش نسبت طول به قطر نانو تیوب این تاثیر بیشتر می گردد. به منظور تایید نتایج بدست آمده در این

پایان نامه، این داده ها با نتایج سایر محققین و همچنین نتایج روش قانون مخلوطها مقایسه شده‌اند که مطابقت خوبی میان آنها مشاهده می‌گردد.

نکته حائز اهمیت اینست که باتوجه به جامعیت و کاربردی بودن روشهای اجزاء محدود، روش فوق را می‌توان بر طیف وسیعی از نانو کامپوزیتها با پایه پلیمر تعمیم داد.

کلمات کلیدی:

نانو کامپوزیت- نانو تیوب کربنی - روش اجزاء محدود- ماتریس پلیمری - فصل مشترک -

نیروی ون در والس

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه

- ۱-۱- مقدمه ۲
- ۲-۱- تاریخچه پژوهش ۳
- ۳-۱- اهداف پایان نامه ۱۱
- ۴-۱- ساختار پایان نامه ۱۱

فصل دوم: نانو تیوبهای کربنی

- ۱-۲- مقدمه ۱۳
- ۲-۲- کایرالیتی و ساختار نانوتیوب های کربنی ۱۶
- ۳-۲- روش های ساخت نانوتیوب های کربنی ۱۸
- ۴-۲- خواص نانوتیوب های کربنی ۱۹
 - ۱-۴-۲- خواص مکانیکی ۱۹
 - ۲-۴-۲- مدلسازی نانوتیوب ها به عنوان مواد الاستیک ۲۲
 - ۱-۲-۴-۲- خواص الاستیک ۲۲
 - ۲-۲-۴-۲- مدل های ارائه شده بر مبنای تئوری الاستیسیته ۲۴
 - ۳-۲-۴-۲- استحکام نانوتیوب ها ۲۶
 - ۳-۴-۲- خواص الکتریکی و حرارتی ۲۹
 - ۵-۲- کاربرد نانوتیوب ها ۳۰

فصل سوم: کامپوزیت ها

- ۱-۳- مقدمه ۳۲
- ۲-۳- تاریخچه کامپوزیت ها ۳۳
- ۳-۳- مفهوم واژه کامپوزیت ۳۴

۳۴ ساختار کامپوزیتها	۴-۳
۳۴ فاز پیوسته (ماده زمینه یا ماتریس)	۳-۴-۱
۳۵ پلیمرها	۳-۴-۱-۱
۳۶ سرامیک ها	۳-۴-۱-۲
۳۷ فلزات	۳-۴-۱-۳
۳۷ فاز ناپیوسته (تقویت کننده یا فیبر)	۳-۴-۲
۳۷ الیاف	۳-۴-۱-۲
۳۸ تقویت کننده های ذره ای	۳-۴-۲-۲
۳۸ تقویت کننده های ویسکر(رشته ای)	۳-۴-۲-۳
۳۹ تقسیم بندی مواد کامپوزیت	۳-۵
۳۹ انواع کاربرد کامپوزیت ها	۳-۶
۴۰ روشهای تولید کامپوزیت ها	۳-۷

فصل چهارم: نانو کامپوزیت ها

۴۲ مقدمه	۴-۱
۴۵ قدمت نانوکامپوزیت ها	۴-۲
۴۵ انواع نانوکامپوزیت ها	۴-۳
۴۵ نانوکامپوزیت های زمینه سرامیکی	۴-۳-۱
۴۵ نانوکامپوزیت های زمینه فلزی- سرامیکی	۴-۳-۲
۴۶ نانوکامپوزیت های زمینه فلزی	۴-۳-۳
۴۶ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری	۴-۳-۴
۴۷ خواص و کاربرد نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری	۴-۳-۱
۴۸ روش های تولید نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری	۴-۳-۲
۵۲ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانوذرات	۴-۳-۳
۵۳ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانولایه ها	۴-۳-۴
۵۳ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانو الیاف کربنی	۴-۳-۵
۵۴ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانوتیوبهای کربنی	۴-۳-۶

۴-۴- نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی تک دیواره.....	۵۶
۴-۴-۱- مقدمه.....	۵۶
۴-۴-۲- خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی.....	۵۷
۴-۴-۲-۱- خواص الاستیک و استحکام.....	۵۷
۴-۴-۲-۲- بررسی مدول الاستیسیته و استحکام برشی.....	۶۰
۴-۴-۲-۳- نانوکامپوزیت‌های کربن - پلیمر.....	۶۳

فصل پنجم: روشهای مدل‌سازی نانو کامپوزیتها

۵-۱- مقدمه.....	۶۶
۵-۲- روشهای مدل‌سازی پیوسته.....	۶۸
۵-۲-۱- روشهای تحلیلی پیوسته.....	۶۸
۵-۲-۲- روشهای محاسباتی پیوسته.....	۷۰
۵-۲-۲-۱- روش اجزاء محدود.....	۷۰
۵-۲-۲-۲- روش المان مرزی.....	۷۱
۵-۳- روشهای مدل‌سازی مولکولی (شیمی محاسباتی).....	۷۲
۵-۳-۱- دینامیک مولکولی.....	۷۳
۵-۳-۲- روش مونت کارلو.....	۷۷
۵-۳-۳- روش اب اینیشیو.....	۷۸
۵-۴- مروری بر مطالعات انجام شده به روش اجزاء محدود.....	۷۹
۵-۵- روشهای مدل‌سازی نیروهای ون در والس.....	۹۵

فصل ششم: روش و فرایند مدل‌سازی

۶-۱- مقدمه.....	۱۰۲
۶-۲- فرایند شبیه سازی المان حجمی جایگزین.....	۱۰۳
۶-۲-۱- مدل‌سازی نانو تیوب کربنی.....	۱۰۴
۶-۲-۲- مدل‌سازی ماتریس پلیمری.....	۱۰۷
۶-۲-۲-۱- ایجاد قطعه پلیمری.....	۱۰۸

- ۱۰۹ ۲-۲-۲-۶- تعیین خواص مکانیکی
- ۱۱۱ ۳-۲-۲-۶- مونتاژ قطعات ایجاد شده
- ۱۱۲ ۴-۲-۲-۶- اعمال بر هم کنشهای بین مولکولی
- ۱۱۹ ۵-۲-۲-۶- اعمال بار گذاری، شرایط مرزی و مش بندی

فصل هفتم: بررسی و استخراج نتایج

- ۱۲۲ ۱-۷- روش استخراج نتایج
- ۱۲۳ ۲-۷- محاسبه خواص مکانیکی الاستیک
- ۱۲۵ ۱-۲-۷- بارگذاری در حالت اول (اعمال نیرو به ماتریس)
- ۱۳۱ ۲-۲-۷- بار گذاری در حالت دوم (اعمال نیرو به ماتریس و نانو تیوب)

فصل هشتم: نتیجه گیری و پیشنهادات

- ۱۴۰ ۱-۸- نتیجه گیری
- ۱۴۲ ۱-۷- پیشنهادات
- ۱۴۳ فهرست مراجع

فهرست اشکال

- شکل (۱-۲) شکل گیری نانو تیوب ها از صفحات گرافیت [24]..... ۱۴
- شکل (۲-۲) نمونه هایی از نانو تیوبهای کربنی تک دیواره [25]..... ۱۴
- شکل (۳-۲) تصویر TEM یک نانو تیوب های کربنی چند دیواره [27]..... ۱۵
- شکل (۴-۲) نام گذاری نانو تیوب های کربنی [25]..... ۱۷
- شکل (۵-۲) انواع مختلف آرایش نانو تیوب های کربنی الف) آرمچیر ب) زیگزاگ ج) چیرال [28]..... ۱۷
- شکل (۶-۲) هشت منحنی تنش - کرنش حاصل از آزمایشات بارگذاری کششی [36]..... ۲۳
- شکل (۷-۲) تصویر یک نوار نانو تیوب کربنی تک دیواره تحت بار گذاری کششی [36]..... ۲۷
- شکل (۱-۴) تصویر شمایک نانو کامپوزیت تداخلی و پوسته ای [53]..... ۴۳
- شکل (۲-۴) نمونه ای از یک نانو کامپوزیت پلیمری [27]..... ۴۷
- شکل (۳-۴) رشته نانو تیوب های کربنی تک دیواره که در معرض بار کششی قرار گرفته اند [60]..... ۵۹
- شکل (۱-۵) مقیاسهای طولی و زمانی متفاوت مورد استفاده در مدلسازی [62]..... ۶۶
- شکل (۲-۵) نمودار تکنیکهای مدلسازی نانو کامپوزیتها [62]..... ۶۷
- شکل (۳-۵) درجات آزادی یک میدان نیرو [62]..... ۷۵
- شکل (۴-۵) مدل پیوسته معادل برای یک نانو کامپوزیت [13]..... ۷۶
- شکل (۵-۵) سه نوع المان حجمی جایگزین مورد استفاده در آنالیز نانو کامپوزیتها [20]..... ۸۰
- شکل (۶-۵) سه نوع بار گذاری بر روی المان حجمی استوانه ای [20]..... ۸۱
- شکل (۷-۵) هندسه استوانه ای جهت محاسبات روش قانون مخلوطها [20]..... ۸۲
- شکل (۸-۵) مدل‌های اجزاء محدود متقارن برای المان حجمی جایگزین [20]..... ۸۳
- شکل (۹-۵) دو نوع بار گذاری بر روی المان حجمی جهت برآورد خواص مکانیکی [21]..... ۸۴
- شکل (۱۰-۵) مدل اجزاء محدود دو بعدی در حال بارگذاری کرنش صفحه ای [21]..... ۸۵
- شکل (۱۱-۵) مش سه بعدی متقارن برای المان مکعب مستطیلی شامل نانو تیوبهای کوتاه [21]..... ۸۵
- شکل (۱۲-۵) المان حجمی جایگزین مربوط به نانو کامپوزیت حاوی نانو تیوب کربن [78]..... ۸۶
- شکل (۱۳-۵) مدل مکانیک مولکولی نانو تیوب و زنجیره پلیمری [78]..... ۸۷
- شکل (۱۴-۵) مدوله‌های یانگ و مدول برشی نرمالایز شده نانو کامپوزیت [78]..... ۸۸
- شکل (۱۵-۵) توزیع تنش نرمالایز شده روی سطح ماتریس و فصل مشترک [78]..... ۸۸

- شکل (۵-۱۶) مدل محاسباتی کامپوزیت پلیمر / نانو تیوب کربنی [79]..... ۸۹
- شکل (۵-۱۷) مدلسازی نانو تیوب به روش مکانیک ساختاری مولکولی [79]..... ۹۰
- شکل (۵-۱۸) تصویر المانه‌های خرپای اتصال دهنده اتمهای کربن و نودهای اجزاء محدود [79]..... ۹۰
- شکل (۵-۱۹) توزیع تنش محوری نرمالایز شده در ماتریس پلیمری [79]..... ۹۲
- شکل (۵-۲۰) منحنی بارکمانشی کامپوزیت تقویت شده با نانو تیوبهای کربنی [79]..... ۹۲
- شکل (۵-۲۱) مقایسه منحنی های تنش- کرنش پیش بینی شده نانو کامپوزیت و قانون مخلوطها [24].. ۹۴
- شکل (۵-۲۲) منحنی پتانسیل لنارد- جونز و نیروی ون در والس نسبت به فاصله بین اتمی [80]..... ۹۶
- شکل (۵-۲۳) منحنی نیرو-جابجایی المانه‌های غیر خطی خرپا [80]..... ۹۷
- شکل (۵-۲۴) مدلسازی نیروهای ون در والس میان اتمهای کربن واقع بر روی دیواره های متفاوت [82] ۹۸
- شکل (۶-۱) تصویر شماتیک یک نانو کامپوزیت پایه پلیمری حاوی [72]..... ۱۰۲
- شکل (۶-۲) نانو تیوب‌های مونتاژ شده از نوع زیگزاگ به طول ۴/۱۸۸ نانومتر [85]..... ۱۰۴
- شکل (۶-۳) نحوه قرار گیری دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن [85]..... ۱۰۵
- شکل (۶-۴) نحوه قرار گیری فنرهای خمشی بین اتم‌های کربن [85]..... ۱۰۵
- شکل (۶-۵) نحوه قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن [85]..... ۱۰۶
- شکل (۶-۶) مجموع فنرهای خمشی و اتصالات بین اتم‌های کربن [85]..... ۱۰۶
- شکل (۶-۷) ایجاد صفحات مبنا در ماتریس پلیمری از نمای فوقانی..... ۱۱۲
- شکل (۶-۸) ایجاد صفحات مبنا در ماتریس پلیمری از نمای جانبی..... ۱۱۳
- شکل (۶-۹) نمای ماتریس پلیمری پس از ایجاد پارتیشن بندی..... ۱۱۴
- شکل (۶-۱۰) شکل شماتیک axial connector..... ۱۱۵
- شکل (۶-۱۱) برقراری سه پیوند میان هر اتم کربن در نانو تیوب و نودهای متناظر در ماتریس [80]..... ۱۱۷
- شکل (۶-۱۲) نمایی از المان حجمی جایگزین پس ایجاد پیوندهای میان نانو تیوب و ماتریس..... ۱۱۸
- شکل (۶-۱۳) نمونه ای از المان حجمی جایگزین شبیه سازی شده به روش اجزاء محدود..... ۱۲۰
- شکل (۷-۱) منحنی تنش- کرنش حاصل حل الاستیک دو نمونه المان حجمی..... ۱۲۴
- شکل (۷-۲) منحنی تغییر مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت بر حسب طول نانو تیوبهای کربنی..... ۱۲۷
- شکل (۷-۳) المان حجمی جایگزین در حالت اول بارگذاری..... ۱۳۰
- شکل (۷-۴) کانتور تنش وارده به المان حجمی جایگزین..... ۱۳۱
- شکل (۷-۵) منحنی تنش بر حسب کرنش در حالت دوم بارگذاری..... ۱۳۲

- شکل (۶-۷) کانتور تنش فون- میزز بر حسب گیگا پاسکال ۱۳۳
- شکل (۷-۷) تغییر شکل پلاستیک در المان حجمی جایگزین در چهار گام متوالی ۱۳۴
- شکل (۸-۷) بارگذاری کششی کامپوزیت پلی اتیلن آمورف/ نانو تیوب کربنی [86] ۱۳۵
- شکل (۹-۷) منحنی تنش _ کرنش در حالت دوم بارگذاری ۱۳۶
- شکل (۱۰-۷) منحنی تنش _ کرنش در حالت دوم بارگذاری برای نانو کامپوزیت ۱۳۷
- شکل (۱۱-۷) کانتور تنش فون- میزز و تغییر شکل پلاستیک نانو کامپوزیت ۱۳۸

فهرست جداول

- جدول (۴-۱) مقایسه نتایج مقاومت کششی نانوتیوب های کربنی [60]..... ۵۹
- جدول (۷-۱) مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت در حالت اول بارگذاری برای آرایش (۱۲و۰)..... ۱۲۵
- جدول (۷-۲) مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت در حالت اول بارگذاری برای آرایش (۱۶و۰)..... ۱۲۶
- جدول (۷-۳) مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت در حالت اول بارگذاری برای آرایش (۲۲و۰)..... ۱۲۶
- جدول (۷-۴) مقایسه مدول یانگ نانو کامپوزیت پلی اتیلن آمورف - نانو تیوب کربنی..... ۱۲۸
- جدول (۷-۵) مقایسه مدول یانگ نانو کامپوزیت پلی اتیلن کریستالی - نانو تیوب کربنی..... ۱۳۸

فصل اول :

مقدمه

۱-۱ مقدمه

خواص مکانیکی و فیزیکی عالی نانوتیوب‌های کربنی، به همراه چگالی پایین آنها، نانوتیوب‌های کربنی را به عنوان یک کاندیدای عالی برای استحکام‌دهی کامپوزیت‌ها معرفی کرده است. نانو کامپوزیتها از جایگاه ویژه ای در حوزه نانو تکنولوژی برخوردارند. این مواد از دو یا چند جزء مجزا (مانند پلیمرها، سرامیکها، فلزات) تشکیل شده اند.

در بین نانو کامپوزیتها بیشترین توجه به نانو کامپوزیت‌های پایه پلیمری معطوف گشته و روند تحقیقات و صنعتی شدن نانو کامپوزیت‌های پلیمری در سطح جهانی قابل توجه است. نانو کامپوزیت‌های پایه پلیمری به علت برخورداری از خواصی از قبیل مقاومت در مقابل خوردگی، عایق بودن الکتریکی و همچنین خواص مکانیکی مناسب با وجود سبکی و ازدیاد طولشان، کاربردهای متنوعی در صنایع پیشرفته مانند ساخت هواپیما، شاتل‌ها و همچنین صنایع نظامی، صنایع خودروسازی، صنایع الکتریکی و غیره یافته اند.

تحقیقات انجام گرفته در زمینه بکارگیری نانو تیوب‌های کربنی در ساختار پلیمرها به چند سال اخیر بازمی گردد و از سابقه چندانی برخوردار نیست. پس از معرفی نانو تیوب‌های کربنی توسط ایجیما^۱ در سال ۱۹۹۱ یکی از مباحث پر جاذبه در زمینه کامپوزیتها، استفاده از نانو تیوب ها به عنوان فاز تقویت کننده در کامپوزیت‌های پایه پلیمری می باشد.

نانو تیوب ها دارای خواص شگفت انگیزی می باشند که بطور کلی این خواص به دلیل ساختار شش ضلعی دیواره آنها و ساختار تیوب مانند آنها می باشد. استحکام فوق العاده بالای نانو تیوب‌های کربنی، خواص هدایتی و گرمایی خوب آنها و همچنین سبکی آنها بدلیل ساختار ویژه تیوب مانند، همگی استفاده از این ساختارها را به عنوان گزینه بسیار مناسبی در تولید انواع کامپوزیتها مطرح می سازد.

^۱ Ijima

از طرفی به علت بزرگتر بودن نسبت طول به قطر نانو تیوب ها در مقایسه با میکرو فیبرهای مورد استفاده در کامپوزیت‌های رایج، برای یک نسبت حجمی مشخص، سطح تماس آنها با ماتریس^۱ به مراتب بیشتر است. در نتیجه تمامی عوامل جهت تبدیل شدن نانوتیوب‌های کربنی به عنوان یک فاز تقویت کننده ایده آل، جهت استفاده در کامپوزیتها فراهم شده است.

نانوتیوب‌های کربنی باعث بهبود خواص فیزیکی و مکانیکی پلیمرها می شوند. خواص مشخصه نانو کامپوزیت‌های پلیمری نیز به دلیل به کارگیری نانو تیوب‌های کربنی در آنهاست. درک کامل رفتار مکانیکی نانو کامپوزیت‌های تقویت شده بوسیله نانوتیوب‌های کربنی، نیاز به آشنایی با رفتار الاستیک و خصوصیات شکست نانوتیوب‌های کربنی و همچنین فصل مشترک ماده زمینه با نانوتیوب دارد.

ولی مشکل اساسی بکارگیری این نانو تیوب های کربنی در ساختار کامپوزیتها قیمت گزاف آنها می باشد که نیاز به طراحی مهندسی، جهت بهینه سازی استفاده از آنها در نانو کامپوزیتها را دو چندان می نماید. از این رو یکی از پر جاذبه ترین مباحث در حوزه علم نانو کامپوزیتها، مدلسازی خواص مکانیکی آنها می باشد تا بتوان از این مدلها به طور مؤثر در طراحی نانو کامپوزیتها بویژه نانو کامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانو تیوب های کربنی استفاده کرد.

در این پایان نامه با استفاده از روش اجزاء محدود و بکارگیری نرم افزار ABAQUS، روشی جدید جهت مدلسازی ساختار نانو کامپوزیت‌های پایه پلیمری و فصل مشترک میان نانو تیوب‌های کربنی و ماتریس پلیمری ارائه خواهد شد، که پس از بارگذاری کششی، خواص مکانیکی بدست آمده از این روش با روشهای دیگر و همچنین نتایج سایر محققین مقایسه خواهد گردید.

۲-۱ تاریخچه پژوهش

خواص مکانیکی، خواص الکتریکی و حرارتی استثنایی نانوتیوب های کربنی، امید زیادی را به عنوان یک فاز تقویت کننده بالقوه و المان چند کاربردی در کامپوزیت‌های پلیمری نوید داده است. مهمترین

¹ Matrix

ویژگی نانوتیوب های کربنی سفتی بسیار زیاد آنها همراه با مقاومت بالاست. برای مثال نشان داده شده است که نانوتیوب های کربنی دارای مدولهای الاستیک خیلی بالا (بالتر از یک تترا پاسکال) بوده و همچنین کرنش های الاستیک زیاد تا حد ۵٪ را تحمل می کنند.

موضوع انتقال بار در کامپوزیتهای تقویت شده با فیبر کوتاه معمولی در طول سالهای زیادی مطالعه شده است. اما مطالعات مربوط به کامپوزیتهای پلیمری تقویت شده با نانوتیوب ها در مراحل ابتدایی قرار دارند. در این روشهای مختلف، کاکس^۱ در سال ۱۹۵۲ [۱] اولین و پرکاربردترین مدل را به نام روش تاخیر برشی^۲ برای حل انتقال تنش در کامپوزیتهای تقویت شده با فیبر^۳، که در آن یک فیبر منفرد در سیلندری از مواد ماتریسی با جابجایی یکنواخت در راستای فیبر قرار گرفته است، پیشنهاد داد. این مدل بر اساس المان حجمی جایگزین^۴ می باشد. او فرض کرد که نسبت انتقال تنش از ماتریس به فیبر متناسب با اختلاف بین جابجایی های محوری در یک نقطه در فیبر و جابجایی متناظر در همان نقطه در ماتریس بدون حضور فیبر است. برای بدست آوردن یک روش تحلیلی علاوه بر این او فرض کرد که جابجایی محوری در قسمت بیرونی ماتریس توسط فیبر تحت تاثیر قرار نمی گیرد.

بعدها دائو^۵ در سال ۱۹۶۳ [۲] مدل کاکس را اصلاح نمود. او فرض کرد که جابجایی محوری ماتریس ثابت نیست و شرایط مواد ماتریس در انتهای فیبر را متضاد مدل اولیه کاکس در نظر گرفت. مدل های پیشنهاد شده توسط کاکس و دائو توسط روزن^۶ در سال ۱۹۶۵ [۳ و ۴] بهبود یافت. او فرض کرد که ماتریس در بردارنده فیبر در حقیقت توسط یک کامپوزیت با خواص خود کامپوزیت در بر گرفته شده است. در مدل او یک ترکیب المان حجمی جایگزین از یک فیبر تک سیلندری احاطه شده

¹ Cox

² Shear-lag

³ Fiber

⁴ Representative Volume Element

⁵ Dow

⁶ Rosen

توسط یک سیلندر ماتریس که توسط سیلندر دیگری از جنس کامپوزیت احاطه شده، در نظر گرفته شده است.

این مدل چند محدودیت دارد اول اینکه برای محاسبه مدول یانگ برای ماده کامپوزیت از قانون مخلوطها^۱ استفاده شده است که این تنها وقتی قابل استفاده است که هر دوی فیبر و ماتریس ضریب پواسون برابری را داشته باشند. ثانياً اینکه قانون مخلوطها یک روش حد بالا می باشد، که در ارزیابی خواص به خصوص هنگامی که فیبرها کوتاهند منجر به اشتباه می شود. ثالثاً اینکه سیلندرهایی فیبر و ماتریس طول یکسانی دارند که این امر در کامپوزیتهای با فیبر کوتاه واقعی، که در آنها فیبرهای گسسته معمولاً از همدیگر جدا می شوند، صادق نمی باشد.

روشهای متعددی اعم از عددی و تحلیلی برای پیش بینی سفتی کامپوزیتهای تقویت شده با الیاف کوتاه وجود دارد. لائوک^۲ و همکارانش در سال ۱۹۹۹ [۵] تنش محوری فیبر را برای مواد کامپوزیتی حاوی ماتریس و فیبرهای کوتاه هم جهت، مشتق کردند. او یک عنصر کامپوزیتی حاوی تک فیبر را در نظر گرفت. تنش میانگین برای فیبر و ماتریس در توازن نیرو در عنصر کامپوزیتی و در رابطه تنش - کرنش در فیبر و ماتریس تعیین شد و همان شرایط مرزی کاکس استفاده شد.

در یک مطالعه ای دیگر، فو^۳ و همکارانش در سال ۲۰۰۰ [۶] جداسازی محوری در یک المان حجمی جایگزین، با سه سیلندری که در آن سیلندر فیبر کاملاً در سیلندر ماتریس قرار گرفته است را پیشنهاد دادند. آنها در مدلشان اثر فیبرهای مجاور را در نظر گرفته و توزیع تنش برشی را بر روی فصل مشترک ماتریس و فیبر بدست آوردند. همچنین در این مدل، المان را نسبت به مرکز فیبر متقارن در نظر گرفت. این امر با مطالعات قبلی که یک توزیع نامتقارن را که روی میزان شرایط تقارن موجود در مدل پیشنهاد می کرده اند تناقض دارد. برای بدست آوردن مدول یانگ برای کامپوزیت، فو از قانون مخلوطهای اصلاح یافته استفاده کرد که استفاده از پارامترهای تحلیلی مدل تاخیر برش را

¹ Rule Of Mixtures

² Lauke

³ Fu

ممکن می سازد. اثبات شده است که این قانون مخلوط مبتنی بر مدل تاخیر برش، سفتی کامپوزیتهای فیبر کوتاه را کمتر از حد واقعی تخمین می زند. مدل های روزن و فو انتقال تنش بین لایه های میانی را در نظر گرفته اند و فرض کرده اند که دو انتهای فیبرها شکست آزاد دارند. اما این مدل ها مقادیر غیر صفری را برای تنش برشی سطحی در دو انتهای فیبر پیش بینی می کنند، که این امر با شرایط شکست- آزاد در این دو انتها تناقض دارد. این مدل های سه سیلندره نمی توانند بصورت کاملا دقیق برای تعیین مشخصات کامپوزیتهای پلیمری تقویت شده با نانوتیوب ها که در آنها تنش می تواند از فصل مشترک به دو انتهای نانوتیوب منتقل شود، استفاده شوند.

برای مدلسازی خواص مکانیکی کامپوزیتهای حاوی نانوتیوب های کربنی دو روش اصلی پیشنهاد شده است. روش اول که بر پایه شیمی محاسباتی می باشد، جهت مدلسازی در مقیاسهای طولی و زمانی کوچک به کار می رود. این روش خود شامل زیر شاخه های است که به آنها اشاره خواهد شد. نکته مهم این است که در این روشها ساختار ماده به صورت گسسته فرض می شود. از جمله این روشها، مکانیک مولکولی است که در تحلیل نانوتیوب های منفرد و فصل مشترک ماتریس - نانوتیوب در مقیاس اتمی کارآمد و مفید است، اما استفاده از آن برای تمام نانوکامپوزیت بسیار مشکل است.

معادله هالپین- تسای¹ و روش موری- تاناکا² دو روش تئوری رایج هستند. معادله هالپین- تسای اصلاح شده برای پیش بینی ثابت های الاستیک در مقیاس ماکرو، برای کامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب [7] و برای کامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب های موج دار بلند [8] مورد استفاده قرار گرفته اند، اما دو روش نقایصی دارند. آنها نمی توانند به طور دقیق برهم کنش میان نانوتیوب های مجاور را مشخص کنند و همینطور نمی توانند میکرو تنش های شامل نانوتیوب های منفرد را بخاطر محدودیت مدل های تحلیلی آنها ارزیابی کنند.

¹ Halpin-Tsai

² Mori-Tanaka

اما در روش دیگر که جهت مدلسازی در مقیاسهای طولی و زمانی بزرگتر استفاده می گردد، فرض بر حضور ماده به صورت ساختاری پیوسته است. این روش نیز خود شامل زیر مجموعه وسیعی از روشهای مختلف است که به آنها پرداخته خواهد شد.

به عنوان مثال رویکردهای عددی براساس تحلیل یک سلول واحد اصلی، بوسیله روش المان محدود در سالهای گذشته توسعه یافته اند. روشهای عددی که مورد استفاده قرار گرفته اند نقایص و معایبی داشته اند. برای رفع این نقایص در روشهای جدید به جای انتگرال غیر همگن رایج، از یک معادله انتگرالی همگن با تعریف یک تابع مشخصه جدید استفاده شده است [۹] و در نهایت، مراحل محاسبات ساده و بطور چشمگیری کاهش می یابد. تاثیر توزیع و شکل هندسی الیاف کوتاه و بلند رایج بر روی کامپوزیتها بطور مفصل بصورت تئوری و عددی مورد تحلیل قرار گرفته است، اما مشکل است که مستقیماً این نتایج را برای کامپوزیتهای پلیمری حاوی نانوتیوب که ویژگیهای متفاوتی نسبت به الیاف کوتاه دارند استفاده کرد.

انتقال تنش محوری بین فیبرهای تقویتی یا نانوتیوب ها بر مواد ماتریسی و همچنین اثر تنش برشی فصل مشترک^۱ پدیده های مهمی می باشند که بصورت خیلی مهم، خواص مکانیکی کامپوزیتهای پلیمری تقویت شده با نانوتیوب ها را کنترل می کند.

تعدادی از مدل‌های پایه پیوسته در سال های گذشته پیشنهاد شده اند. در مطالعات تجربی اسکادلر^۲ و همکارانش در سال ۱۹۹۸ [۱۰] اثر قابل توجه این انتقال تنش از نیروی خارجی به نانوتیوب ها نشان داده شده اند، همچنین در مطالعات فرانکلند^۳ و همکارانش در سال ۲۰۰۳ [۱۱] و واگنر^۴ در سال ۲۰۰۰ [۱۲] با استفاده از شبیه سازی های دینامیک مولکولی اثر فصل مشترک میان نانوتیوب ها و ماتریس مورد بررسی قرار گرفته است. برای تعیین استحکام برشی سطحی پلیمرهای

¹ Interface

² Schadler

³ Frankland

⁴ Wagner

تقویت شده توسط نانوتیوب های تک دیواره، واگنر یک مدل تغییر یافته کلی تاپسون^۱ را استفاده کرد که فرض می کند برش سطحی و تنش های نرمال برداری یکنواخت هستند.

انتقال بار بخاطر تنش کششی در کامپوزیتهای پلیمری توسط اختلاف بین ضریب پواسون مواد سازنده بوجود می آید. این موضوع در کامپوزیتهای تقویت شده با نانوتیوب ها نیز صادق است. به علت تغییرات شدید در ضریب پواسون بین نانوتیوب ها و مواد ماتریس، انتقال مقاومت از نانوتیوب ها به ماتریس پوشاننده وجود دارد. در نتیجه، این پدیده ممکن است که مدول های یانگ یک کامپوزیت را حتی اگر چسبندگی خیلی خوبی بین نانوتیوب ها و مواد ماتریسی وجود نداشته باشد، بهبود بخشد.

ادگار^۲ و همکارانش [۱۳] در سال ۲۰۰۳ مکانیک مولکولی که روشی بر پایه شیمی محاسباتی می باشد، را برای مدل کردن برهم کنش نانوتیوب و پلیمر مورد استفاده قرار داد. او برای ساخت مدل از المان تقویت کننده پیوسته و همگن، شامل یک نانوتیوب کربنی تک دیواره احاطه شده بوسیله یک حجم سیلندری از پلیمر استفاده نمود. یک تحلیل میکرو مکانیکی کلاسیک برای تشخیص و تعیین خواص بالک موثر المان تقویت کننده پیوسته جایگزین درون یک پلیمر پیوسته انجام شد. این فرآیند به خوبی برهمکنش میان پلیمر و نانوتیوب های کربنی تک دیواره را در مقایسه نانو ارائه داد.

در رویکرد دیگر پایپس^۳ و هابرت^۴ در سال ۲۰۰۲ [۱۴و۱۵] از دینامیک لیتیس^۵ برای مدل کردن یک آرایه از نانوتیوب های کربنی تک دیواره استفاده کردند. این کامپوزیت در نهایت یک سری از مدل های سیلندر مرکزی^۶ را برای ساخت یک مدل کلی از یک میکروفیبر مورد استفاده قرار می دهد. اهمیت این رویکرد در آن است که برای مدل کردن کامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب،

¹ Kelly-Tuyson

² Odegard

³ Pipes

⁴ Hubert

⁵ Lattice

⁶ Self-Similar

تاثیر جهت نانوتیوب تک دیواره و برهمکنش اتمی میان نانوتیوب های مجاور، برای کسر حجمی بالای نانوتیوب های تک دیواره بررسی شده است.

لی^۱ و چو^۲ در سال ۲۰۰۳ [۱۶ و ۱۷] یک مدل محاسباتی بر پایه محیط پیوسته برای تعیین مشخصات انتقال تنش برش سطحی در کامپوزیتهای تقویت شده با نانوتیوب پیشنهاد داده اند. در این مدل، آنها روش مکانیک ساختاری مولکولی برای مدلسازی نانوتیوب و المانهای محدودی که برای مش بندی کردن ماتریس پلیمر استفاده می شوند را بکار بردند.

ژیائو^۳ و ژانگ^۴ [۱۸] توزیع های تنش نرمال برداری در نانوتیوب را تعیین کردند و تنش برشی سطحی در کامپوزیتهای پلیمری تقویت شده با نانوتیوب را با استفاده از مدل تغییر یافته کاکس بدست آوردند.

گائو^۵ و لی^۶ در سال ۲۰۰۵ [۱۹] برای شبیه سازی یک کامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانوتیوب، یک مدل برشی را با استفاده از یک سیلندر ماتریس احاطه شده توسط یک نانوتیوب تک دیواره به عنوان المان حجمی جایگزین، ارائه دادند. یک ویژگی بارز این مدلها این است که در آنها تنها ماتریس و یک نانوتیوب در المان حجمی در نظر گرفته می شوند. از اثر نانوتیوب های پیرامونی با در نظر گرفتن سطح فصل مشترک به عنوان شکست آزاد، صرف نظر می شود. این امر رفتار تقویت واقعی توسط نانوتیوب ها را نشان نمی دهد؛ مگر این که نانوتیوب ها در ماتریس یکنواخت توزیع شده باشند.

¹ Li

² Chou

³ Xiao

⁴ Zhang

⁵ Gao

⁶ Li

در اکثر پژوهش‌های صورت گرفته، با توجه حضور چند مقیاس به صورت همزمان، مدل سازی نانو کامپوزیت‌های کربنی از طریق روش‌های چند مقیاسه^۱ صورت گرفته است. بطوریکه در این روش‌ها از مزایای روش‌های شیمی محاسباتی و مکانیک محاسباتی، بصورت همزمان جهت پیش بینی خواص مکانیکی و ساختار مواد استفاده شده است.

از جمله لیو^۲ و چن^۳ در سال ۲۰۰۲ [۲۰] با بکارگیری المان حجمی جایگزین در مقیاس نانو، خواص مکانیکی کامپوزیت‌های پایه نانو تیوب کربنی را بررسی نمود. آنها با استفاده از اعمال چند بارگذاری مختلف بر روی المان و استفاده از تئوری‌های الاستیسیته خطی و با بهره گیری از نتایج تحلیل اجزاء محدود در استخراج مقادیر متوسط تنش و کرنش، به این مهم دست یافتند.

همچنین مدلسازی رفتار فشاری کامپوزیت‌های پلیمر- نانو تیوب توسط شبیه سازی نانو تیوب در مقیاس اتمی و آنالیز تغییر شکل ماتریس توسط روش‌های پیوسته صورت پذیرفت [۲۱]. توزیع تنش در فصل مشترک نانوتیوب کربنی و پلیمر با اعمال دو بارگذاری متفاوت بدست آمد. بارکمانشی نانو کامپوزیت نیز برای طولها و قطرهای مختلف نانو تیوب آزمایش گردید. نتایج این پژوهش نشان می دهد که در حالت استفاده از نانو تیوب‌های هم طول با پلیمر در المان حجمی جایگزین، افزایش قابل توجهی در خواص مکانیکی و بار کمانشی ایجاد می گردد.

با توجه به گستردگی روش‌های موجود جهت تحلیل خواص مکانیکی نانو کامپوزیت‌ها، در فصل‌های بعدی به تفصیل به مرور این روش‌ها، از جمله روش‌های اجزاء محدود، روش‌های تحلیلی، روش‌های دینامیک مولکولی و همچنین تحقیقات انجام گرفته در هر زمینه خواهیم پرداخت.

^۱ Multi Scale modeling

^۲ Liu

^۳ Chen

۱-۳ اهداف پایان نامه

هدف از انجام این تحقیق ارائه روشی به منظور مدل سازی اجزاء محدود نانو کامپوزیت های پایه پلیمری است. از پلی اتیلن به عنوان فاز پیوسته یعنی ماتریس و از نانو تیوبهای کربنی به عنوان فاز تقویت کننده یا فیبر استفاده شده است. در نهایت با اعمال بارگذاری کششی خواص مکانیکی نانو کامپوزیت که در غالب المان حجمی جایگزین شبیه سازی شده، بدست خواهد آمد.

۱-۴ ساختار پایان نامه

در فصلهای آتی ابتدا مختصری در مورد ساختار نانوتیوب های کربنی، انواع آنها و همچنین خواص آنها توضیحاتی ارائه خواهد شد و سپس در مورد کامپوزیتها، اجزای تشکیل دهنده، انواع آن و روشهای ساخت آنها مطالبی بیان خواهد شد. با توجه به اهمیت موضوع، انواع نانو کامپوزیتها، بویژه نانو کامپوزیتهای پایه پلیمری، روشهای ساخت و خواص مکانیکی آنها شرح داده می شود و سپس مدلسازی نانو کامپوزیت به صورت المان حجمی جایگزین، شامل شبیه سازی ماتریس پلیمری و پیوندهای مؤثر موجود میان نانوتیوب کربنی و ماتریس، توسط روشی جدید ارائه می گردد. نهایتاً پس از مدل سازی و اعمال بارگذاری، نتایج حاصله به شکل منحنی های تنش بر حسب کرنش بدست آمده در حالات مختلف مورد بررسی و تحلیل قرار خواهد گرفت و با نتایج سایر محققین و همچنین روشهای دیگر مقایسه خواهد شد.

فصل دوم:

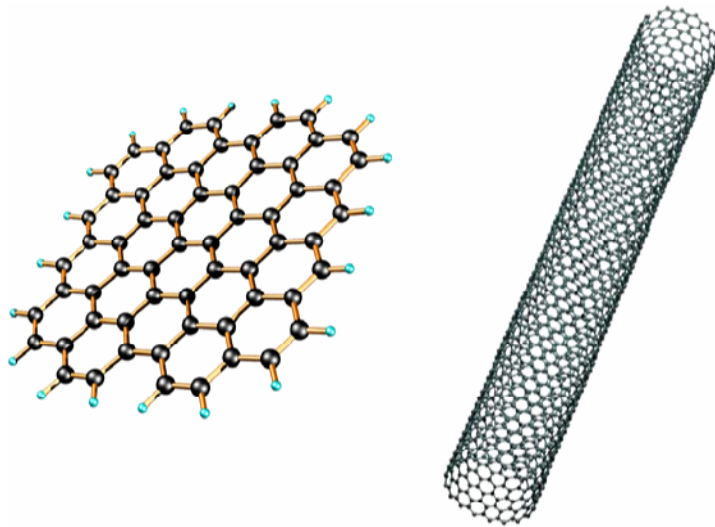
نانوتیوب های کربنی

همانطور که می‌دانیم کربن در طبیعت ساختارهای مختلفی دارد و سه نمونه از ساختارهای آن گرافیت، الماس و فولرین می‌باشد. در سال ۱۹۹۱ دانشمندی به نام سومیو ایجیما بطور کاملاً اتفاقی، ساختار دیگری از کربن را کشف کرد که خواص منحصر به فردی دارد. وی در ابتدا این ساختار را نوعی فولرین تصور نمود که در یک جهت کشیده شده است. اما بعدها متوجه شد که این ساختار، خواص متفاوتی از فولرین دارد و به همین دلیل آن را نانوتیوب کربنی نامید [۲۲]. قابل ذکر است که احتمالاً اولین تصاویر نانوتیوب های کربنی در اواسط دهه ۱۹۷۰ میلادی توسط ابرلین^۱ و همکارانش مشاهده شده است. این محققین در مقاله خود گزارش دادند که از طریق پیرولیز بنزن و فروسین^۲ در ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد، گرافیت های لوله ای شکلی در اندازه نانومتر بدست می‌آید [۲۳].

در یک نانوتیوب کربنی، اتم های کربن در ساختاری استوانه ای آرایش یافته اند، یعنی یک تیوب توخالی که جنس دیواره اش از اتم های کربن است. آرایش اتم های کربن در دیواره این ساختار استوانه ای دقیقاً شبیه آرایش اتم های کربن در لایه های گرافیت است، یعنی اتم های کربن در این دیواره با هیبریداسیون sp^2 آرایش یافته اند، بنابراین اتمهای کربن در دیواره نانو تیوب های کربنی، شش ضلعی های منظم و پیوسته ای را تولید کرده اند. با توجه به این موضوع، می توان گفت که از لحاظ تئوری، نانوتیوب های کربنی به وسیله پیچش یا لوله کردن صفحات گرافیت بوجود آمده اند. این مطلب در شکل (۱-۲) نشان داده شده است.

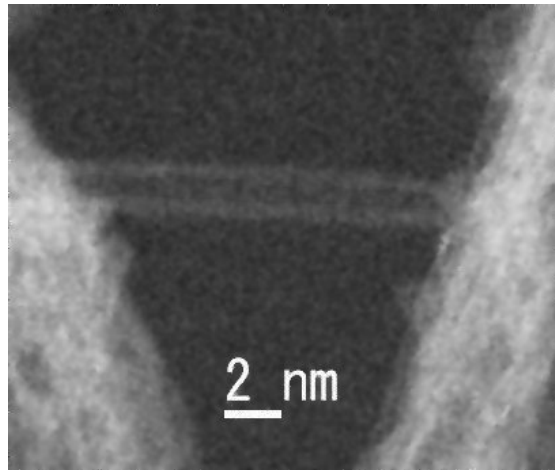
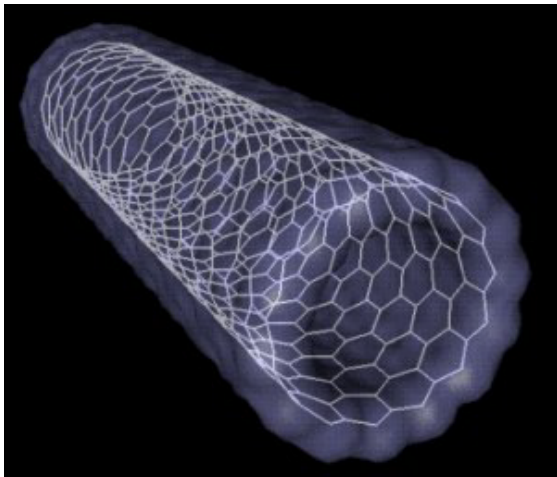
¹ Oberlin

² Benzene & Ferrocene



شکل (۱-۲) شکل گیری نانو تیوب ها از صفحات گرافیت [۲۴]

نانوتیوب های کربنی به دو دسته کلی نانوتیوب های کربنی تک دیواره^۱ و نانوتیوب های کربنی چند دیواره^۲ تقسیم می شوند. در دسته اول، نانوتیوب ها شامل فقط یک صفحه گرافیت پیچیده شده هستند. به همین دلیل به این نانوتیوب ها، نانوتیوب های کربنی تک دیواره گفته می شود. قطر این دسته از نانوتیوب ها از یک تا چندین نانومتر گزارش شده است (شکل ۲-۲).



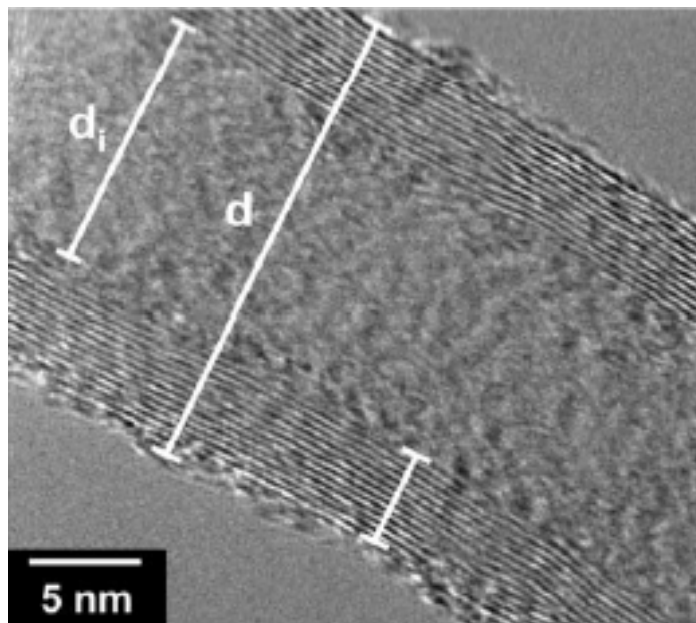
شکل (۲-۲) نمونه هایی از نانو تیوبهای کربنی تک دیواره [۲۵]

¹ Single-Walled Carbon Nano Tubes(SWCNTs)

² Multi-Walled Carbon Nano Tubes(MWCNTs)

نانوتیوب های تک دیواره قطر یکنواختی دارند، ولی به هنگام تشکیل، تمایل زیادی به تجمع در کنار یکدیگر و تشکیل دسته های بزرگتر^۱ دارند.

نانوتیوب های کربنی چند دیواره، نانوتیوب های کربنی حاوی بیش از یک صفحه گرافیت تیوب شده هم مرکز هستند. در واقع این دسته از نانوتیوب ها، بیش از یک پوسته دارند (شکل ۲-۳). فاصله بین لایه های گرافیت در نانوتیوب های کربنی چند دیواره، به علت نیروهای دافعه اتمی نمی تواند کمتر از ۰/۳۴ نانومتر باشد. قطر خارجی نانوتیوب های کربنی چند دیواره بین ۲ الی چندین نانومتر و قطر داخلی آنها در حدود ۱ تا چند نانومتر است. طول نانوتیوب های تولید شده تا بحال از چند میلی متر تجاوز نکرده است [۲۶].



شکل (۳-۲) تصویر TEM یک نانو تیوب کربنی چند دیواره [۲۷]

^۱ Bundles of Nano Tubes

۲-۲ کایرالیته^۱ و ساختار نانوتیوب های کربنی

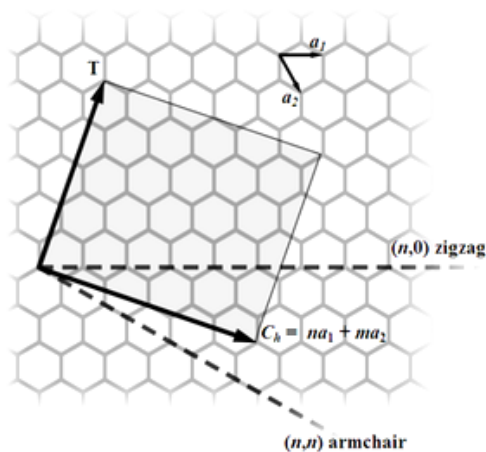
برای تشریح ساختار نانوتیوب های کربنی، معمولترین روش این است که ابتدا صفحات گرافیت، به صورت صفحات ساده که هنوز لوله نشده اند در نظر گرفته شود و سپس با استفاده از فرآیند لوله کردن به صورت بردارهای (\vec{a}_1, \vec{a}_2) و بردار،

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1-2)$$

که در آن n و m اعداد صحیح هستند، به توضیح این مساله پرداخته شود. در شکل (۲-۴) دو خط به عنوان محور نامگذاری و مشخص شده اند، که گرافیت حول آنها لوله شده و تشکیل نانوتیوب را می دهد. مبدا بردار یک نقطه دلخواه می باشد که بر روی یکی از اتم های کربن انتخاب شده است. یک بردار $n\vec{a}_1$ به صورت افقی در امتداد محور زیگزاگ ها قرار گرفته است، در حالی که بردار دیگر در مکان دلخواه قرار خواهد گرفت. خط آرمچیر^۲ خطی است که از تمامی شش ضلعی ها گذشته و آنها را به دو نیمه مساوی تقسیم می کند. اگر گرافیت بر روی این خط تیوب شود، آن گاه نانوتیوب حاصل از نوع آرمچیر یا دسته صندلی شکل خواهد بود. این نامگذاری را می توان به علت شکل آن در راستای عمود بر محور تیوب دانست که شکلی شبیه به دسته صندلی دارد. در این حالت برای اطمینان از اینکه جمع برداری بر روی خط آرمچیر قرار خواهد گرفت، بردار $m\vec{a}_2$ به گونه ای قرار خواهد گرفت که خط آرمچیر نیمساز زاویه بین دو محور باشد. چون مجموع بردارها جهت تیوب شدن را تعیین می نماید، برای اینکه این مجموع بر روی خط آرمچیر قرار گیرد، باید $m\vec{a}_2 = n\vec{a}_1$ باشد. بنابراین نانوتیوب ها با ساختار آرمچیر دارای ساختارهای $(5,5)$ ، $(6,6)$ و بطور کلی (n,n) می باشند.

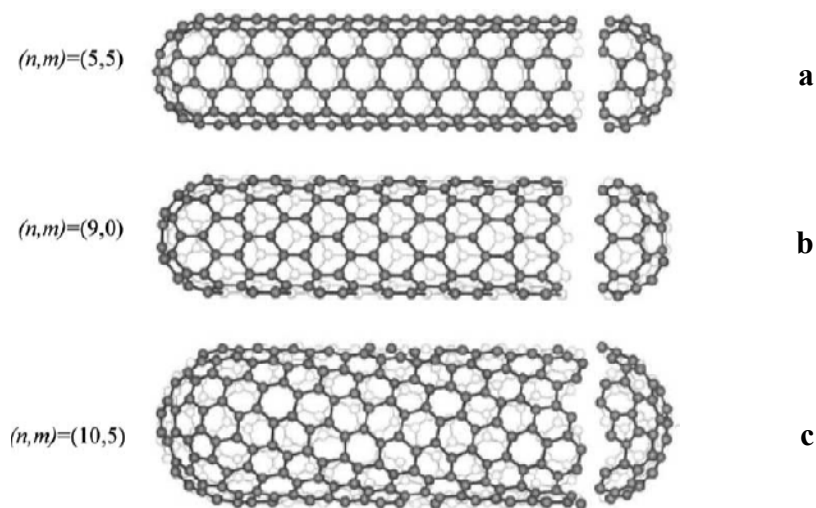
¹ Chirality

² Armchair



شکل (۴-۲) نام گذاری نانو تیوب های کربنی [۲۵]

در حالت دیگر، اگر $m\vec{a}_2$ برابر با صفر باشد آنگاه، بردار حاصل جمع C_h بر روی محور \vec{a}_1 قرار خواهد گرفت که در این صورت نانوتیوب حول این محور لوله شده و ساختار زیگزاگ^۱ با ساختار $(n,0)$ را تشکیل می‌دهد. حالت‌های دیگری نیز می‌تواند رخ دهد از جمله اینکه دو بردار $n\vec{a}_1$ و $m\vec{a}_2$ نابرابر و غیر صفر باشند که در این صورت نانوتیوب های چیرال^۲ تولید خواهند شد، که خود به دو صورت چپ دست و راست دست می‌باشند. در شکل (۵-۲) این سه نوع نانوتیوب های کربنی نشان داده شده است.



شکل (۵-۲) انواع مختلف آرایش نانو تیوب های کربنی (a) آرمچیر (b) زیگزاگ (c) چیرال [۲۸]

^۱ Zigzag

^۲ Chiral

همچنین باید خاطر نشان کرد، فاصله ای که بین لایه های مختلف نانوتیوب های کربنی وجود دارد، به ساختار این تیوب ها وابسته است. برای مثال برای نانوتیوب هایی دارای قطر یکسان، نانوتیوب های با ساختار آرمچیر باید دارای فاصله بین لایه ای برابر با ۰/۳۳۸ نانومتر باشند. این فاصله برای نانوتیوب های زیگزاگ برابر با ۰/۳۴۱ نانومتر و برای نوع چیرال برابر با ۰/۳۳۹ نانومتر است. این فاصله ها تقریبا با فاصله هایی که بین لایه های کربن در گرافیت وجود دارد، برابر می باشند [۲۹].

برخی از خواص نانوتیوب ها عبارت است از مدول یانگ که برای نانوتیوب های تک دیواره حدود ۱ TPa و برای نانوتیوب های چند دیواره حدود ۱/۲۵ TPa می باشد. جالب اینست که این مقدار برای فولاد تنها ۲۳۰ GPa است. چگالی نانوتیوب ها نیز تقریبا ۱/۳ گرم بر سانتی متر مکعب و رسانش حرارتی در راستای طولی آنها برابر است با ۲۰۰۰ وات بر متر کلون است [۳۰].

۲-۳ روش های ساخت نانوتیوب های کربنی

پس از حرارت دادن اتم های کربن تا درجه حرارت حدود 3000°C آنها دوباره با یکدیگر ترکیب می شوند، که این ترکیب می تواند به روش های مختلفی صورت گیرد. برخی تولید کربن بی شکل یا آمورف می کنند، برخی دیگر به شکل توپ فوتبال (مولکول فلورن) و برخی دیگر به شکل کپسول در می آیند که همان نانوتیوب های کربن هستند. معمولا سه روش برای تولید نانوتیوب های کربن به صورت عمده وجود دارد:

۱- تخلیه قوس الکتریکی (EAD)^۱

۲- استفاده از لیزر (LA)^۲

۳- رسوب بخار شیمیایی (CVD)^۳ [۳۱]

^۱ Electric Arc Discharge

^۲ Laser Ablation

^۳ Chemical Vapor Deposition

۲-۴ خواص نانوتیوب های کربنی

۲-۴-۱ خواص مکانیکی

کشف نانوتیوب های کربنی در سال ۱۹۹۱ موجب ایجاد انگیزه برای تحقیقات وسیعتری در زمینه علوم مهندسی که کاملاً بر اساس ساختار نانوتیوب های کربنی و کاربردهای آنها استوار بودند، گردید. این امر تا حد زیادی به علت ترکیب خواص مطلوبی نظیر ساختار عاری از عیب، کوچکی، چگالی کم، سفتی و استحکام بالا در نانوتیوب های کربنی می باشد (استحکام کششی بیرونی ترین لایه نانوتیوب چند دیواره تقریباً ۱۰۰ برابر استحکام آلومینیوم می باشد). با توجه به این ویژگیها، نانوتیوب های کربنی می توانند کاربردهای وسیعی را به خود اختصاص دهند.

بعد از کشف نانوتیوب های کربنی، دانشمندان دریافتند که خواص مکانیکی که به صورت تئوری برای این ساختارهای جالب پیش بینی می شود، شامل استحکام و سفتی بالا، چگالی کم و بی عیب بودن ساختار، می تواند آنها را به گزینه ایده آلی برای بسیاری از کاربردهای تکنولوژیکی تبدیل نماید. نتایج تجربی و نیز تعداد زیادی از روش های شبیه سازی کامپیوتری که برای مدلسازی نانوتیوب های کربنی بکار گرفته شده اند، در دهه اخیر موجب افزایش درک مکانیکی آنها شده، ولی هنوز خواص مکانیکی آنها بطور کامل شناسایی نشده است. توسعه مدل ها و ابزارهای شبیه سازی چند مقیاسی^۱ و چند فیزیکی^۲، حاصل پیوند بین تحقیقات علمی بنیادی و کاربردهای مهندسی است؛ در حالی که این امر هنوز در دست مطالعه قرار دارد. با توجه به اهمیت برخی خواص مکانیکی از جمله ضریب مدول یانگ، سفتی خمشی، معیارهای کمانشی و استحکام های کششی و فشاری، در این بخش به بررسی برخی از این خواص برای نانوتیوب های کربنی پرداخته خواهد شد. در نهایت نمونه های مختلفی از کاربردهای حیرت انگیزی که از مزایای این خواص استفاده می کنند، بیان خواهد شد [۳۲].

^۱ Multiscale

^۲ Multiphysics

در سالهای اخیر ناسا^۱ با استفاده از مزایای استحکام و سفتی بسیار بالای این نانوتیوب ها، در حال ساخت موادی برای کاربردهای فضایی است، که وزن نقش عمده ای را در این موارد ایفا می کند. کامپوزیت هایی که بر اساس نانوتیوب ها ساخته می شوند دارای نسبت استحکام به وزن بی نظیری می باشند، به گونه ای که در هیچ کدام از موادی که تا بحال شناخته شده چنین استحکامی بدست نیامده است. برخی از شرکتهای تجاری محصولاتی با کیفیت بالا با استفاده از نانوتیوب های کربنی برای ساخت نمایشگرهای انتشار میدانی^۲ ارائه نموده اند و در این زمینه سرمایه گذاری های زیادی انجام داده اند. چنین دستگاه هایی کیفیت بالایی را در مواردی مانند، میدان الکتریکی کوچک برای روشن کردن، چگالی جریان انتشار بالا و پایداری بالا از خود نشان می دهند. با پیشرفت ساخت مواد و قابلیت تولید دستگاه ها اهمیت ساخت و درک دستگاه های مهندسی در ابعاد نانومتری به صورت قابل ملاحظه ای در دهه اخیر بالا رفته است.

در مقایسه با دیگر مواد نانومتری، نانوتیوب های کربنی تک دیواره دارای خواص فیزیکی و شیمیایی برجسته ای می باشند. نانوتیوب های کربنی تک دیواره بطور قابل ملاحظه ای سفت، محکم و هادی جریان الکتریسیته بوده و پیش بینی می شود که هدایت حرارتی بهتر از الماس داشته باشند، که این امر امکان استفاده از آنها را در نانو الکترونیک بالا می برد.

اخیرا پیشرفت چشمگیری در زمینه ساخت دستگاه ها و مدارهای نانومتری با استفاده از نانوتیوب های کربنی تک دیواره بوجود آمده است که کارکرد منطقی و نیز بزرگنمایی های قابل توجهی را از خود نشان می دهند. همچنین تحقیقات وسیعی در زمینه ساخت دستگاه های ذخیره موثر با استفاده از نانوتیوب های کربنی تک دیواره، چه برای ذخیره یون های قلیایی، چه برای دستگاه های تولید نیرو در مقیاس نانومتر و چه برای ذخیره هیدروژن مورد استفاده در پیلهای سوختی در دست انجام است [۳۳].

¹ NASA

² Field Emission Display

از سوی دیگر نانوتیوب های کربنی به علت سازگاری زیستی و استحکام بالایی که دارند، پتانسیل بالایی در کاربردهای بیولوژیکی از خود نشان می دهند. نسل کنونی کامپوزیت هایی که به عنوان جایگزین استخوان ها و دندان ها به کار برده می شوند، در حقیقت مخلوط خامی از ذرات پرکننده^۱ (اغلب شیشه) هستند که دارای خواص مکانیکی به شدت ضعیفتری در مقایسه با بافت استخوانی می باشد. کامپوزیت های مبتنی بر فیبر قبلا مورد بررسی قرار گرفته اند، اما به علت جدایش ایجاد شده در سطح تماس بین پرکننده و ماتریس که اغلب در اثر تماس با آب بوجود می آمد مورد توجه نبوده اند. لذا یک مساله مهم، پایداری سطح تماس در شرایط فیزیولوژیکی می باشد.

مواد گرافیتی می توانند در برابر تجزیه شیمیایی موجود در بدن، مقاومت خوبی از خود نشان دهند. ماهیچه مصنوعی ساخته شده از نانوتیوب های کربنی یک گام به سمت این هدف بوده و نویدبخش افزایش حجم کار خروجی و نیروی تولیدی در مقایسه با تکنولوژی های شناخته شده و نیز امکان کار در ولتاژهای پایین تر است.

نانوتیوب های کربنی همچنین به عنوان حامل کننده های دارویی^۲ مورد توجه می باشند. آنها می توانند بدون اینکه موجب بوجود آمدن زخم شوند در نقطه ای که دارو باید به آن برسد کاشته شده و دارو را به آرامی در طول زمان آزاد کنند. همچنین آنها در آزمایشات سلولی نویدهای تازه ای می دهند، به این ترتیب که می توان از آنها به عنوان نانوپپت هایی جهت انتقال مقادیر بسیار کوچکی از مایع یا گاز به داخل سلول های زنده و یا سطوح استفاده نمود. همچنین می توان از آنها به عنوان یک واسط برای کاشت دستگاه های تشخیص عیب^۳ بهره گرفت.

فولادها مدول یانگی در محدوده ۲۰۰ GPa را دارا می باشند و به عنوان یک ماده با استحکام بالا در صنایع و تکنولوژی های مختلف مورد استفاده قرار می گیرند و این در حالی است که

^۱ Filler

^۲ Drug Delivery

^۳ Diagnostic

نانوتیوب های کربنی دارای مدول یانگ حدود 1200 GPa می باشند که این موضوع خواص مکانیکی ویژه و قابل ملاحظه نانوتیوب های کربنی را نشان می دهد. مقایسه استحکام کششی نانوتیوب های- کربنی با سایر مواد نیز اهمیت خواص مکانیکی نانوتیوب های کربنی را بهتر بیان می نماید (150 GPa برای نانوتیوب ها در مقایسه با 0.4 GPa برای فولادهای مرسوم و 0.08 GPa برای چوب) [۳۴].

۲-۴-۲ مدل سازی نانوتیوب ها به عنوان مواد الاستیک

۲-۴-۲-۱ خواص الاستیک : مدول یانگ، ثابت های الاستیک و انرژی کرنشی

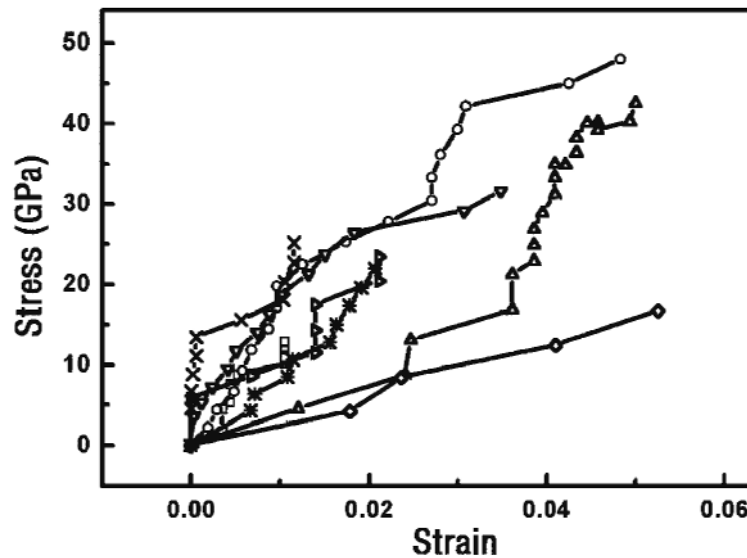
تغییر شکل نانوتیوب ها، به خصوص در نانوتیوب های کربنی تک دیواره به شدت الاستیک می باشد. الاستیک بودن یکی دیگر از خواص کاربردی بسیار مناسب نانوتیوب ها به شمار می رود. تدارک آزمایشگاهی و اندازه گیریهای مکانیکی مدول یانگ و ثابت های الاستیک، نانوتیوب های کربنی اغلب با در نظر گرفتن نانوتیوب های کربنی به عنوان یک تیر الاستیک، انجام شده است. علاوه بر در نظر گرفتن نانوتیوب به عنوان یک تیر، اندازه گیری های آزمایشگاهی نیز وجود دارند که با بررسی نانوتیوب کربنی تحت بار محوری بدست می آیند. لوری^۱ و واگنر [۳۵] از اسپکتروسکوپی میکرو-رامان برای اندازه گیری تغییر شکل فشاری نانوتیوبی که در یک زمینه اپوکسی قرار گرفته است، استفاده کردند. آنها برای نانوتیوب های کربنی تک دیواره مدول یانگی بین $2/8$ تا $3/6 \text{ TPa}$ و برای نانوتیوب های کربنی چند دیواره مدول یانگ $1/7$ تا $2/4 \text{ TPa}$ را اندازه گیری نمودند.

یو^۲ و همکارانش [۳۶] نتایج هشت نانوتیوب کربنی تک دیواره را تحت بار کششی اندازه گیری و مقدار مدول یانگی بین 320 تا 1470 GPa (متوسط 1002 GPa) را بدست آوردند (شکل ۱-۶). در

¹ Lourie

² Yu

آزمایشاتی که در بالا به آنها اشاره گردید، فرض شده است که ضخامت نانوتیوب نزدیک به فاصله بین لایه ای در گرافیت یعنی 0.34 nm می باشد.



شکل (۶-۲) هشت منحنی تنش - کرنش حاصل از آزمایشات بارگذاری کششی بر روی گروههای نانو تیوب های کربنی تک دیواره. مقادیر تنش مهندسی با استفاده از محاسبه سطح مقطع نانو تیوب کربنی بر اساس ضخامت 0.34 nm نانو متر به دست آمده است. [۳۶]

به نظر می رسد که اولین تلاش برای پیش بینی مدول یانگ به صورت تئوری توسط اورنی^۱ و همکارانش [۳۷] انجام شده است. با استفاده از آزمایشات کیتینگ همیلتون^۲ با پارامترهایی که از طریق اصول اولیه تعیین می شوند، سفتی ساختاری نانوتیوب های با اندیس ساختاری (۵,۵) که شامل ۱۰۰، ۲۰۰ و ۴۰۰ اتم می باشند، مورد مطالعه قرار گرفت. اگرچه در این مطالعه مقادیر به صورت صریح ارائه نگردیدند، ولی بعدها توسط تریسی^۳ و همکارانش [۳۸] نشان داده شد که نتایج کار اورنی دلالت بر مدول یانگی در محدوده بین $1/5$ تا $5/0 \text{ TPa}$ دارد. اولین تحلیل های انرژی نانوتیوب های کربنی

¹ Overney

² Keating Hamiltonian

³ Tracy

توسط تیبِتس^۱ [۳۹] با استفاده از تئوری الاستیسیته انجام گرفت. وی بیان داشت که انرژی کرنشی نانو تیوب با R^{-2} متناسب است (R شعاع نانوتیوب است).

لو^۲ و همکارانش [۴۰] با استفاده از یک مدل تجربی در شبیه سازی های دینامیکی، خواص الاستیک نانوتیوب های کربنی تک دیواره و چند دیواره را بدست آوردند. مقادیر مدول یانگ در حدود ۱ TPa و مدول برشی در حدود ۰/۵ TPa بر اساس شبیه سازی تست کشش، گزارش شد. آنها همچنین دریافتند که فاکتورهایی مانند کایرالیته، شعاع و تعداد دیواره ها تاثیر اندکی بر روی مدول یانگ دارند. یائو^۳ و همکارانش [۴۱] از راهکارهای مشابه اما با استفاده از مدل پتانسیلی متفاوت، مدول یانگی در حدود ۱ TPa بدست آوردند. بعلاوه آنها وابستگی مدول یانگ به شعاع و کایرالیته نانوتیوب را نیز در نظر گرفتند. آنها از مدل دینامیک مولکولی استفاده کردند که عبارت های خمش، کشش و پیچش را نیز شامل می گشت و نتیجه گرفتند که در مدل آنها، کرنش در نانوتیوب حساسیت بیشتری به عبارت های ناشی از کایرالیته، از خود نشان می دهد.

اگرچه تا به حال توافقی بر روی این داده ها در مورد مدول یانگ وجود ندارد، باید متذکر شد که یک مقدار منفرد مدول یانگ را نمی توان برای توضیح رفتار تحت کشش، فشار و همچنین خمش بکار برد. علت آن نیز این است که کشش و فشار اصولاً تحت تاثیر پیوندهای سیگمای داخل صفحه ای هستند، در حالی که تحت خمش خالص، رفتار ساختار عمدتاً تحت تاثیر پیوندهای خارج از صفحه می باشد.

۲-۲-۴-۲ مدل های ارائه شده بر مبنای تئوری الاستیسیته

مدل های ساده شده نانوتیوب های کربنی به یکی از این دو شکل می باشند:

¹ Tibbetts

² Lu

³ Yao

۱- تئوری تیر ساده برای تغییر شکل های ساده

۲- تئوری پوسته برای اعوجاج های بزرگ و پیچیده

با فرض کوچک بودن تغییر شکل ها معادله حرکت یک تیر به شکل زیر خواهد بود:

$$\rho A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + EI \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} = q(x) \quad (2-2)$$

که در آن u جابجایی، ρ دانسیته، A سطح مقطع، E مدول یانگ، I ممان اینرسی و $q(x)$ بار گسترده می باشد. این معادله با فرض کوچک بودن جابجایی ها و عمود ماندن صفحات عمود بر محور مرکزی در هنگام خم شدن، بدست آمده است؛ این فرضیات اغلب برای تغییر شکل های کوچک تیرهای بلند و نازک معتبر می باشد؛ فرکانس طبیعی مد ارتعاشی نام با استفاده از فرمول (۲-۳) بدست می آید:

$$\omega = \frac{\beta_i^2}{L^2} \sqrt{\frac{EI}{\rho A}} \quad (3-2)$$

که در آن β_i ریشه معادله ای است که توسط شرایط مرزی حاصل می شود. برای تیری که در یک طرف درگیر (جابجایی صفر و شیب صفر) و در انتهای دیگر آزاد باشد (نیروهای عکس العمل صفر باشند) این معادله به شکل زیر است:

$$\cos \beta_i \cosh \beta_i - 1 = 0 \quad (4-2)$$

لذا فرکانس های سه مد اول ارتعاشی تیر یک سر گیردار را می توان از معادله بالا با

$\beta_1 \approx 1.875^\circ$ ، $\beta_2 \approx 4.694^\circ$ ، $\beta_3 \approx 7.855^\circ$ محاسبه کرد. بنابراین، این محاسبات بر روی

نانوتیوب های کربنی می توانند به منظور تخمین مدول یانگ بکار روند. اولین اندازه گیری تجربی مدول

یانگ نانوتیوب های کربنی چند دیواره توسط تریسی^۱ و همکارانش [۳۸] انجام شد. وی از مدل یک تیر

مرتعش نانوتیوب کربنی چند دیواره، مدولی در حدود ۱/۸ TPa را تخمین زد.

¹ Treacy

مدل های استاتیکی خمش تیر نیز می توانند برای اندازه گیری خواص مکانیکی بکار روند. ونگ^۱ و همکارانش [۴۲] با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی توانستند نیروی خمشی نانوتیوب های کربنی چند دیواره را اندازه گیری نمایند، با فرض اینکه :

$$\frac{PL^3}{3EI} = \delta L \quad (۵-۲)$$

که در آن δL جابجایی انتهای یک تیر یک سر درگیر است که در انتهایش بارگذاری شده و P نیروی اعمالی می باشد، آنها مدول یانگی برابر با $1/28 \pm 0/59$ TPa را اندازه گیری کردند. سالتوات^۲ و همکارانش [۴۳] وابستگی انحنا در راستای عمودی در مقابل نیروی اعمالی را برای دسته های نانوتیوب کربنی چند دیواره و تک دیواره ایجاد شده در داخل یک حفره نانومتری از آلومینا و کاملاً صیقلی را، با استفاده از یک میکروسکوپ نیروی اتمی اندازه گیری نمودند. آنها مقدار ۱ TPa را برای نانوتیوب های کربنی چند دیواره که توسط روش قوس الکتریکی تولید شده بودند، بدست آوردند. این در حالی بود که مقداری بدست آمده برای نانوتیوب های مشابه که بوسیله روش تجزیه کاتالیزوری هیدروکربن ها تولید شده بودند، یک تا دو برابر کوچکتر از این مقدار بود.

۲-۴-۳ استحکام نانوتیوب ها

استحکام نانوتیوب های کربنی به احتمال زیاد بستگی به توزیع نقص ها و شکل هندسی نانوتیوب دارد. یک فاکتور هندسی دیگر بر همکنش بین لایه ها در نانوتیوب های کربنی چند دیواره و دسته های نانوتیوب های کربنی است.

الف - استحکام ناشی از گسیختن پیوندها و تسلیم پلاستیک

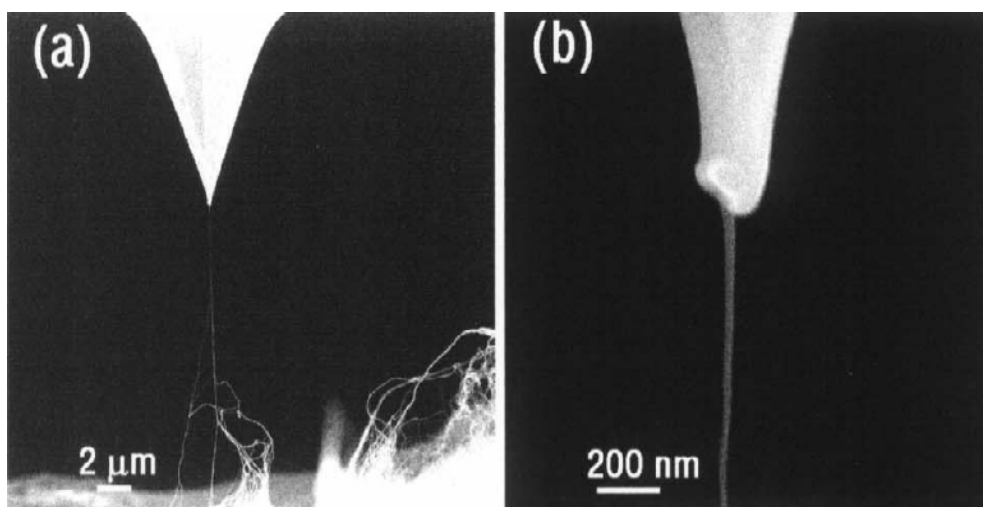
بر خلاف مواد حجیم، چگالی نقص ها در نانوتیوب ها کمتر بوده و لذا این ساختارها در مقیاس نانومتر دارای استحکام بسیار بالاتر می باشند. بسته به روش ساخت، استحکام نانوتیوب های کربنی می تواند

¹ Wong

² Salvetat

به حد تئوری خود برسد. نانوتیوب های کربنی چند دیواره که با استفاده از فرآیند تبخیر پلاسمای کربن تهیه می شوند، اغلب از لحاظ وجود نقص ها، در مقایسه با نانوتیوب های کربنی چند دیواره ای که در زمان کمتر و دمای پایین تر به روش CVD ساخته شده اند، دارای کیفیت بالاتری می باشند. با این حال هنوز معلوم نیست که آیا نانوتیوب های کربنی تک دیواره ای که بوسیله روش لیزر ساخته شده اند بهتر هستند و یا آنهایی که با روش CVD (که در آن ذرات کاتالیزر از قبل بر روی سطح قرار گرفته اند) ساخته شده اند، ساختار بهتری دارند. بنابراین توضیح قوانین پایه ای کاتالیزورهای مختلف در ساخت نانوتیوب های کربنی تک دیواره خالی از لطف نیست.

تعداد اندکی گزارش مبنی بر اندازه گیری استحکام کششی نانوتیوب ها به صورت تجربی وجود دارد. ایده ای آن ساده است اما به نظر می رسد که در این مرحله، انجام این امر مشکل باشد. یو و همکارانش [۳۶] نیروی کششی را بر روی پانزده دسته نانوتیوب های کربنی مجزا اعمال کردند و پاسخ مکانیکی آن را اندازه گیری نمودند. بیشترین کرنشی که آنها بدست آوردند ۵/۳٪ و نزدیک به پیش بینی تئوریک بود که توسط ناردلی^۱ و همکارانش [۴۴] بدست آمد. استحکام متوسط نانوتیوب های کربنی تک دیواره برای هر دسته بین ۱۳ تا ۵۲ Gpa بوده و با فرض اینکه بار اساسا به نانوتیوب هایی که در محیط دسته کربن قرار دارند اعمال می شود محاسبه شده است.



شکل (۲-۷) تصویر یک نوار نانو تیوب کربنی تک دیواره تحت بار گذاری کششی [۳۶]

^۱ Nardelli

والترز^۱ و همکارانش [۴۵] توانستند بیشترین افزایش طول دسته نانوتیوب های کربنی و در نتیجه کرنش شکست را اندازه گیری نمایند. با فرض مدول یانگی برابر با $1/25\text{TPa}$ برای نانوتیوب کربنی تک دیواره، استحکام کششی مقداری برابر با $45 \pm 7\text{GPa}$ بدست آمد. استحکام کششی دسته های بسیار طویل ($\sim 2\text{mm}$) نانوتیوب های کربنی چند دیواره که به روش CVD تهیه شده بودند، توسط پن^۲ و همکارانش [۴۶] با استفاده از یک دستگاه اندازه گیری تغییر یافته، که به طور پیوسته تغییرات مقاومت دسته ها را در حین اعمال بارکششی اندازه گیری می نمود، برابر با $1/72 \pm 0/64\text{GPa}$ محاسبه شد. مقادیر بسیار اندک بدست آمده، برای نانوتیوب های طولی که به روش CVD تهیه شده بودند قابل انتظار بود. فاکتور دیگری که می تواند در استحکام شکست نانو تیوب موثر باشد، طول زیاد آنهاست. زیرا در طول بزرگتر احتمال وجود نقص های بحرانی که می توانند موجب خرابی شوند، بیشتر است. بستگی استحکام شکست به طول هنوز به صورت آزمایشگاهی مورد بررسی قرار نگرفته است.

به عنوان یک جمع بندی می توان گفت، تا به امروز تلاش هایی بر مبنای آزمایش و شبیه سازی برای تعیین استحکام نانوتیوب های کربنی انجام شده است. بیشترین محدودیتی که امروزه برای شبیه سازی وجود دارد، مقیاس زمانی کوچکی است که روش های شبیه سازی دینامیک مولکولی فعلی می توانند آنها را پوشش دهند. روش های مجازی و روش های بین مقیاسی^۳ امیدهایی را در کاهش این مشکلات در آینده را به ما می دهند.

ب - استحکام ناشی از لغزش بین لایه ها

برای دسته های نانوتیوب کربنی تک دیواره تخمین های تئوری وجود دارد که نشان می دهند، در وضعیتی که تمامی سطح مقطع نوارهای نانوتیوب کربنی تک دیواره در تحمل بار اعمالی تا رسیدن به

¹ Walters

² Pan

³ Bridging Scale Methods

استحکام ذاتی شکست سهیم می باشند، طول تماس نانوتیوب کربنی تک دیواره برای انتقال بار موثر بایستی در مرتبه ۱۰ تا ۱۲۰ میکرون باشد. این مقدار بسیار بیشتر از طول متداول نانوتیوب های-کربنی تک دیواره در چنین دسته هایی می باشد، که طول متوسطی در حدود چند صد نانومتر دارند. این بدان معناست که بار انتقال یافته در یک دسته موازی که دارای چنین نانوتیوب های کربنی-تک دیواره کوتاهی می باشد، احتمالاً بسیار کوچک و غیر موثر است. تحلیل های کمی دینامیک اصلی با مدل سازی بوسیله شبیه سازی دینامیک مولکولی، نیازمند یک پتانسیل بین لایه ای است که بطور دقیق بر همکنش های بین لایه ای را به شکل تابعی از مکان نسبی لغزش در نظر گرفته و همچنین بکارگیری صحیح تاثیرات دما را دارا باشد.

باید توجه داشت که نیروهای موثر در لغزش لایه ها توسط فرمول (۲-۶) مشخص می شوند. مطابق این فرمول:

$$F_a = F_s + F_i = \pi d \tau L(t) + F_i \quad (۲-۶)$$

که در آن F_a نیروی کششی اعمالی به صورت تابعی از زمان، τ استحکام برشی، L طول تماس، d قطر پوسته، F_i نیروی وابسته به قطر، ناشی از کشش سطحی و اثرات لبه^۱ می باشند.

۲-۴-۳ خواص الکتریکی و حرارتی

یکی از جالب ترین خواص نانوتیوب ها مربوط به ساختار الکتریکی آنها است. محاسبات اولیه نشان داده که نانوتیوب ها بسته به کایرالیته و قطرشان می توانند رسانا یا نیمه رسانا باشند. به صورتی که نانوتیوب نوع آرمچیر همیشه رسانا است و نوع زیگزاگ می تواند رسانا یا نیمه رسانا باشد. این موضوع، کاربرد نانوتیوب ها را در تولید دستگاه های نانو الکترونیکی به خوبی روشن می سازد.

^۱ Edge Effects

مقاومت الکتریکی نانوتیوب های کربنی چند دیواره در دمای ۳۰ درجه سانتی گراد به طور متوسط حدود $1/2 \times 10^{-4}$ الی $1/5 \times 10^{-4}$ اهم بر سانتیمتر گزارش شده است. بنابراین می توان گفت نانوتیوب های- کربنی، ابر رساناهای قدرتمندی هستند [۴۷].

تولید ترانزیستورهای چند ترمینالی و یا تولید مدارهای الکترونیکی در مقیاس نانومتری به وسیله نانوتیوب های کربنی نیازمند مطالعه دقیق نحوه شکل گیری اتصالات بین نانوتیوب های کربنی است.

خواص حرارتی نانوتیوب ها نیز بسیار جالب توجه است. نانوتیوب ها در خلا، تا دمای 2800°C و در هوا تا دمای 750°C پایدار می باشند. پیش بینی می شود که انتقال حرارت در دمای اتاق در حدود 6000 W/mK باشد. این مقدار را می توان با الماس که یکی از انتقال دهنده های خوب حرارت و دارای ضریب انتقال برابر با 3220 W/mK است مقایسه کرد.

۲-۵ کاربرد نانوتیوب ها

به اختصار می توان به موارد زیر اشاره کرد [۴۸]:

ذخیره انرژی، ذخیره هیدروژن، اضافه کردن لیتیوم، خازن های الکتروشیمیایی، الکترونیک و ساخت میکروچیپ ها، صنایع اتومبیل سازی و هوا فضا و کاربرد در نانو تکنولوژی.

فصل سوم :

کامپوزیت ها

امروزه تقاضای روزافزون برای بهبود عملکرد قطعات به صورت نیازهای مختلف از قبیل وزن کمتر، استحکام بیشتر و هزینه های کمتر مطرح می شوند. تداوم خواسته ها برای بهبود کیفیت های مورد نظر که ممکن است توسط معیارهای مختلف، از جمله وزن کمتر مطرح شود، موجب می گردد تا مواد رایج کنونی به حد کافی پاسخگوی نیازها نباشند [۴۹].

از اینرو دانشمندان و صاحبانظران همواره در تکاپو برای بهبود ویژگیهای مواد موجود می باشند، تا مواد جدیدی با خواص مطلوبتر تولید نمایند. از جمله دست یافته های بشر در این راه می توان به تولید کامپوزیتها^۱ با کاربردهای مختلف اشاره نمود.

از قرنهای پیش، از گاه به عنوان عامل تقویت کننده در خشتهای گلی و بعدها از میل گردهای فولادی در سیمان به منظور تقویت بتن استفاده شده است. هم اکنون نیز از رشته های گرافیت، کولار^۲، شیشه در زمینه های پلیمری برای کاربردهای مختلف از جمله هوا - فضا استفاده می گردند. ساخت تک کریستالهای سرامیکی (ویسکوز) نیز در حال توسعه و پیشرفت می باشد.

طی چهل سال گذشته افزایش سریع و قابل ملاحظه ای در تولید مواد مرکب مصنوعی وجود داشته است. این گونه مواد از انواع پلاستیکهای (پلیمرهای) تقویت شده توسط رشته های ظرفیت تشکیل گشته اند، که بخش عمده بازار را نیز در اختیار دارند. پیش بینی ها حاکی از آن است که این افزایش تقاضا تداوم داشته و به سمت مواد مرکب با پایه فلزی و سرامیکی حرکت خواهند نمود.

عامل و انگیزه چنین افزایش سریع در طول دهه های گذشته، ساخت رشته های کربن در انگلستان و رشته های بور در آمریکا در اوایل دهه ۱۹۴۰ بوده است [۵۰]. این رشته های جدید که ضریب کشسانی بالایی دارند، باعث بهبود قابل ملاحظه ای در سخت پایی ماده مرکب در مقایسه با

¹ Composite

² Kevlar

مواد شناخته شده حاوی رشته های شیشه گشته و از این رو امکان گسترش دامنه استفاده از مواد مرکب را فراهم آورده اند.

۲-۳ تاریخچه کامپوزیتها

کامپوزیت ها یا مواد چند سازه ای، رده ای از مواد پیشرفته هستند که در آنها از ترکیب مواد ساده به منظور ایجاد موادی جدید با خواص مکانیکی و فیزیکی برتر استفاده شده است.

اجزای تشکیل دهنده ویژگی خود را حفظ کرده در یکدیگر حل نشده و با هم ممزوج نمی شوند. طبق تعریف انجمن متالورژی آمریکا، به ترکیب ماکروسکوپی دو یا چند ماده مجزا که فصل مشترک مشخصی بین آنها وجود داشته باشد، کامپوزیت گفته می شود. استفاده از این مواد در طول تاریخ نیز مرسوم بوده است. از اولین کامپوزیت ها یا همان چندسازه های ساخت بشر می توان به گاه گل و آجرهای گلی که در ساخت آنها از تقویت کننده گاه استفاده می شد، اشاره کرد.

بسیاری از نیازهای صنعتی صنایعی مانند صنایع فضایی، راکتورسازی، الکترونیک و غیره نمی تواند با استفاده از مواد معمولی شناخته شده، برآورده شود. اما قسمتی از این نیازها، می تواند با استفاده از چندسازه ها یا کامپوزیت ها برآورده گردد. در چندسازه ها، نه فقط خواص هر یک از اجزاء آن برجا باقی می ماند، بلکه در نتیجه پیوستن آنها با یکدیگر، خواص جدیدتر و بهتری هم بدست می آید. بررسی ها و تحقیقات برای دست یافتن به مواد جدیدتر با خواص مکانیکی بهتر، همواره انجام می گرفته و هنوز هم همگام با پیشرفت صنایع دنبال می گردد. در این بررسی ها، اغلب این هدف دنبال می شود که به موادی با نسبت مناسب از استحکام کششی به چگالی، استحکام حرارتی بالا و خواص ویژه سطح خارجی دست یابند.

اما سابقه استفاده از کامپوزیت های پیشرفته به دهه ۱۹۴۰ باز می گردد. در آن زمان ارتشهای آمریکا و شوروی سابق در رقابتی تنگاتنگ با یکدیگر، موفق به ساخت کامپوزیت پایه پلیمری الیاف

بور- رزین اپوکسی برای استفاده در صنعت هوا فضا شدند. ۲۰ تا ۳۰ سال پس از آن، کامپوزیت های پایه پلیمری به طور گسترده ای به سوی صنایع شهری از جمله ساختمان و حمل و نقل روی آوردند .

۳-۳ مفهوم واژه کامپوزیت

واژه Composite از کلمه انگلیسی to compose به معنی ترکیب کردن، ساخت و مخلوط کردن، مشتق شده است. معمولا یک ماده کامپوزیت را به صورت یک مخلوط فیزیکی در مقیاس ماکروسکوپی از دو یا چند ماده مختلف تعریف می کنند که این مواد خصوصیات فیزیکی و شیمیایی خود را حفظ کرده و مرز مشخصی را با یک دیگر تشکیل می دهند. این مخلوط در مجموع و با توجه به برخی معیارها خواص بهتری از هریک از اجزای تشکیل دهنده خود را دارا می باشد.

به طور کلی خواصی که می توانند با شکل گیری یک کامپوزیت بهبود یابند عبارتند از استحکام، عمر خستگی، سختی، مقاومت در برابر سایش، وزن، رفتارهای وابسته به دما، نارسانایی حرارتی، نارسانایی صوتی و غیره.

۴-۳ ساختار کامپوزیتها

در هر کامپوزیت عموما دو ناحیه متمایز وجود دارد که توسط مرزهای معینی از یکدیگر جدا می شوند. این دو فاز را در اصطلاح ماتریس و فیبر نامیده می شوند، که در این قسمت مختصرا به توضیح هر کدام پرداخته و نمونه هایی از مواد مورد استفاده در هر مورد را به همراه کاربردهای آنها ذکر خواهد شد.

۳-۴-۱ فاز پیوسته (ماده زمینه یا ماتریس)

ماتریس ماده ای است دارای محیطی پیوسته که ماده دیگر یعنی فاز ناپیوسته را در بر گرفته است. دومین ملاک برای تعیین زمینه این است که مقدار ماده ای که به عنوان زمینه استفاده می شود، بیشتر

از قسمت تقویت کننده است. نخستین وظیفه ماتریس احاطه ماده تقویت کننده است، به طوری که نگذارد ماده تقویت کننده پراکنده شود؛ وظیفه دوم، محافظت از ماده تقویت کننده در برابر عوامل شیمیایی است؛ و وظیفه سوم این است که چون مواد زمینه را از جنس نرم انتخاب می کنند، زمانیکه نیرو به کامپوزیت وارد می شود، توسط ماتریس به ماده تقویت کننده انتقال داده شود تا ماده تقویت کننده نیرو را تحمل کند که نهایتاً این مسئله موجب افزایش استحکام کامپوزیت می گردد.

بطور کلی مواد زمینه را می توان تقریباً در سه گروه پلیمرها، سرامیک ها و فلزات طبقه بندی کرد که ذیلاً به تشریح هر کدام گروهها و موارد کاربرد هر یک پرداخته می شود.

۳-۴-۱-۱ پلیمرها

مواد موسوم به رزین متداول ترین مواد زمینه هستند و معمولاً به دو گروه کلی ترموست و ترموپلاستیک تقسیم می شوند. در گذشته ترموستها مواد اصلی زمینه کامپوزیت ها بودند و اگرچه امروزه کاربرد ترموپلاستیک ها رو به افزایش است؛ ولی ترموست ها صلبیت خوبی دارند و در دماهای بالاتر کارایی بهتری دارند. از طرفی ذوب مجدد ترموست ها به دلیل شبکه ای شدن امکان پذیر نیست؛ در حالی که ترموپلاستیک ها شبکه ای نمی شوند و جامداتی هستند که ذوب، شکل دهی و سپس سرد می شوند [۵۱]. برخی از انواع پلیمرها عبارت اند از:

الف) رزین پلی استر:

یکی از معروف ترین و ارزان ترین رزین هاست به طوری که گاهی واژه فایبرگلاس به کامپوزیت ساخته شده از رزین پلی استر با تقویت کننده شیشه به کار می رود. کاربرد اصلی این رزین ها در بدنه کشتی ها، کانال ها، تیوب ها، پانل سقف، واگن های راه آهن و غیره است. از جمله معایب این رزین ها کارایی کم در دمای بالا و مقاومت کم در برابر هوازدگی است.

ب) رزین اپوکسی:

متداول ترین زمینه برای چندسازه های پیشرفته است، چسبندگی عالی و محافظت در برابر خوردگی

از ویژگی های این رزین است. بالاترین دمای کاربرد آن 180°C تا 200°C است. از این رزین برای تولید تیوب ها، سیلندرها، مخازن و ظروف تحت فشار استفاده می شود.

ج) رزین فنولی و کربنی:

رزین های ترموست فنولی کاربرد محدود ولی مهمی دارند و به طوری که سال هاست در مصارفی نظیر کلیدهای برقی، جعبه تقسیم ها، قطعات قالب گیری شده خودرو و غیره استفاده می شوند.

برخی دیگر از کاربردهای این رزین تقویت شده با الیاف بلند در دماغه راکت و درزگیری آگزوز و در بعضی پره ها و باله های راکتها است. قیمت نازل های زمینه کربنی، پنج برابر قیمت نازل های فنولی است و هم اکنون برای استفاده در جداره خارجی فضا پیما ها مورد توجه است. این مواد دارای پایداری گرمایی در دمای بالا و همچنین مقاومت در برابر شوک های گرمایی هستند.

د) زمینه های ترموپلاستیک:

انتخاب آنها براساس قیمت، مقاومت در برابر عوامل محیطی، مقاومت در برابر خزش و غیره تعیین می شود. برخی از پلاستیک های رایج تقویت شده عبارتند از : نایلون، پلی تترافلورئور واتیلن، پلی وینیل کلرید (PVC)، پلی استایرن، پلی اتیلن و غیره که به علت کارایی در دمای بالا به عنوان ترموپلاستیک های مهندسی ، نامیده می شوند [۵۱].

۲-۱-۴-۳-۳ سرامیک ها

مواد جامدی هستند که نوعا پیوند یونی دارند؛ هرچند بعضی از آنها مانند کاربید سیلیسیوم پیوند کووالانسی دارند. پایداری شدید شیمیایی و گرمایی مشخصه اکسیدها، کاربیدها، نیتридها است که اساس مواد سرامیکی را تشکیل می دهند. مهمترین کاربرد آنها شامل جداره خارجی فضا پیماهاست .

محدوده کاری آنها 1100°C تا 2200°C و برای یک یا دو دقیقه 3300°C است.

۳-۴-۱-۳ فلزات

مهمترین مواد زمینه فلزی آلومینیوم، منیزیم، مس و غیره است. اولین استفاده از کامپوزیت های زمینه فلزی در اجزای شاتل های فضایی بود. این مواد به عنوان رینگ، پیستون، پروانه توربین و غیره به کار رفته اند.

۳-۴-۲ فاز ناپیوسته (تقویت کننده یا فیبر)

تقویت کننده ها موادی هستند که به صورت تکه تکه، در یک زمینه پیوسته وارد می شوند تا خواص ماده زمینه را بهتر کنند. در یک کامپوزیت به طور کلی الیاف، عضو بار پذیر اصلی سازه هستند؛ در حالی که ماتریس آنها را در محل و آرایش مطلوب نگاهداشته و به عنوان یک محیط منتقل کننده بار بین الیاف عمل می کند، به علاوه آنها را از صدمات محیطی در اثر بالارفتن دما و رطوبت حفظ می کند. تقویت کننده ها می توانند به صورت یک صفحه، یک ویسکر (رشته یا نخ)، یا یک ذره (پودر) وارد حجم زمینه شوند و خواص آن را بهبود بخشند.

۳-۴-۲-۱ الیاف

موادی هستند که در مقایسه با سایر مواد یک محور بسیار بلند دارند و استحکام آنها در جهت طول نسبت به سایر جهات به مراتب بیشتر است. برخی از آن ها عبارت اند از:

الف) الیاف شیشه (فایبرگلاس)

ساختمان و اندازه این الیاف شیشه ها بسیار متغیر است. کوچکترین آنها به وسیله چشم غیر مسلح دیده نمی شود و بسیار ریز هستند. اندازه های کمی بزرگتر از آن ذراتی هستند که در کارخانجات ساخت فرآورده های الیاف شیشه ها به کمک هوا نقل و انتقال می یابند. شیشه یک ماده بی شکل است که استخوان بندی آن سیلیس و ترکیبات و خواص ویژه آن ناشی از وجود اجزای اکسیدهای مختلف

است. چهار نوع شیشه که بیشتر در کامپوزیت ها مورد استفاده قرار می گیرند، عبارتند از: شیشه نوع E، شیشه نوع C، شیشه نوع S و کوارتز.

ب) الیاف کربن - گرافیت

تقاضا برای الیاف تقویت کننده با استحکام و مدول بالا منجر به توسعه الیاف کربن یا گرافیت شده است. رسانایی نسبتا خوب الکتریسیته، سبکی، استحکام، مقاومت در برابر خزش و میرایی عالی از جمله مزایای آن است. از جمله معایب آن نیز ترد بودن، مقاومت ضربه ای کم و گران بودن است.

ج) الیاف آلی

متداول ترین آنها آرامیدها هستند و کولار یکی از متداول ترین آرامیدها است. شکنندگی آنها کمتر از شیشه یا کربن است، نسوزند و در برابر اغلب حلالها مقاوم اند، به طوری که در متداولترین حلال ها جز اسیدها و بازهای خیلی قوی استحکام کششی خود را حفظ می کنند. از کاربردهای آنها در زره پوش تانک ها و نفربرها، تقویت کننده تایرها و جلیقه ضد گلوله است.

۳-۲-۴-۲ تقویت کننده های ذره ای

اغلب از ذرات برای کاهش قیمت رزین های تقویت شده ترموست یا ترموپلاستیک استفاده می شود. تالک، کربنات کلسیم، خاک اره و پنبه نسوز برخی از این مواد هستند.

۳-۲-۴-۳ تقویت کننده های ویسکر(رشته ای)

تک بلورهایی که نسبت معین طول به عرض آنها بیش از یک است و استحکام آنها بسیار زیاد است و در کاربردهایی از رزین مورد استفاده قرار می گیرند که نمی توان از الیاف استفاده کرد. این مواد ظرفیت حرارتی زیادی دارند، به همین علت در زمینه های فلزی و سرامیکی بیشتر مورد استفاده قرار می گیرند. قیمت بالا و لزوم جمع آوری، مرتب کردن و توزیع آنها به شکل مطلوب کاربرد آنها را محدود کرده است.

۳-۵ تقسیم بندی مواد کامپوزیت

کامپوزیتها را می توان با توجه به ساختار، و نحوه تولید آنها از دیدگاههای مختلف طبقه بندی نمود. در این قسمت به انواع این طبقه بندی ها اشاره می کنیم [۵۱].

الف- دسته بندی کامپوزیت ها از دیدگاه زیستی

➤ کامپوزیت های طبیعی مانند استخوان، ماهیچه، چوب و غیره

➤ کامپوزیت های مصنوعی (مهندسی)

ب- دسته بندی کامپوزیت های مهندسی از لحاظ فاز زمینه (ماتریس)

➤ کامپوزیت های با زمینه سرامیکی

➤ کامپوزیت های با زمینه پلیمری

➤ کامپوزیت های با زمینه فلزی

ج- دسته بندی کامپوزیت ها از لحاظ نوع تقویت کننده

➤ کامپوزیت های تقویت شده با فیبر

➤ کامپوزیت های تقویت شده توسط ذرات

۳-۶ انواع کاربرد کامپوزیت ها

کاربردهای بسیاری از مواد مرکب متصور است که به عنوان مثالهایی می توان به موارد ذیل اشاره نمود.

الف) صنعت هوا- فضا:

ساخت بدنه هواپیما، ساخت پره های توربین بادی و پره های هلی کوپتر، پوشش رادار هواپیما. مواد کامپوزیت تقویت شده با الیاف، ترکیبی از مقاومت کششی و مدول بهتر نسبت به مواد فلزی را دارند و به علت پایین بودن وزن مخصوص نسبت به وزن (مقاومت کششی ویژه) نسبت مدول به وزن (مدول

ویژه)، مواد کامپوزیت به طور مشخص بهتر از مواد فلزی هستند و در بسیاری از کاربردهایی که کاهش وزن سازه از اهمیت برخوردار است از جمله در صنعت هوا فضا، می تواند جایگزین فلزات شوند.

ب) صنعت نفت و گاز:

به منظور ترمیم و تقویت سازه های فرسوده و ترمیم تیوب های فرسوده نفت و گاز و عایق توربین از کامپوزیت ها استفاده می شود.

ج) صنایع دریایی:

ساخت بدنه کشتی و تاسیسات فرا ساحلی با توجه به پایداری بسیار زیاد کامپوزیت های پایه پلیمری و مقاومت بسیار خوب آنها در محیط های خورنده، این کامپوزیت ها کاربردهای وسیعی در صنایع دریایی پیدا کرده اند که از آن جمله می توان به ساخت بدنه قایق ها و کشتی ها و تاسیسات فراساحلی اشاره داشت.

د) صنعت ساختمان:

صنعت ساختمان پرمصرف ترین صنعت برای مواد کامپوزیتی است. استخرهای شنا، وان حمام، سینک ظرفشویی و دست شویی، کف پوش، نمایوش، سقف پوش، برج های خنک کننده و غیره همگی کامپوزیت های پایه پلیمری هستند.

۳-۷ روشهای تولید کامپوزیتها

روش های مختلفی جهت تولید قطعات کامپوزیتی پایه پلیمری وجود دارد که به طور کلی می توان آنها را در سه دسته تقسیم بندی نمود.

الف) روش های تولید ساده لایه چینی دستی و پاششی که شامل روش های تولید با قالب باز هستند .

ب) روش های تولید خاص پالتروژن، پیچش الیاف و لایه نشانی پیوسته که جهت تولید قطعات خاص مانند تیوب، پروفیل، ورق و غیره مورد استفاده قرار می گیرند.

ج) روش تولید قطعات صنعتی SMC، BMC، RTM، GMT، LFT.

فصل چهارم :

نانو کامپوزیت ها

مهمترین دلیل استفاده از نانوکامپوزیتها به جای کامپوزیتهای رایج، چند کاربردی بودن^۱ آنها است. به عنوان مثال در کامپوزیتهای رایج افزایش و بهبود یکی از خواص باعث کاهش قابل توجه خواص دیگر می شود، ولی در نانو کامپوزیتها می توان این عیب را به طور چشمگیری کاهش داد، یعنی می توان چند خاصیت را به طور همزمان افزایش داد و بهبود بخشید.

علت دیگری که این مواد نسبت به کامپوزیتهای متداول خواص ویژه و مطلوب تری از خود نشان می دهند این است که نیروهای بین فصل مشترک تقویت کننده و زمینه در یک نانوکامپوزیت به علت ابعاد نانومتری ذرات تقویت کننده، نسبت به اندازه این نیروها در یک کامپوزیت معمولی قویتر می باشند. برای مثال در برخی موارد افزودن ۵٪ وزنی تقویت کننده نانومتری، معادل با افزودن ۳۰٪ وزنی تقویت کننده معمولی است [۵۲].

نانوکامپوزیت ها مواد مرکبی هستند که ابعاد یکی از اجزای تشکیل دهنده آنها در محدوده نانومتری (۱ تا ۱۰۰ نانومتر) قرار گرفته باشد، یا به عبارت دیگر کامپوزیتی است که در ابعاد زیر میکرون خاصیت کامپوزیتی خود را حفظ نماید.

با توجه به نیازهایی که دنیای صنعتی امروز به مواد جدید بخصوص مواد کامپوزیتی دارد، تحقیق در زمینه مواد نانوکامپوزیت برای بهبود خواص مکانیکی و نیز خواص نوری، الکتریکی، مغناطیسی و شیمیایی این مواد گسترش زیادی یافته است. امروزه تحقیق بر روی روش های ساخت و خواص این مواد متمرکز شده است.

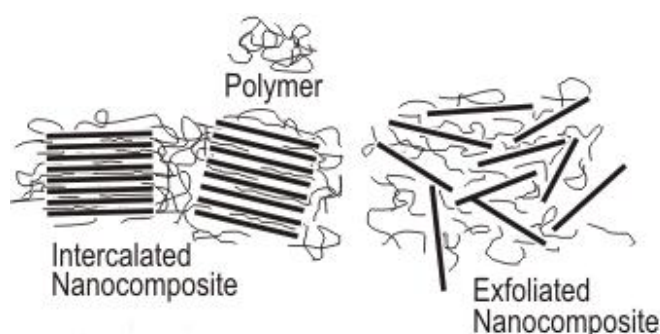
ساختار ذرات پخش شده در زمینه می تواند نوع نانوکامپوزیت را مشخص نماید. بطور کلی نانوکامپوزیت را می توان به دو گروه عمده دسته بندی نمود:

^۱ Multi Function

۱- نانوکامپوزیت های با ساختار در هم تنیده^۱

۲- نانوکامپوزیت های با ساختار پوسته ای^۲

نانوکامپوزیت های در هم تنیده، آن گروه از نانوکامپوزیت ها هستند که در آنها زمینه با ساختار غیر منتظم (مثلا با ترکیب آلی) به داخل لایه های منظم تقویت کننده تداخل می نماید. نانوکامپوزیت های پوسته ای، گروه دیگری از نانوکامپوزیت ها می باشند که در آنها لایه های غیر منظم تقویت کننده به صورت پوسته هایی در داخل زمینه با ساختار غیر منظم وارد شده اند. هر دو نوع نانوکامپوزیت ها در شکل (۱-۴) نشان داده شده اند.



شکل (۱-۴) تصویر شماتیک نانو کامپوزیت های در هم تنیده و پوسته ای [۵۳]

دسته مهمی از نانوکامپوزیت ها، نانوکامپوزیت های پلیمری هستند که یک نوع خاص مواد هیبرید^۳ به شمار می آیند. این مواد ترکیبات درونی^۴ از یک یا چند ماده معدنی به همراه یک پلیمر می باشند. در بسیاری از کاربردها، برای ساخت این مواد نیاز به ترکیب یا مخلوط کردن اجزاء و افزودن پلیمر به صورت محلول جامد یا مذاب می باشد. نانوکامپوزیت هایی از این قبیل، کاربردهای وسیعی در میکرو-الکترونیک، اپتیک خطی، سنسورها و غیره دارند. بطور کلی نانوکامپوزیتها به دلیل دارا بودن خواص متنوع در صنایع مختلف در سطح وسیعی مورد استفاده قرار می گیرند.

¹ Intercalated

² Exfoliated

³ Hybrid

⁴ Intimate

از خصوصیات متنوع آنها می توان به بالا بودن نسبت سطح به حجم، انعطاف پذیری بالا بدون کاهش استحکام و مقاومت در برابر خراشیدگی و همچنین خواص نوری مطلوب مانند شفافیت اشاره نمود.

اگر بتوان بر هم کنش های ذرات تقویت کننده با زمینه و نیز ذرات تقویت کننده با یکدیگر و همچنین تاثیر این ذرات و اندازه آنها را بر روی خواص مکانیکی، نوری، الکتریکی و حرارتی نانوکامپوزیت بررسی کرد، آن گاه طراحی و کنترل وسعت حوزه بر هم کنش، حالت پراکندگی ذره و بهینه سازی کارایی های مختلف نانوکامپوزیت ها، امکان پذیر خواهد بود.

از جمله دلایل مهندسی که می توان به عنوان علت افزایش توجه به نانوکامپوزیت ها در سال های اخیر عنوان داشت، تولید مواد با استفاده از میکروسکوپ های مدرن، و انتقال دهنده های حساس در مقیاس های قابل قبول می باشد، در حالی که چنین امکاناتی تا چندی پیش در اختیار نبود. امروزه علاوه بر این امکانات، با بوجود آمدن نانوتکنولوژی و میکرولیتوگرافی و همچنین قوانین ترکیب دو یا چند ماده برای بدست آوردن ماده ای با خواص جدید، می توان خواص ویژه ای را در اندازه هایی بسیار کوچک بدست آورد.

حال این پرسش مطرح می گردد که چرا از ذرات با ابعاد میکرون برای ساخت کامپوزیتها استفاده نمی شود. در پاسخ می توان چنین گفت: اگرچه استفاده از ذرات میکرونی در ساختمان کامپوزیتها، موجب افزایش ضریب الاستیک می شود؛ ولی این امر با محدودیت هایی مواجه است:

۱- ذرات میکرونی به عنوان نقاط تمرکز تنش عمل می کنند.

۲- این ذرات کرنش نهایی را کم می کنند.

۳- این ذرات استحکام و چقرمگی را کاهش می دهند.

۴- این کامپوزیتها وابستگی بیشتری به کسر حجمی پرکننده^۱ دارند.

^۱ Filler

۲-۴ قدمت نانوکامپوزیت ها

در مورد نانوکامپوزیت ها وضعیتی مشابه آنچه برای کامپوزیت ها مطرح است وجود دارد. ساخت نانوکامپوزیت ها به قرن ها پیش باز می گردد، برای مثال ساخت و بکارگیری ذرات نانومتری فلزی در شیشه یک روش شناخته شده و قدیمی محسوب می شود. رومی ها در گذشته برای رنگ آمیزی برخی شیشه های خود از ذرات ریز طلا، در داخل شیشه استفاده می کردند که این موضوع توسط توماس پانل^۱ در حین مطالعه موزاییک های بجا مانده از رومی ها در محلی به نام فایوم^۲ در صد کیلومتری جنوب قاهره^۳ کشف شد.

۳-۴ انواع نانوکامپوزیت ها

۱-۳-۴ نانوکامپوزیت های زمینه سرامیکی

این مواد از یک فاز تقویت کننده ریز (معمولا کوچکتر از ۱۰۰ نانومتر) درون دانه های بزرگتر یک زمینه تشکیل شده اند. در مورد این مواد، ترکیب های گوناگونی مورد مطالعه قرار گرفته اند؛ ولی بیشترین پژوهش ها در زمینه نانوکامپوزیت هایی با پایه اکسید آلومینیم یا نیترات سیلسیم همراه با تقویت کننده صورت گرفته است. این مواد دارای مقاومت حرارتی و مقاومت خزشی قابل توجهی بوده و همانند بقیه نانو کامپوزیت های سرامیکی عمدتا دارای چگالی بالا و تخلخل کمی هستند [۵۴].

۲-۳-۴ نانوکامپوزیت های زمینه فلزی - سرامیکی

این نانوکامپوزیت ها عمدتا دارای یک جزء سرامیکی با دمای ذوب بالا و یک جزء فلزی با دمای ذوب پایین هستند و در ساخت قطعات عملگرها کاربرد دارند. در عمل جزء سرامیکی استحکام را در دمای

¹ Thomas panel

² Faiyum

³ Cairo

بالا تامین می کند و جزء فلزی دارای پایداری و دوام بالایی است. این مواد برای تهیه قطعاتی با چگالی زیاد و تخلخل کم نامناسب هستند. این مواد مشابه نانو کامپوزیت های سرامیکی هستند با این تفاوت که یکی از اجزای آنها به جای ترکیب های غیر فلزی نظیر اکسیدها، به صورت عنصر فلزی در ساختار ظاهر می شود.

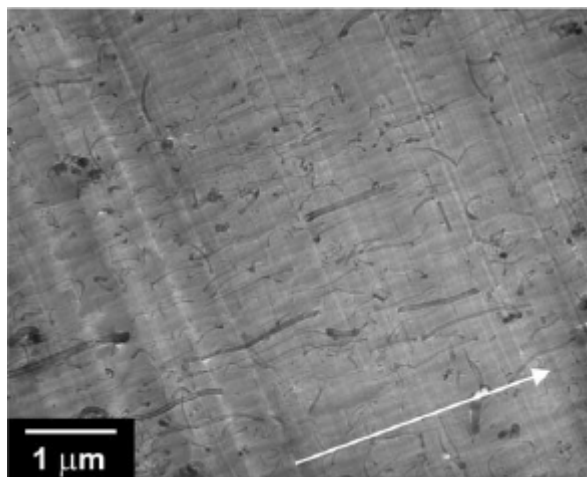
۳-۳-۴ نانو کامپوزیت های زمینه فلزی

در دهه گذشته پژوهش های قابل توجهی در جهت توسعه نوعی از کامپوزیت های زمینه فلزی گرفته است که در آنها تقویت کننده ها از طریق واکنش های گرمازا بین عناصر و یا بین عناصر و ذرات موجود در قطعه تشکیل می شوند. به خاطر تشکیل تقویت کننده های سرامیکی (بوریدها، کاربیدها، نیتريد ها و اکسیدها) در اندازه های نانو در این روش، قطعه دارای ویژگی های مکانیکی عالی است. این مواد دارای ویژگی های مطلوب فلزات (انعطاف پذیری و سفتی) و سرامیک ها (استحکام و مدول بالا) هستند [۵۵].

۴-۳-۴ نانو کامپوزیت های زمینه پلیمری

در بین نانو کامپوزیت ها بیشترین توجه به نانو کامپوزیت های زمینه پلیمری معطوف است. براساس گزارش شرکت BCC^۱، تولید جهانی این دسته از نانو کامپوزیت ها در سال ۲۰۰۳ به ۱۱/۱ میلیون کیلوگرم، به ارزش ۹۰/۸ میلیون دلار رسید. پیش بینی می شود رشد متوسط بازار جهانی این مواد سالانه ۱۸/۴ درصد باشد.

^۱ Business Communication



شکل (۴-۲) نمونه ای از یک نانو کامپوزیت پلیمری (ذرات نانو به صورت خطوط تیره مشاهده می شوند) [۲۷]

۴-۳-۴-۱ خواص و کاربرد نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری

با توجه به خواص متنوع نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری، دلایل زیادی را می توان برای گسترش نانوکامپوزیت های پلیمری نام برد. اولین دلایل، خواص بی نظیر مکانیکی، شیمیایی و فیزیکی آنها است. نانوکامپوزیت های پلیمری عموماً دارای استحکام بالا، وزن کم، پایداری حرارتی بالا، رسانایی الکتریکی زیاد و مقاومت شیمیایی بالایی هستند. با اضافه کردن درصد کمی از مواد نانو به یک پلیمر خالص، استحکام کششی، استحکام تسلیم و مدول یانگ افزایش چشم گیری می یابد. به عنوان مثال با افزودن تنها ۰/۰۴ درصد حجمی میکا (نوعی سیلیکات) با ابعاد ۵۰ نانومتر به اپوکسی^۱ مدول یانگ این ماده ۵۸ درصد افزایش خواهد یافت. همچنین با اضافه کردن ۴/۸ درصد حجمی میکای نانومتری به پلی آمیدها، میزان نفوذپذیری آب در آنها ۵۰ درصد کاهش می یابد. تحقیقات انجام گرفته در دهه اخیر نشان می دهد که استحکام کششی و مدول یانگ کششی کامپوزیت های زمینه پلیمری، با پر کننده نانو سیلیکات لایه ای دو برابر می شود، بدون آن که چقرمگی آنها دچار تغییر گردد. به عنوان مثال تعداد زیادی از پلیمرها نظیر نایلون، اولفین و نیز رزین هایی مانند اپوکسی با افزودن ۲٪ حجمی سیلیکات لایه ای به خواص فوق رسیده اند.

^۱ Epoxy

دلیل دوم توسعه نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری و افزایش تحقیقات در این زمینه، کشف نانوتیوب های کربنی است. استحکام و خواص الکتریکی نانوتیوب های کربنی به طور قابل ملاحظه ای با نانولایه های گرافیت و دیگر مواد پر کننده تفاوت دارد.

بکارگیری این دسته از کامپوزیت ها به دلیل خواص منحصر به فردی که دارند به طور گسترده ای در صنایع خودرو، هوا- فضا و بسته بندی مواد غذایی گسترش یافته است. چنانچه در صنعت خودرو به دلیل افزایش قیمت سوخت و پیامدهای اقتصادی ناشی از آن، تقاضا برای استفاده از موادی نظیر نانوکامپوزیت های پلیمری که هم سبکی لازم و هم استحکامی در حد فلزات دارند، افزایش یافته است. از دیگر کاربردهای نانوکامپوزیت های پلیمری پوشش های مقاوم به سایش، پوشش های مقاوم به خوردگی، پلاستیک های رسانا، حسگرها، آسترهای مقاوم در دمای بالا و غشاهای جداسازی گازها و سیالات نفتی می باشند. به عنوان مثال می توان به نوعی غشاء نانوکامپوزیتی ساخته شده از یک نوع پلیمر و نانولایه های سیلیکا اشاره کرد. این غشاء توسط محققان دانشگاه کارولینای شمالی ساخته شده است و توانایی فوق العاده ای در جداسازی مولکولهای آلی از گازها دارد. در این نوع غشاء، ضمن افزایش قابلیت نفوذپذیری، انتخاب پذیری در جداسازی گازها نیز که یک عامل موثر در جدا کردن گازها و بخارهای آلی در سطح مولکولی محسوب می شود، افزایش یافته است [۵۶].

۴-۳-۲ روش های تولید نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری

به طور کلی سه روش برای تولید نانوکامپوزیت های پلیمری وجود دارد. این روش ها شامل مخلوط سازی مستقیم^۱، فرآوری محلولی^۲ و پلیمریزاسیون درجا^۳ هستند [۵۷]. در ادامه این سه روش مورد بررسی قرار می گیرد.

^۱ Direct Mixing

^۲ Solution Mixing

^۳ In-Situ Polymerization

الف - مخلوط سازی مستقیم

در این روش سوسپانسیونی از مواد نانو به محلول پلیمری اضافه شده، در ادامه پس از ایجاد اختلاط و اطمینان از توزیع یکنواخت مواد پر کننده در پلیمر و سازگاری آن با ماده زمینه، مخلوط حاصله توسط یک پرس هیدرولیک در یک قالب اکستروود می شود و در نهایت صفحات نازک نانوکامپوزیت بدست می آیند. محدودیت این روش میزان افزایش فاز تقویت کننده یا همان مواد پرکننده است. البته به نظر می رسد آگلومره شدن¹ ذرات نیز از دیگر محدودیت های این روش باشد.

ب - فرآوری محلولی

با استفاده از این روش می توان بر برخی از محدودیت های روش مخلوط سازی مستقیم غلبه کرد، ضمن آن که می توان میزان آگلومراسیون و کلوخه ای شدن نانو ذرات در ماده پلیمری را کاهش داد. در این روش به دو صورت می توان نانو کامپوزیت های پلیمری را تولید کرد. اگر ماده زمینه پلیمری و مواد نانو تقویت کننده آن در یکدیگر قابل حل شدن باشند، محلول حاصل را می توان در یک قالب، ریخته گری کرده و نانوکامپوزیت تولید نمود، در غیر این صورت مخلوط مواد نانوکامپوزیت در یک حلال حل شده و در نهایت با تبخیر حلال، نانوکامپوزیت مورد نظر بدست می آید.

ج - پلیمریزاسیون درجا

در این روش مواد نانو را در منومر و یا محلول منومر پلیمر زمینه جایگذاری کرده، و سپس در اثر پلیمریزاسیون، منومر رشد کرده و مواد پرکننده نانومتر را در بر می گیرد. نکته کلیدی در این روش نحوه توزیع مواد نانو در منومر است؛ بطوریکه با کنترل پیوند بین مواد نانو و ماده زمینه، می توان توزیع مورد نظر را بدست آورد. بسیاری از نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری را می توان با این روش تولید کرد.

¹ Agglomeration

نکته ای که در روش های تولید نانوکامپوزیت های پلیمری اهمیت دارد و آنها را از یکدیگر متمایز می کند، توزیع مناسب ماده پرکننده است. با اصلاح سطحی^۱ می توان این توزیع را به شکل یکنواخت به گونه ای انجام داد که از آگلومراسیون اجزای نانومتری ماده پر کننده جلوگیری شود و توزیع مناسب فاز تقویت کننده فراهم گردد. در واقع نکته مهم در تمام این فرایندها، اصلاح فصل مشترک بین پلیمر و اجزای نانومتری است و از آنجایی که مشتق پذیری^۲ پلیمرهایی نظیر اپوکسی بالاست، لذا برای اصلاح سطحی باید از مولکول هایی استفاده گردد که اتصال بین ماده پر کننده و پلیمر را بهبود بخشند. در بحث اصلاح سطحی و برهم کنش فصل مشترک ماده پر کننده و پلیمر، نوع ماده پرکننده و نسبت سطح به حجم آن از اهمیت زیادی برخوردار است.

در نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری از نانو ذرات^۳، نانو صفحات^۴، نانوالیاف^۵ و همین طور نانوتیوب ها^۶ بعنوان ماده تقویت کننده استفاده می شود. این در حالی است که عمدتاً در مورد نانو کامپوزیت های زمینه فلزی و سرامیکی از نانوذرات به عنوان ماده پر کننده استفاده می شود. در نانوکامپوزیت های پلیمری معمولاً از پلیمرهای ترموست نظیر اپوکسی، پلی آمید و پلیمرهای ترموپلاستیک نظیر نایلون^۶، پلی اترترکتون^۷، پلی پروپیلن^۸، پلی اتیلن^۹ و پلی استایرن^{۱۰} به عنوان ماده زمینه این کامپوزیت ها استفاده می گردد.

¹ Surface Modification

² Functionalization

³ Nano particle

⁴ Nonoplate

⁵ Nano fiber

⁶ Nano tube

⁷ Polyetheretherketon

⁸ Polypropylene

⁹ Polyethylene

¹⁰ Polystyrene

در ادامه پس از ارائه شرح مختصری در خصوص رزین های اپوکسی، نایلون ۶، پلی پروپیلن، پلی اتیلن و پلی استایرن به عنوان ماده زمینه این نانوکامپوزیت ها، توضیحات بیشتری راجع به هر کدام از این نانوکامپوزیت ها بر حسب نوع ماده پرکننده ارائه می شود.

۱- رزین های اپوکسی

رزین های اپوکسی به دلیل مقاومت شیمیایی زیاد، استحکام چسبندگی زیاد و چقرمگی در عین انعطاف پذیری بالا کاربردهای زیادی را به خود اختصاص داده اند. یک رزین اپوکسی شامل یک گروه اپوکسی است. انواع مختلفی از رزین های اپوکسی در ساخت کامپوزیت ها مورد استفاده قرار می گیرند. معمول ترین رزین اپوکسی مصرفی محصول واکنش بین فنل A و اپی کلریدرین می باشد.

۲- نایلون ۶

نایلون ۶ اولین پلیمری است که به عنوان ماده زمینه در تهیه نانوکامپوزیت های پلیمری استفاده شده است. نایلون ۶ به عنوان یک پلاستیک مهندسی مطرح است و به دلیل دارا بودن خواصی چون چقرمگی مناسب، ضریب اصطکاک کم و استحکام بالا به طور وسیع مورد استفاده است. این پلیمر نوعی پلی آمید محسوب می شود.

۳- پلی پروپیلن

در حال حاضر رمز موفقیت پروپیلن تجاری در میزان نظم آن از لحاظ ساختاری می باشد. پلی پروپیلن تجاری، پلیمری چقرمه با مقاومت به ضربه خیلی خوب و خواص الکتریکی مناسب و مقاومت شیمیایی عالی در مقابل اسیدها، بازها و نمکها است. به علاوه پلی پروپیلن مقاومت خوبی در مقابل آب گرم و شوینده ها از خود نشان می دهد.

۴- پلی اتیلن

بیشترین حجم را در تولید بسیاری از ترکیبات پتروشیمی دارد. اتیلن سبک ترین الفین است، که گازی بی رنگ، قابل اشتعال می باشد و پلی اتیلن پلیمری است که از اتیلن درست می شود. بر حسب نوع ساختار و روش تولید پلی اتیلن ها، انواع مختلفی از این ماده وجود دارد، تفاوت های آنها عمدتاً از

شاخه هایی که طبیعت مواد را تغییر می دهد ناشی می شود. در این ماده در حالت جامد، وجود شاخه ها و نقص ها سطح، کریستالی شدن را کاهش می دهد. بطور کلی می توان پلی اتیلن را بصورت ساختار طبیعی آمورف (آمورف) و ساختار آزمایشگاهی کریستالی مورد استفاده قرار داد.

۵- پلی استایرن

برخلاف پلیمرهای اشاره شده در بالا، پلی استایرن ساختار بلوری منظمی ندارد و بنابراین بسیار شفاف است (فاقد نواحی بلوری جهت پخش نور می باشد) و ماهیت آمورف دارد. پلی استایرن به راحتی در انواع روش های اکستروژن، قالب گیری تزریقی و قالب گیری بادی برای تولید کامپوزیت ها بکار می رود.

۳-۴-۳-۴ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانوذرات

نانوذرات بیشترین کاربرد را به عنوان ماده تقویت کننده در نانو کامپوزیت ها دارند. اضافه کردن ذرات همچون سیلیکا، ذرات فلزی و همین طور ذرات آلی و غیر آلی، به ماده زمینه باعث افزایش و بهبود استحکام کششی و مدول الاستیک ماده زمینه می شود.

همانگونه که اشاره شده با کاهش اندازه ذرات موجود در نانوکامپوزیت های پلیمری در ابعاد نانومتری، خواص فیزیکی، مکانیکی، نوری و غیره در کامپوزیت ها بهبود می یابد. با جایگذاری ذرات نانومتری شیشه ای در پلیمرها می توان نانو کامپوزیت هایی با شفافیت بالا^۱ معروف به نانو کامپوزیت های نوری تولید کرد. از این گروه می توان به پوشش های اپوکسی حاوی نانو ذرات SiO_2 که توانایی جذب اشعه ماوراء بنفش را دارد اشاره کرد. نمونه ای دیگر از تغییر خواص کامپوزیت های زمینه پلیمری، بهبود چقرمگی شکست^۲ با کاهش اندازه ذرات است.

¹ High Light Transmittance

² Fracture Toughness

۴-۳-۴ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانولایه ها

در این دسته از نانوکامپوزیت ها معمولا دو نوع نانولایه برای تقویت ماده زمینه بکار برده می شود؛
۱- خاک رس^۱ (لایه های سیلیکات) و ۲- گرافیت^۲ که خود جزء مواد لایه ای به شمار می رود.
در حال حاضر خاک رس مونت موریلونیت^۳ بیشترین استفاده را به عنوان ماده پر کننده برای این نوع نانوکامپوزیت ها دارد. این خاک رس، سبک، سخت و به صورت ورقه ای است که برای استفاده آن در نانوکامپوزیت ها می توان صفحات به دست آمده را با ورقه ورقه کردن، به صفحاتی به عرض ۲۰۰ تا ۴۰۰ نانومتر و ضخامت ۱ نانومتر رساند.

نانوکامپوزیت های پلیمری با ماده پرکننده رسی نظیر نانوکامپوزیت های پلی پروپیلن- رس استفاده زیادی در صنعت خودروسازی دارند و به شکل گسترده ای در قطعات اتومبیل استفاده می شوند. با افزودن ذرات نانومتری خاک رس به لاستیک خودروهای سواری، علاوه بر افزایش استحکام مکانیکی و مقاومت لاستیک در برابر سایش، اعوجاج حرارتی و قابلیت اشتعال لاستیک بطور چشم گیری کاهش می یابد [۵۶].

۴-۳-۵ نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری حاوی نانوالیاف کربنی

نانوالیاف کربنی^۴ به عنوان ماده پرکننده در پلیمرهای مختلف نظیر پلی پروپیلن، پلی کربنات نایلون و اپوکسی، پلی اترسولفن^۵ استفاده می شوند. قطر نانوالیاف کربنی که در نانوکامپوزیت ها استفاده می شوند بین ۵۰ تا ۲۰۰ نانومتر است.

¹ Clay

² Graphite

³ Monotmorillonite

⁴ Carbon Nano Fibers (CNF)

⁵ poly Ether Sulfone

خواص نانوکامپوزیت های حاوی نانوالیاف کربنی نظیر چگالی پایین، انبساط حرارتی کم، مقاومت بالا در برابر شوک های حرارتی و استحکام بالا در دماهای بالا باعث شده که این نانوکامپوزیت ها در صنایع خودرو و هوا - فضا مورد توجه زیادی قرار گیرند. بسیاری از خواص نانو کامپوزیت های حاوی نانوالیاف به مراحل ساخت نانوکامپوزیت، خصوصیات نانو الیاف کربنی، نحوه توزیع نانو الیاف و چسبندگی آنها به زمینه ارتباط دارند.

۴-۳-۶ نانوکامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی

تحقیقات در زمینه توزیع نانو تیوب های کربنی در پلیمرها بسیار جدید است. نانوتیوب های کربنی بجز بهبود خواص فیزیکی و مکانیکی پلیمرها باعث بهبود خواص حرارتی و الکتریکی رزین ها نیز می شوند. قطر نانوتیوب های کربنی که در نانوکامپوزیت ها استفاده می شوند بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر و نسبت طول به قطر آنها بین ۱۰ تا ۱۰۰۰ است [۵۸].

پلیمر سازنده زمینه دارای مدول برشی و استحکام کمتری در مقایسه با فیبرهای بکار رفته در کامپوزیت ها می باشد. افزودن نانوتیوب های کربنی به زمینه موجب افزایش سفتی، چقرمگی، هدایت الکتریکی و استحکام برشی بین لایه ای کامپوزیت ها خواهد شد. بعلاوه وجود نانوتیوب های کربنی، مقاومت در برابر خستگی و خزش را نیز افزایش می دهد. عمده کاربردهای سازه ای این نانوکامپوزیت ها در مصارف نظامی و نیز هواپیماهای تجاری است که در آنها کاهش وزن نقش بسیار عمده ای را ایفا می کند. از جمله کاربردهای دیگری که این مواد دارند می توان به کاربردهای فضایی آنها اشاره کرد.

الف- ویژگیهای نانوتیوب های کربنی، تک دیواره و چند دیواره در نانوکامپوزیتها

هر دو نوع نانوتیوب های کربنی تک دیواره و چند دیواره به عنوان ماده تقویت کننده در نانو کامپوزیتها قابل استفاده هستند. اما علاقه بیشتر به استفاده از نانوتیوب های تک دیواره به دلیل خصوصیات برتر مکانیکی و الکتریکی آنهاست. این در حالی است که نانوتیوب های چند دیواره به علت

پیوندهای داخلی ضعیفتر استحکام کمتری نسبت به تک دیواره دارند و کمتر مورد استفاده قرار می گیرند.

ب- روش های تولید نانو کامپوزیت پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی

در نانوکامپوزیت ها بویژه نانو کامپوزیت های پلیمری، کارآیی ماده تقویت کننده به توانایی انتقال بار از ماده زمینه به تقویت کننده بستگی دارد. برای رسیدن به این هدف، توزیع یکنواخت نانوتیوب های کربنی، افزایش چسبندگی و مشتق پذیری آنها، و هم راستا بودن آنها از عوامل اصلی در طراحی و ساخت نانو کامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی است.

همانگونه که قبلا اشاره شد نانوکامپوزیت های پلیمری را با روش مخلوط سازی مستقیم، فرآوری محلولی و پلیمریزاسیون درجا می توان تولید کرد. عمدتا نانوکامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی نیز با استفاده از روش های فوق تولید می شوند، اما برای پخش و توزیع نانوتیوب ها در محلول یا منومر از تعدادی روش های خاص استفاده می شود. در روش های جدید با ایجاد امواج پالسی و مافوق صوت، نانوتیوب ها را درون ماده پلیمری پخش می کنند. اما این روش تنها برای توزیع دسته های کوچک آگلومره شده نانوتیوب ها قابل استفاده است، زیرا در دسته های بزرگتر، فاصله گرفتن نانوتیوب ها از نوک پروبی که امواج را ساطع می کند، مانع از رسیدن انرژی لازم به آنها می شود. از دیگر عیوب این روش ها پارگی نانوتیوب ها به خاطر تمرکز انرژی روی آنهاست. این امر باعث افت خواص نانوتیوب ها می شود. لذا روش های جدید و متفاوتی در دست بررسی است که نمونه ای از آن توضیح داده می شود.

تولید نانوکامپوزیت اپوکسی - نانوتیوب های دو دیواره^۱ بر اساس یک روش جدید موسوم به مخلوط کردن برشی^۲ است که مشابه روش مخلوط سازی مستقیم می باشد. این روش به عنوان یک راه مناسب و استاندارد برای توزیع ذرات میکرومتری در کامپوزیت ها و پوشش ها است. اما تحقیقات

¹ Epoxy/DWCNT

² Shear Mixing

نشان داده که از این ایده می توان برای توزیع مواد نانومتری در یک زمینه پلیمری نیز استفاده کرد. در این روش ابتدا نانوتیوب ها با رزین اپوکسی مخلوط می شوند، سپس جهت توزیع نانوتیوب ها در رزین اپوکسی، مخلوط وارد دستگاهی موسوم به Calander می شوند. این دستگاه دارای ۳ غلتک از جنس Al_2O_3 است که با فاصله $5 \mu m$ از هم قرار دارند، به طوری که غلتک اول با سرعت ۲۰ rpm و غلتک دوم و سوم به ترتیب با سرعت های ۶۰ rpm و ۱۸۰ rpm در حال چرخیدن هستند. مخلوط به مدت ۲ دقیقه و به شکل گردابی در بین غلاتک ها ورزیده می شود و پس از خروج و عملیات نهایی، نانو کامپوزیت تولید می شود [۵۹].

۴-۴ نانو کامپوزیتهای پلیمری (اپوکسی) حاوی نانوتیوب های کربنی تک دیواره^۱

۴-۴-۱ مقدمه

در این قسمت رفتار مکانیکی نانوتیوب های تک دیواره و نانوتیوب های چند دیواره^۲ و کامپوزیت های پایه پلیمری (اپوکسی)، بویژه استحکام کششی نانوتیوب های کربنی و نحوه پخش آن، خواص کامپوزیت های پلیمری، رفتار خستگی و مکانیزم خستگی رشته های تقویت شده نانوتیوب های تک دیواره مورد بررسی قرار می گیرد [۶۰].

¹ Single-Walled Carbon Nanotubes(SWCNTs)

² Multi-Walled Carbon Nanotubes(MWCNTs)

۴-۴-۲ خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پلیمری (اپوکسی) حاوی نانوتیوب های کربنی

۴-۴-۲-۱ خواص الاستیک و استحکام

اخیرا پیشرفت های قابل توجهی در زمینه خواص کششی نانوتیوب های کربنی بصورت تجربی انجام شده است. با استفاده از میکروسکوپ اتمی^۱ و کشش نانوتیوب های تک دیواره، توسط والترز^۲ و همکارانش استحکام کششی نانوتیوب های تک دیواره $45 \pm 7 \text{ Gpa}$ تخمین زده شده است.

پن^۳ و همکارانش مدول یانگ نانوتیوب های چند دیواره را $0.23 \pm 0.45 \text{ Tpa}$ و استحکام کشش آن را $0.64 \pm 1.72 \text{ Gpa}$ تخمین زده اند. یو^۴ و همکارانش یک تست کشش روی رشته های نانوتیوب های چند دیواره و نانوتیوب های تک دیواره مختلف با استفاده از میکروسکوپ اتمی انجام دادند که نتایج آن برای رشته های نانوتیوب های تک دیواره در محدوده ۱۱ تا 63 Gpa و نانوتیوب های چند دیواره بین ۱۳ تا 52 Gpa بوده است. لی^۵ و همکارانش استحکام کششی نانوتیوب های تک دیواره را از $0.2 \pm 2.3 \text{ Gpa}$ تا $1.4 \pm 14.2 \text{ Gpa}$ به دست آورده اند.

ژو^۶ و همکارانش نشان دادند که استحکام کششی نانوتیوب های تک دیواره در محدوده ۴۹ تا 77 Gpa می باشد. همچنین او در مطالعه خود حداقل مقدار مدول الاستیک نانوتیوب های تک دیواره را 100 Gpa تخمین زده است که این مربوط به عیوب داخلی و مشکلاتی است که در تولید نانوتیوب های کربنی بدون عیب بوجود می آید.

استحکام کششی نانوتیوب های کربنی یک مقدار ثابت و مشخصی نیست و با استفاده از روش های آمار و احتمالات بدست می آید. تا بحال درباره نحوه پخش استحکام کششی نانوتیوب های-

¹ Atomic Force Microscopy

² Walters

³ Pan

⁴ Yu

⁵ Li

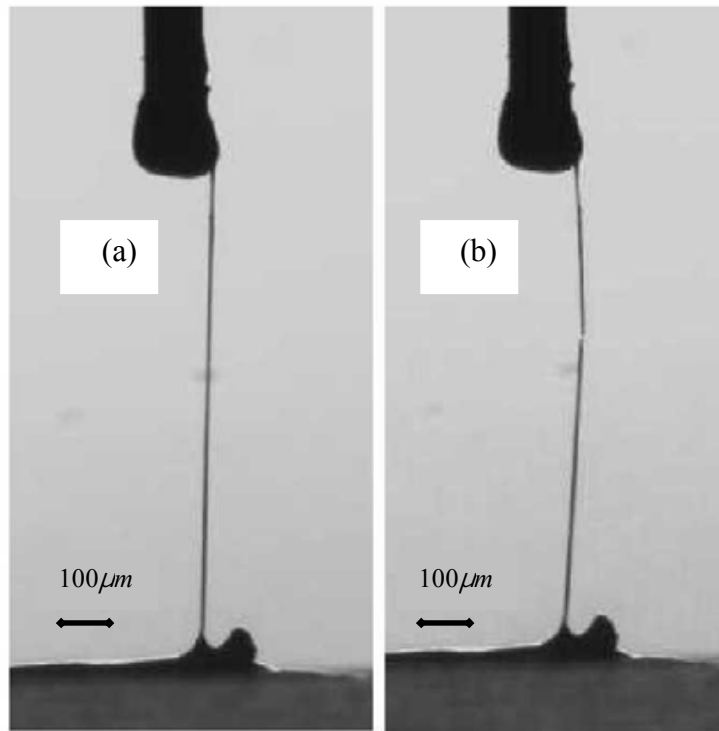
⁶ Zhu

کربنی گزارشی داده نشده است. اما در مطالعه لیاو^۱ و همکارانش با استفاده از توزیع وایبول^۲ نحوه پخش استحکام کششی بررسی شده است. تمام نمونه های نانوتیوب های تک دیواره که در آن مورد مطالعه قرار گرفته اند، توسط کاتالیزورهای تجزیه کننده هیدروکربنی سنتز شده اند. رشته های ممتد و دراز با قطر 100μ میکرون بدست آمده اند و سه نمونه از آنها تهیه شده است که طول آنها ۳ میلیمتر می باشد. همچنین قطر دسته نانوتیوب های تک دیواره که بوسیله میکروسکوپ الکترونیکی اندازه گیری شده اند، در محدوده ۱۵ تا ۲۵ میکرومتر است. یک دستگاه تست نانومکانیکی با دقت جابجایی ۱ نانومتر و دقت نیرویی 0.2 میکرون برای این آزمایش مورد استفاده قرار گرفته است. هر یک از این نانوتیوب های تک دیواره بصورت عمودی بین دو سطح قرار داده می شود که محل اتصال نیروها بوسیله اپوکسی می باشد.

نرخ کرنش در هر 0.1 ثانیه کنترل می شود و این کار بر روی ۱۲ نمونه صورت گرفته است که در شکل (۴-۴) نشان داده شده است. همه این نمونه ها در منطقه انتهایی شکسته شده اند و با در نظر گرفتن ۶۵٪ شکستها در رشته ها، استحکام کشش نانوتیوب های تک دیواره در حدود $10-52 \text{ Gpa}$ (با میانگین 23 Gpa) تخمین زده شده اند (جدول ۴-۱).

¹ Liao

² Weibull



شکل (۳-۴) رشته نانو تیوب های کربنی تک دیواره که در معرض بار کششی قرار گرفته اند.

(a) قبل از شکست (b) لحظه ای بعد از شکست [۶۰]

جدول (۱-۴) مقایسه نتایج مقاومت کششی نانوتیوب های کربنی [۶۰]

Type of CNT	Young's modulus (TPa)	Tensile strength (GPa)	Strain	Reference
MWNT	0.27-0.95	11-63	12%	Yu et al (2000)
	0.45 ± 0.23	1.72 ± 0.64		Pan et al (1999)
SWNT (ropes)	0.32-1.47	13-52	5.3%	Yu et al (2000)
	(Mean 1.0)	(Mean 30)		
		2.3-14.2		Li et al (2003)
		45 ± 7	6.7%	Walters et al (1999)
		49-77		Zhu et al (2002)
	0.23-1 (mean: 0.59)	10-55	3.3-10%	Liao et al (2002)

نانوتیوب های تک دیواره از زیر رشته های زیادی تشکیل شده است که قطر آنها از ۱۰ تا ۴۰ نانومتر می باشند. رشته های نانو تیوب های تک دیواره که برای تست های کشش آماده شده اند شامل چند صد تا هزار زیر رشته می باشند، که بین اینها هیچ نوع ارتباط و وابستگی وجود ندارد. هنگام تست هر کدام از این زیر رشته ها بصورت مستقل عمل می کنند و تنش وارده بصورت یکسان بر روی آنها توزیع می گردد. بعد از شکست نیز هر کدام از زیر رشته ها، تنش بین زیر رشته های دیگر پخش می شود تا اینکه شکست نهایی صورت بگیرد. می توان چنین گفت که در هر یک از اعوجاج ها مقدار زیادی از این زیر رشته ها شکسته می شود.

۴-۲-۲-۲ بررسی مدول الاستیسیته و استحکام برشی

مدول الاستیک و استحکام کششی بالا و متفاوت نانوتیوب های کربنی هنگامی که با پلیمرها ترکیب می شوند، لزوماً خواص مکانیکی شان را بهبود نمی بخشد. تحقیقات اخیر که در آنها از نانوتیوب های کربنی که در ساختمان کامپوزیت های پلیمری استفاده شده، نشان از نتایج خوب و بد دارد.

لائو^۱ و شی^۲ نشان داده اند که استحکام کامپوزیت های نانوتیوب های کربنی- اپوکسی با اضافه کردن ۲٪ وزنی افزایش پیدا نکرده است. باتاچاریا^۳ و همکارانش خواص نانوتیوب های تک دیواره و پروپیلن های مخلوط شده در حالت مذاب را مطالعه کردند و مشاهده کردند که استحکام کششی بصورت جزئی کاهش پیدا کرده است، حتی استحکام کششی و مدول الاستیک در کامپوزیت های شامل ۰/۸٪ وزنی نانو تیوب کاهش جزئی داشته است.

بعضی از مطالعات نشان از افزایش متعادل در مدول الاستیک همراه با افزایش جزئی در خواص مکانیکی کامپوزیت های پلیمری حاوی نانوتیوب های کربنی دارد. در مطالعه ژو^۴ و همکارانش بر روی

¹ Lau

² Shi

³ Batacharia

⁴ Xu

کامپوزیت های اپوکسی - نانوتیوب های چند دیواره که لایه نازکی از آنها با استفاده از فرآیند پوششی دهی اسپینی^۱ در مقایسه با لایه های نازک زیرین پوشانده شده است، ۲۴٪ افزایش در مدول الاستیک مشاهده نمودند.

مطالعه ای که توسط وانگ^۲ و همکارانش بر روی کامپوزیت های پلی استایرن - نانوتیوب های چند دیواره که توسط عملیات اکستروژن تولید شده اند انجام گرفته، نشان از یک افزایش معمولی ۱۰٪ در مدول الاستیسیته و یک افزایش جزئی در استحکام کششی دارد.

هاگن مولر^۳ و همکارانش نشان دادند که برای کامپوزیت های نانوتیوب های تک دیواره - پلی متیل متاکریلیت، با افزایش در بارگذاری نانوتیوب ها، افزایشی متعادلی در مدول الاستیک و تنش تسلیم بدست می آید.

چادلر^۴ و همکارانش نشان دادند که مدول کششی و فشاری کامپوزیت های اپوکسی و نانوتیوب های کربنی، با اضافه کردن ۵٪ وزنی از نانوتیوب های کربنی به ماتریس، به ترتیب ۲۰٪ و ۲۴٪ بدست آمده است.

در بعضی موارد افزایش قابل توجهی در خواص مکانیکی نانو کامپوزیتهای های تقویت شده دیده شده است. گانگلی^۵ و همکارانش نشان دادند که ۱٪ وزنی نانوتیوب های چند دیواره تقویت کننده، باعث افزایش تنش نهایی اپوکسی ها و کرنش شکست تا حد ۱۳۹٪ و ۱۵۸٪ می شود و همچنین باعث افزایش ۱۷۰٪ چقرمگی شکست کامپوزیت های شامل نانوتیوب های چند دیواره می شود.

¹ Spiny

² Vang

³ Haggemueller

⁴ Schadler

⁵ Ganguli

گانگز^۱ و همکارانش نشان دادند که افزایش ۱٪ وزنی نانوتیوب های کربنی به کامپوزیت های اپوکسی- نانوتیوب های کربنی، سبب ۳۰٪ افزایش مدول الاستیک می شود.

لیو^۲ و همکارانش نشان دادند که افزایش ۲٪ وزنی نانوتیوب های چند دیواره به کامپوزیت های نایلون ۶، در مقایسه با نایلون ۶ خالص سبب افزایش ۲۱۴٪ مدول الاستیک و ۱۶۲٪ تنش تسلیم می شود.

الائوی^۳ و همکارانش نشان دادند که مدول یانگ و تنش تسلیم کامپوزیت های اپوکسی- نانوتیوب های چند دیواره با افزایش ۱٪ و ۴٪ وزنی نانوتیوب ها دو برابر و چهار برابر شده اند. گئو^۴ و همکارانش نشان دادند که برای کامپوزیت های اپوکسی- نانوتیوب های تک دیواره افزایش ۲۰ تا ۳۰٪ وزنی نانوتیوب های تک دیواره سبب افزایش ۲۵۰٪ تا ۳۰۰٪ مدول ذخیره سازی می شود. کیان^۵ و همکارانش نشان دادند که با افزایش ۱٪ وزنی نانوتیوب های کربنی، ۳۶ تا ۴۲٪ افزایش در مدول الاستیک و ۲۵٪ افزایش در استحکام کششی در کامپوزیت های نانوتیوب های چند دیواره- پلی استایرن دیده شده است.

با توجه به نتایج حاصله از خواص ترکیبی و تجربی کامپوزیت های حاوی نانوتیوب های کربنی و پلیمر، در زمینه روش های فرایندی نحوه پخش و امتداد ماتریس ها، عملیات بر روی نانوتیوب های کربنی و همچنین درک و کنترل بهتر چسبندگی بین لایه های مشترک نانوتیوب های کربنی و پلیمر به منظور بدست آوردن نانوکامپوزیت های با خواص و عملکرد مطلوب و قابل پیش بینی، نیاز به شکل گیری تحقیقات گسترده تر و بیشتری در این زمینه احساس می گردد.

¹ Gangs

² Lio

³ Allau

⁴ Gou

⁵ Qian

۴-۲-۳ نانوکامپوزیت‌های کربن-پلیمر

مطالعات قبلی بر روی کامپوزیت‌های پلیمر نانوتیوب‌های کربنی دلالت بر پیوند شیمیایی بین نانوتیوب‌های کربنی و ماتریس پلیمر و چسبندگی بین نانوتیوب‌های کربنی و پلیمرهای خاص دارد. بعد از بررسی‌های دقیق سطح شکست کامپوزیت‌های هیدروکسی آینواتر و نانوتیوب‌های چند دیواره، باور^۱ و همکارانش در بررسی چسبندگی و تماس پلیمر و نانوتیوب‌ها مشاهده کردند که پلیمر و نانوتیوب‌ها در اکثریت موارد به هم چسبیده‌اند. که در بعضی موارد این چسبندگی بصورت لایه‌ای از پلیمر می‌باشد. چانگ^۲ و همکارانش همچنین مشاهده کردند که نانوتیوب‌های کربنی بوسیله پلی پیروول‌ها در کامپوزیت‌های نانوتیوب‌های کربنی- پلی پیروول‌ها بخوبی چسبیده‌اند. اما با استفاده از روش X-Ray مشاهده شده است که هیچ نوع پیوند شیمیایی بین نانوتیوب‌های کربنی و پلیمرها وجود ندارد.

لوری و واگنر برای اولین بار نشان دادند که بخش‌های مختلف نانوتیوب‌های کربنی در ماتریس اپوکسی به صورت تکه تکه می‌باشند و این به علت انتقال نیرو از ماتریس بر نانوتیوب‌های کربنی می‌باشد. از این بخش‌های پراکنده آنها حدس زدند که مقدار قابلیت انتقال تنش در نانوتیوب‌های کربنی و ماتریس حداقل یک مرتبه بزرگتر از مقدار اندازه‌گیری شده به روش میکرو کامپوزیت‌های پایه فیبری می‌باشد. در مقایسه با سطح تماس نانو تیوب‌های کربنی - پلیمر، سطح تماس فیبر- پلیمر دارای استحکام کمتری می‌باشند که سبب رشد سریع ترک می‌شود.

همچنین کیان و همکارانش نشان دادند که بار کششی بصورت موثری می‌تواند از ماتریس پلی استایرن به نانوتیوب‌های کربنی انتقال یابد. زیرا که با اضافه کردن ۱٪ وزنی نانوتیوب‌های کربنی ۴۲٪ افزایش مدول الاستیک مشاهده شده است. نتایج مشابهی بوسیله ژو و همکارانش نشان داده شده است، که در آن از کامپوزیت‌های لایه نازک اپوکسی- نانوتیوب‌های کربنی استفاده شده

¹ Baver

² Chang

است. با استفاده از روش کلی - تایسون، واگنر و همکارانش نشان دادند که افزایش استحکام برشی بین سطح نانوتیوب های کربنی و پلیمرها امکان پذیر است. کوپر^۱ و همکارانش نشان دادند که تنش برشی بین سطحی نانوتیوب های چند دیواره - اپوکسی از ۳۵ تا ۳۷۶ MPa می باشد که نتایج آنها بر اساس آزمایشات پالوت^۲ و همکارانش که با استفاده از میکروسکوپ اتمی صورت گرفته، بر گرفته شده است. باربر^۳ و همکارانش نیز با استفاده از نتایج فوق نشان دادند که میانگین تنش برشی سطحی مورد نیاز برای جدا کردن یک نانوتیوب چند دیواره از ماتریس پلی اتیلن بوتان ۴۷ MPa می باشد. نتایج پراکنده بدست آمده در این زمینه نیز نیاز به بررسی گسترده تر در این زمینه را نشان می دهد [۶۱].

¹ Cooper

² Pullout

³ Barber

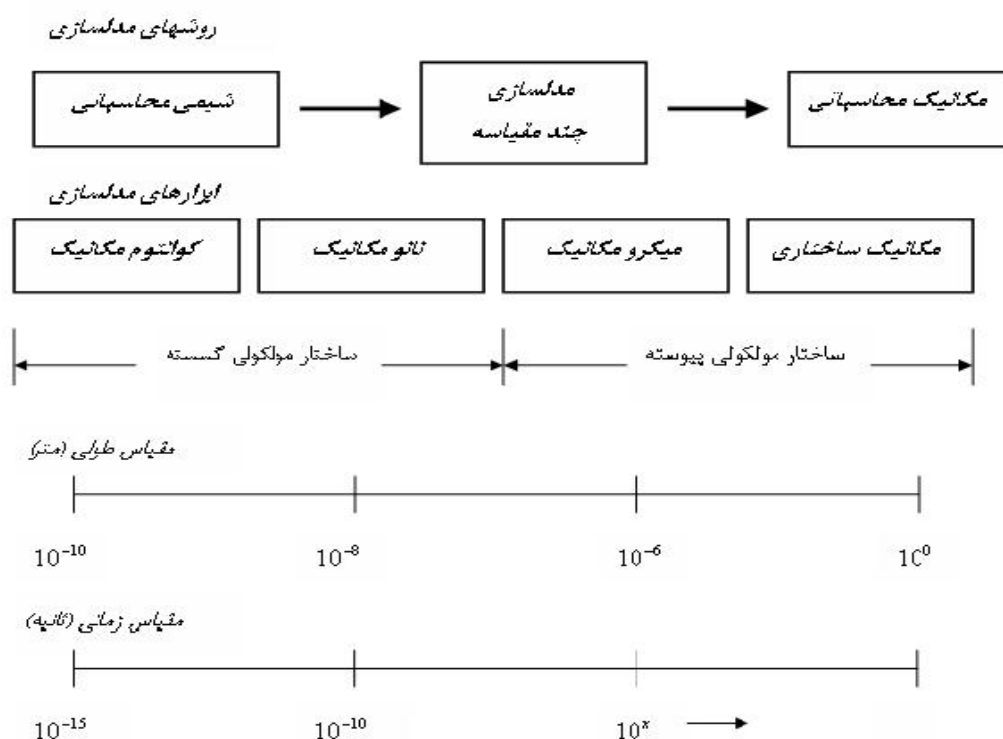
فصل پنجم :

روشهای مدلسازی

نانو کامپوزیتها

۱-۵ مقدمه

خواص مکانیکی مواد دارای ساختار نانو می تواند بوسیله روشهای متعدد محاسباتی تعیین گردد. این روشهای مدل سازی شامل طیف وسیعی از مقیاسهای طول و زمان می گردد (شکل ۵-۱). همانطور که گفته شد، برای مدلسازی در مقیاسهای طولی و زمانی کوتاهتر، از روشهای شیمی محاسباتی برای پیش بینی ساختار اتمی استفاده می شود و در مقیاسهای طولی و زمانی بزرگتر از مکانیک محاسباتی جهت پیش بینی خواص مکانیکی مواد و ساختار های مهندسی استفاده می شود. اما در مقیاسهای طولی و زمانی متوسط، هیچ روش کلی مشخصی، همانند مقیاسهای بلند و کوتاهتر وجود ندارد؛ بنابراین از روشهای چند مقیاسه استفاده می شود.



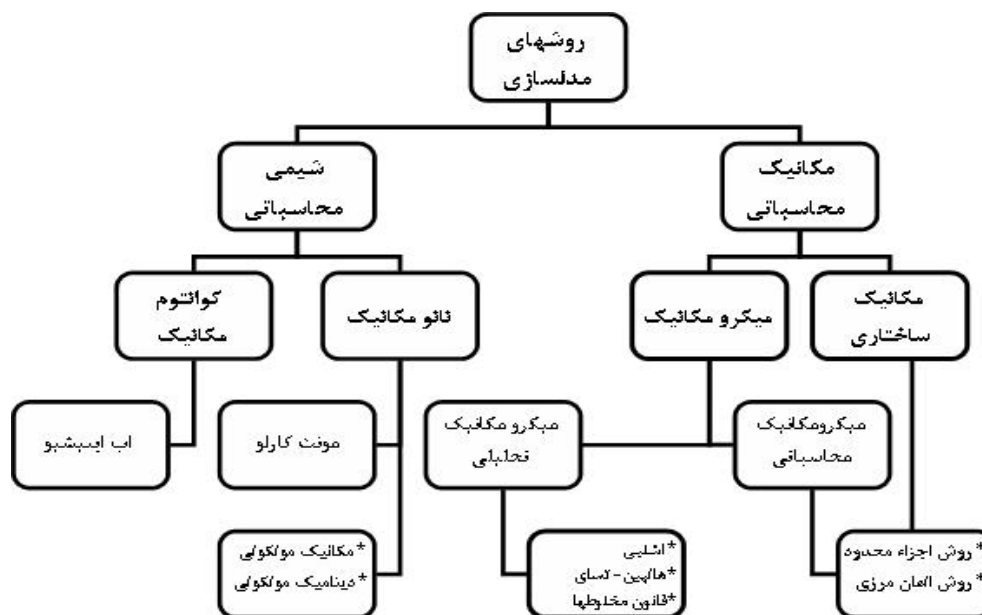
شکل (۱-۵) مقیاسهای طولی و زمانی متفاوت مورد استفاده در مدلسازی جهت تعیین خواص مکانیکی نانو کامپوزیتها

[۶۲]

مطابق شکل (۱-۵)، هر یک از روشهای مدلسازی دارای کلاسهای متعددی از ابزارهای مدلسازی می باشد. مکانیک کوانتومی و نانومکانیک از فرضیه ساختارهای مولکولی مجزا، بهره می گیرند. در

حالیکه میکرومکانیک و مکانیک ساختاری با فرض وجود ساختارهای پیوسته مواد به حل مسئله می پردازند.

شکل (۵-۲) بصورت شماتیک تقسیم بندی روشهای شاخص مدلسازی را بر اساس دو شاخه اصلی مکانیک محاسباتی و شیمی محاسباتی نشان می دهد. روشهای پایه پیوسته حاوی تکنیکهایی مانند روشهای اجزاء محدود^۱، روش المان مرزی^۲ و روش میکرومکانیک می باشند. روشهای میکرومکانیکی خاص شامل مانند روش اشلبی^۳ روش موری- تاناکا، روش هالپین- تسای می شوند. روشهای نانومکانیک نیز، روشهای دینامیک مولکولی، مونت کارلو^۴، اب اینیشیو^۵ را در بر دارند. ذیلا هر کدام از روشهای پایه پیوسته و مولکولی مختصرا توضیح داده می شوند.



شکل (۵-۲) نمودار تکنیکهای مدلسازی نانو کامپوزیتها [۶۲]

¹ Finite Element Method (FEM)

² Boundry Element Method (BEM)

³ Eshelby

⁴ Monte Carlo (MC)

⁵ Ab Initio

۲-۵ روشهای مدلسازی پیوسته

در این روشهای مدلسازی از فرض وجود پیوستگی برای انجام محاسبات استفاده می شود و بطور کلی عکس عملهای شیمیایی بین اتمی میان فازهای تشکیل دهنده کامپوزیت را شامل نمی شوند. این روش به دو شاخه روشهای تحلیلی و روشهای محاسباتی تقسیم می شود.

۱-۲-۵ روشهای تحلیلی پیوسته

خواص کلی کامپوزیتها در این روش با استفاده از میانگین حجمی تانسورهای تنش و کرنش اجزاء تشکیل دهنده بدست می آیند. تنش و کرنش کلی در یک کامپوزیت با N فاز مجزا بصورت زیر بدست می آید :

$$\bar{\sigma} = \sum_{r=1}^N c_r \bar{\sigma}_r \quad (1-5)$$

$$\bar{\varepsilon} = \sum_{r=1}^N c_r \bar{\varepsilon}_r \quad (2-5)$$

که σ_r تانسور تنش و ε_r تانسور کرنش فاز r ، c_r کسر حجمی فاز r و علامت بار میانگین حجمی مقادیر می باشند. برای هر فاز، معادلات تشکیل دهنده به صورت زیر است.

$$\sigma_r = C_r \varepsilon_r \quad (3-5)$$

که در آن C_r تانسور سفتی فاز r است. رابطه بین تنش و کرنش بر حسب ترمهای میانگین حجمی میدانهای تنش و کرنش به صورت زیر است.

$$\bar{\sigma} = C \bar{\varepsilon} \quad (4-5)$$

و میانگین حجمی کرنش فاز r

$$\bar{\varepsilon}_r = A_r \bar{\varepsilon} \quad (5-5)$$

که در آن A_r تانسور متمرکز فاز r و

$$\sum_{r=1}^N c_r A_r = I \quad (6-5)$$

که I تانسور واحد است. ترکیب کردن معادلات فوق منجر به تعیین تانسور سفتی بر حسب تانسورهای تشکیل دهنده آن به صورت زیر خواهد شد:

$$C = C_1 + \sum_{r=2}^N c_r (C_r - C_1) A_r \quad (7-5)$$

در معادله فوق، چشم پوشی از عکس‌العمل‌های میان ذرات تقویت کننده منجر به تشکیل تانسور دیلوت^۱ به شکل مقابل خواهد شد:

$$A_r^{dil} = [I + S_r C_1^{-1} (C_r - C_1)]^{-1} \quad (8-5)$$

که S_r جزء متشکله تانسور اشلیبی است. تانسور اشلیبی می‌تواند به صورت تابعی از ابعاد ذرات تقویت کننده فاز تقویت کننده r و خواص ماتریس آن ارزیابی شود:

$$S_r = f(C_1, a_1^r, a_2^r, a_3^r) \quad (9-5)$$

اما برای تئوری موری - تاناکا، تانسور متمرکز به صورت زیر ارائه شده است:

$$A_s^{MT} = A_s^{dil} \left[c_1 I + \sum_{r=2}^N c_r A_r^{dil} \right]^{-1} \quad (10-5)$$

که A_r^{dil} در فرمول (8-5) داده شده است. فرم دیگری از تانسور متمرکز در شکل خود سازگار به شکل معادله زیر است:

$$A_r^{sc} = [I + S_r C^{-1} (C_r - C)]^{-1} \quad (11-5)$$

که در آن C مدول مجهول کامپوزیت است.

¹ Dilute

از مطالعات انجام شده به روش تحلیلی می توان به موارد زیر اشاره نمود. در تحقیقی که توسط توستنسون^۱ در سال ۲۰۰۳ [۶۳] با بکارگیری روش موری- تاناکا انجام گردید، نشان داده شد که خواص الاستیک کامپوزیت پلی استایرن - نانو تیوب کربنی چند دیواره، به قطر نانو تیوب حساس است . لاگوداس^۲ و همکارانش [۶۴] نیز خواص الاستیک کامپوزیت اپوکسی - نانو- تیوب کربنی را با بکارگیری روشهای تحلیلی متفاوت بررسی نمودند.

۵-۲-۲ روشهای محاسباتی پیوسته

این روش شامل تکنیکهای المان مرزی و اجزاء محدود می شود. با وجود اینکه این روشها همواره پاسخ دقیق را بدست نمی آورند؛ اما تقریب بسیار خوبی را برای طیف گسترده ای از فرضیات فراهم می کنند . در ذیل مختصراً به توضیح روشهای المان مرزی و اجزاء محدود می پردازیم .

الف) روش اجزاء محدود

روشهای اجزاء محدود می توانند به منظور محاسبه عددی ویژگیهای مکانیکی مواد پیوسته بر اساس هندسه، خواص مکانیکی و کسر حجمی اجزاء تشکیل دهنده آن بکار روند. روش اجزاء محدود شامل گسسته سازی المانی حجمی جایگزین به المانهایی است، که حل الاستیک آن منجر به تعیین نمودارهای تنش- کرنش می شود. درجه کوچک بودن گسسته سازی تعیین کننده دقت حل مسئله است.

المانهای حجمی جایگزین با هندسه های مختلف می توانند برای شبیه سازی خواص مکانیکی بکار روند. اما پیچیدگی بالای مدل، نرم افزارهای گران قیمت و زمان بر بودن شبیه سازی، استفاده از

¹ Thostenson

² Lagoudas

این روشها را محدود می سازد. روشهای اجزاء محدود پایه میکرومکانیکی بصورت گسترده ای تا کنون به منظور پیش بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیتها استفاده شده است.

برادشاو^۱ و همکارانش [۶۵] از اجزاء محدود جهت تخمین ماتریس تمرکز تنش در کامپوزیت متشکل از نانو تیوبهای کربنی موجدار استفاده نمودند. همچنین فیشر^۲ و همکارانش [۶۶] تاثیر موجدار بودن نانو تیوبهای کربنی روی خواص مکانیکی کامپوزیت را توسط همین روش بررسی نمودند. چن^۳ و همکارانش [۶۷] جهت درک وابستگی خواص مکانیکی به هندسه المانها، شکلهای مختلف المان حجمی جایگزین را مطالعه نمود.

ب) روش المان مرزی

روش المان مرزی یک روش بر پایه مکانیک محیطهای پیوسته است، که شامل حل معادلات انتگرال مرزی جهت ارزیابی میدانهای تنش و کرنش می شود. برخلاف روش اجزاء محدود که تمام المانهای حجم ماده را در حل مسئله دخیل می کند، این روش تنها از المانهای واقع بر روی مرز استفاده می کند؛ بنابراین روش المان مرزی از نظر محاسباتی نسبت به روش اجزاء محدود سبک تر است. روش المان مرزی را می توان در مدل سازیهای مقیاس کوچک و بزرگ استفاده کرد و در این روش با فرض وجود ساختارهای پیوسته، از جزئیات ساختارهای مولکولی و عکس العملهای بین اتمی صرفنظر می شود.

نشان داده شده است که مدل فیبر های صلب^۴، در تخمین خواص کامپوزیتهای فیبری بسیار کارآمد است. اینگبر^۵ و همکارانش [۶۸] نشان دادند در مورد کامپوزیتها، همخوانی بالایی بین نتایج

¹ Bradshaw

² Fisher

³ Chen

⁴ Rigid fiber

⁵ Ingber

بدست آمده از این روش و روشهای تحلیلی وجود دارد. لیو^۱ و همکارانش [۶۹] از یک روش چند قطبی برای مدلسازی نانوکامپوزیتهای کربنی استفاده کردند. آنها نانوتیوبهای کربنی را بعنوان فیبرهای صلب در نظر گرفتند. مدول پیش بینی شده توسط آنها بسیار نزدیک به مدول پیش بینی شده به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده شده در مرجع [۷۰] است. آنها به این نتیجه رسیدند که روش المان مرزی می تواند به عنوان تقریب مرتبه اول، جهت محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای کربنی در مقیاس بزرگ، بسیار مفید باشد.

۵-۳ روشهای مدلسازی مولکولی (شیمی محاسباتی)

در سالیان اخیر مدلسازی مولکولی به عنوان ابزار مهمی در پیش بینی خواص فیزیکی مواد از قبیل رفتار الاستیک، ساختار اتمی، فرکانسهای ارتعاشی، رسانایی الکتریکی و انرژی چسبندگی مطرح گشته است. در مدلسازی مولکولی فرض بر اینست که ساختار مواد تشکیل دهنده بصورت ناپیوسته است، که همین ویژگی سبب می شود که این روش به عنوان ابزار قدرتمندی برای مطالعه عکس العملهای بین اتمی در مقیاس نانو مطرح گردد.

با توجه به ماهیت گسسته این روشها، آنها به مقیاسهای زمانی و طولی که می توان در شبیه سازی بدست آورد، محدودند و بنابراین این روشها از نظر محاسباتی بسیار طاقت فرسا و پیچیده می باشند. سه تکنیک مدلسازی جهت پیش بینی خواص مکانیکی مواد نانو ساختاری که بصورت وسیعی مورد استفاده هستند؛ شامل روشهای دینامیک مولکولی^۲، مونت کارلو و اب اینیشیو می شوند.

¹ Liu

² Molecular Dynamic (MD)

۵-۳-۱ دینامیک مولکولی

این روش پرکاربردترین تکنیک جهت شبیه سازی مواد با ساختارهای نانو می باشد. دینامیک مولکولی امکان پیش بینی عکس العملها بین اجزاء تشکیل دهنده را در مقیاس نانو فراهم می کند. این روش شامل تعیین تحول زمانی مجموعه ای از اتمهای دربرگیرنده می شود، که بدنبال انتگرال گیری از معادلات حرکت بدست می آید. معادلات حرکت بر اساس قانون دوم نیوتن می باشند :

$$F_i = m_i a_i \quad (۱۲-۵)$$

که در آن F_i نیروی اعمالی به اتم i و m_i و a_i به ترتیب جرم و شتاب اتم i در یک سیستم N اتمی هستند. دینامیک مولکولی در واقع یک روش استاتیکی- مکانیکی است که در آن مجموعه ای از پیکربندی ها بر اساس توابع توزیع استاتیکی، پخش شده است.

خط سیر حرکت اتمها تحت تأثیر نیروهای بر همکنش بین اتمی محاسبه می شوند. محاسبه خط سیر اتمها در یک فضای فازی با ابعاد $6 \times N$ انجام می شود، که سه بعد آن مربوط به موقعیت مکانی و سه بعد دیگر اجزاء ممتنم هر اتم هستند. محاسبه مقادیر فیزیکی در روش دینامیک مولکولی با میانگین گیری حسابی از مقادیر لحظه ای انرژی در هر گام شبیه سازی صورت می پذیرد. در مسائل مورد حل بوسیله دینامیک مولکولی، پس از گذشت مدت زمان طولانی، مسئله تا حد زیادی ساده می شود؛ اما در عمل زمان شبیه سازی دارای محدودیتهایی است. لیکن مقادیر فیزیکی پس از رسیدن سیستم مولکولی به تعادل ترمودینامیکی، ساده می گردند.

در این روش عکس العملها میان اتمها با انواع مختلف، توسط یک پتانسیل اتمی تشریح می شود. انرژی پتانسیل کلی سیستم می تواند بصورت تابع موقعیت اتمها در هر زمان بدست آید :

$$V = V(r_1, \dots, r_N) \quad (۱۳-۵)$$

که r_i موقعیت اتم i در سیستم N اتمی برای یک گام مشخص شبیه سازی است.

موقعیت اتمها نسبت به یکدیگر بیان می شود تا پتانسیل اتمی با جابجایی محور مختصات بدون تغییر باقی بماند. نیروی اعمال شده بر روی اتم i از گرادیان پتانسیل V نسبت به جابجایی اتمی r_i بصورت زیر تعیین می شود:

$$F_i = -\nabla V(r_1, \dots, r_N) \quad (14-5)$$

انرژی کل سیستم به صورت زیر است :

$$E = K + V \quad (15-5)$$

که K انرژی جنبشی و V انرژی پتانسیل سیستم است.






پتانسیل تشریح کننده عکس عملهای اتمی در یک ماده آلی در شکلهای مختلفی ارائه شده است. پتانسیل برنر¹ بر پایه این اصل استوار است که نیروی پیوند بین دو اتم مقداری ثابت نمی باشد و وابسته به شرایط محلی می باشد. این پتانسیل به صورت زیر تعریف می شود :

$$V = \sum_i \sum_{j(>i)} [V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij})] \quad (16-5)$$

که در آن، سری بر روی پیوندهای سیستم اعمال می شود و r_{ij} فاصله میان اتمهای i و j ، $V_A(r_{ij})$ و $V_R(r_{ij})$ به ترتیب نیروهای جاذبه و دافعه، B_{ij} پتانسیل چندعضوی بین اتمهای i ، j هستند.

میدانهای نیرویی روش ساده و موثری را برای توضیح پتانسیل اتمی در مسائل با انواع مختلف اتمها فراهم می کنند. میدان نیرویی را می توان مطابق شکل (5-3) به صورت مجموع سهم انرژی هر یک از درجات آزادی یک سیستم N اتمی تشریح کرد.

¹ Brenner

Bond stretching	
Bond Angle Bending	
Bond Torsion	
Improper Bond Torsion	
Non-Bonded Interactions	

شکل (۳-۵) درجات آزادی یک میدان نیرو [۶۲]

عکس عملهای ناپیوندی^۱ که در شکل (۳-۵) نشان داده شده‌اند، معرف پیوندهای وان در والس، هیدروژنی و الکترواستاتیک می‌شوند. معادلات میدان نیرو که توسط کرنل^۲ و همکارانش [۷۱] توسعه یافت، برای یک سیستم مولکولی آلی به شکل زیر می‌باشد:

$$V = \sum_{bonds} K_r (r - r_{eq})^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_{eq})^2 \quad (۱۷-۵)$$

$$+ \sum_{dihedrals} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] + \sum_{I < J} \left[\frac{A_{IJ}}{r_{IJ}^{12}} - \frac{B_{IJ}}{r_{IJ}^6} \right]$$

که در آن K_r ثابت نیروی کششی پیوند، r فاصله میان اتمها، r_{eq} فاصله تعادل میان اتمها، K_θ ثابت نیروی خمش زاویه‌ای، θ زاویه پیوند، θ_{eq} زاویه تعادل پیوند، V_n ثابت نیروی پیچش، γ آفست فاز، n تناوب پیچش، A_{IJ}, B_{IJ} ثابتهای نیروی وان در والس میان اتمهای I و J ، r_{IJ} فاصله بین اتمهای I و J است. ترم مربوط به نیروهای وان در والس در فرمول (۱۷-۵) از نوع پتانسیل لnard-Jones^۳ می‌باشد.

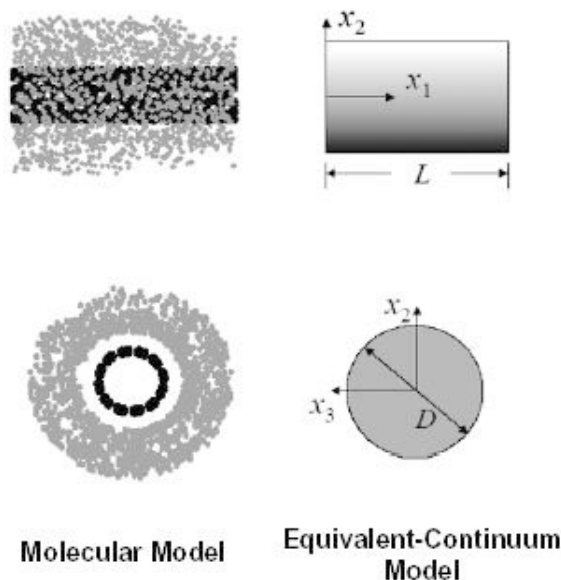
¹ Non-bonded

² Cornel

³ Lennard-Jones

در روش پیوسته معادل^۱ جهت تعیین خواص مکانیکی بالک مواد از مدل مولکولی استفاده می شود. این روش نوعی متدولوژی جهت ارتباط شیمی محاسباتی و مکانیک جامدات است.

شکل (۴-۵) یک مدل مولکولی از یک نانوکامپوزیت پایه پلیمری و مدل معادل پیوسته آن را نشان می دهد [۱۳]. انرژی های تغییر شکل مولکولی و مدل پیوسته معادل برای شرایط یکسان بارگذاری بدست آمده و خواص مکانیکی نامعین مدل پیوسته معادل، با استفاده از یکسان قرار دادن انرژی های تغییر شکل دو مدل حاصل شده است. سپس خواص مقیاس بزرگ ماده با بکارگیری المان حجمی پیوسته معادل تعیین شده است.



شکل (۴-۵) مدل پیوسته معادل برای یک نانوکامپوزیت [۱۳]

فرانکلند^۲ و همکارانش [۷۲] از روش دینامیک مولکولی به منظور پیش بینی منحنی تنش- کرنش کامپوزیت پلی اتیلن - نانوتیوب کربنی استفاده کرده و نتایج آنرا با مدل میکرومکانیکی مقایسه نمودند.

^۱ Equivalent Continuum Method

^۲ Frankland

دینامیک مولکولی جهت شبیه سازی خواص مکانیکی دیگر نانوکامپوزیتها نیز استفاده شده است. وی^۱ و همکارانش نشان دادند که افزودن نانو تیوب کربنی به پلی اتیلن منجر به افزایش انبساط طولی و دمای گذار شیشه می گردد [۷۳]. همچنین لیانگ^۲ و همکارانش وجود نیروی جاذبه بین نانوتیوبهای تک دیواره و ماتریس پلیمری را نشان دادند [۷۴].

۵-۳-۲ روش مونت کارلو

در این روش، کلاسی از مدل‌های ریاضیات احتمالی جهت پیش بینی خروجی و رفتار سیستم بکار می رود. خروجی های این روش ذاتا استاتیکی و موضوع علم احتمالند. در اکثر موارد این روشها شامل انتگرال گیری چند بعدی بر روی فضای نمونه می شود. تکنیکهای مختلفی از این روش را می توان جهت تعیین خواص مواد بکار برد. از جمله روشهای مونت کارلو، مونت کارلوی کلاسیک، کوانتومی، حجمی، جنبشی می باشند.

مونت کارلوی کلاسیک شامل کشیدن نمونه هایی از توزیع احتمالی می شود و اغلب از توزیع بولتزمن^۳ کلاسیک، جهت بدست آوردن خواص ترمودینامیکی و مینیمم انرژی ساختار استفاده می کند. مونت کارلوی کوانتومی از گامهای تصادفی جهت محاسبه انرژی مکانیکی کوانتومی و از توابع موج جهت حل مسائل الکترونیک ساختاری استفاده می کند که غالبا معادلات شرودینگر^۴ را به عنوان نقطه شروع بکار می برد.

مونت کارلوی حجمی اعدادی تصادفی را جهت تعیین حجم به ازاء اتم یا انجام آنالیز هندسی تولید می کند. مونت کارلوی جنبشی نیز با استفاده از مباحث مقیاس، فرایند را شبیه سازی می کند، تا مقیاسهای زمانی را بدست آورد.

¹ Wei

² Liang

³ Boltzmann

⁴ Schrodinger

فورد^۱ [۷۵] از روشهای مونت کارلو جهت مطالعه رفتار مکانیکی و فازی ساختارهای کوارتز، زئولیت و غیره استفاده کرد. مدول بالک بدست آمده در این مدل از همخوانی خوبی نسبت به مقادیر تجربی برخوردار است. آنها نتیجه گرفتند که این مدل می تواند جهت تعیین خواص نانو ساختارهای سیلیکونی به کار رود. همچنین چوی^۲ و همکارانش از روش پایه مونت کارلو جهت مطالعه تغییر شکل، نرخ تغییر شکل و وابستگی دمایی به تغییر شکلهای بزرگ استفاده کردند [۷۶].

۳-۳-۵ روش اب اینیشیو

برخلاف اکثر روشهای شبیه سازی مواد که بر پایه پتانسیلهای کلاسیک می باشند، مزایای مهم این روش که بر اساس اصل اول تئوری چگالی تابعی می باشد، جامعیت، قابل اعتماد بودن و دقت بالا می باشد.

این روش شامل حل معادلات شرودینگر برای هر الکترون در میدان پتانسیل خودپایداری است که توسط هسته و الکترونهای دیگر تولید می شود. این روش را می توان بر روی گستره وسیعی از سیستمها به کار برد، اما این تکنیکها از نظر محاسباتی طاقت فرسا بوده و استفاده از آنها در شبیه سازیهایی که تعداد زیادی از اتمها را شامل می شود، مشکل می باشد.

در شبیه سازی به روش اب اینیشیو سه فرآیند وجود دارد که بیشتر مورد استفاده هستند. این فرایندها، محاسبات نقطه منفرد، بهینه سازی هندسه و محاسبات فرکانسی می باشند. محاسبات نقطه منفرد شامل تعیین انرژی و توابع موجی برای هندسه مورد نظر است. این پروسه بیشتر در مراحل اولیه شبیه سازیهای با جزئیات بیشتر به کار می رود.

محاسبات هندسی به منظور تعیین توابع انرژی و موج در هندسه اولیه و مراحل دیگر با سطح انرژی پائین تر بکار می روند. فرایندهای بسیاری جهت پایداری هندسه در هر مرحله شبیه سازی

¹ Ford

² Chui

وجود دارد. محاسبات فرکانسی جهت تعیین شدت پدیده های رامان^۱ و اینفرارد^۲ برای سیستم مولکولی بکار می روند. شبیه سازی های اب اینیشیو محدود به تعداد اندکی از اتمها هستند و این بدلیل نیاز به محاسبات سنگین در این روش است.

این روش بصورت محدودی برای محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پایه پلیمر استفاده شده است. به عنوان مثال، در پژوهشی میل واگانام^۳ و همکارانش ثابت کردند که نانوتیوبهای با قطر کمتر، از انرژی پیوندی بالاتری در ماتریس پلیمری برخوردارند [۷۷].

۴-۵ مروری بر مطالعات انجام شده به روش اجزاء محدود

همانطور که ملاحظه گردید روشهای متفاوتی بر پایه شیمی محاسباتی و مکانیک محاسباتی جهت پیش بینی خواص مکانیکی نانو کامپوزیتهای وجود دارد که با توجه به نیازهای مختلف، شرایط و امکانات موجود می توان یکی از آنها را جهت فرایند مدلسازی انتخاب کرد.

حال در این قسمت با توجه به انتخاب روش اجزاء محدود در این پایان نامه برای شبیه سازی ساختار و بدست آوردن خواص مکانیکی نانو کامپوزیتهای پایه پلیمری، به تشریح روشها و تئوری های ارائه شده توسط محققین مختلف می پردازیم، تا ضمن آشنایی بیشتر با تکنیکهای مدلسازی، روشهای مورد استفاده در این پژوهشها را، با روش بکار رفته در این پایان نامه مقایسه نموده و همچنین از نتایج این تحقیقات استفاده نماییم. از تحقیقات انجام شده به این روش می توان به موارد ذیل اشاره نمود.

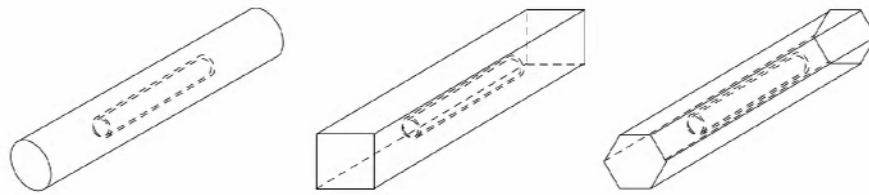
لیو و چن [۲۰] خواص مکانیکی مؤثر یک نانوکامپوزیت حاوی نانو تیوب های کربنی، مدل شده به صورت یک المان حجمی جایگزین سه بعدی را بر اساس مکانیک محیط های پیوسته و روش اجزاء

¹ Raman

² Infrared

³ Mylvaganam

محدود بررسی نمودند. از سه نوع المان حجمی جایگزین به شکلهای استوانه، مکعب مستطیل و شش وجهی مطابق شکل (۵-۵) می توان برای مدلسازی نانوکامپوزیت استفاده کرد، که آنها در این تحقیق از نوع المان استوانه جهت ارزیابی مدول یانگ E و ضریب پواسون ν نانوکامپوزیت استفاده کردند.

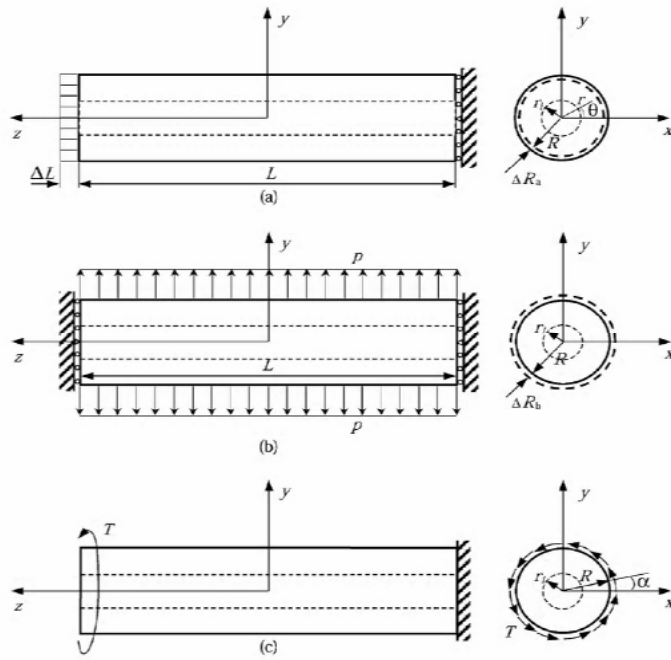


شکل (۵-۵) سه نوع المان حجمی جایگزین مورد استفاده در آنالیز نانو کامپوزیتهای حاوی نانو تیوب های کربنی

[۲۰]

ماتریس و نانوتیوب هر دو به عنوان محیط های پیوسته از مواد الاستیک خطی، ایزوتروپیک و همگن در نظر گرفته شدند که خواص مکانیکی آنها مشخص است. همچنین پیوندی کامل^۱ در فصل مشترک نانوتیوب و ماتریس فرض شده است. تحت شرایط فوق چهار ثابت مکانیکی مجهول وجود دارد $(E_x (= E_y), E_z, \nu_{xy}, \nu_{zx} (= \nu_{zy}))$ که جهت بدست آوردن آنها احتیاج به چهار معادله مستقل می باشد و این معادلات از تئوری الاستیسیته بدست می آیند. هندسه المان حجمی جایگزین به شکل استوانه ای توخالی به طول L ، شعاع داخلی r_i و شعاع خارجی R می باشد (شکل ۵-۶).

¹ Perfect bonding



شکل (۵-۶) سه نوع بار گذاری بر روی المان حجمی استوانه ای جهت برآورد خواص مکانیکی موثر نانو کامپوزیت
(a) تحت کشش طولی به مقدار ΔL (b) تحت بار جانبی یکنواخت P (c) تحت بار پیچشی T [۲۰]

با فرض ماده ای ایزوتروپیک متقاطع^۱ رابطه تنش- کرنش سه بعدی مدل الاستیسیته به شکل زیر

می باشد :

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} \\ -\frac{\nu_{zx}}{E_z} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} & \frac{1}{E_z} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{Bmatrix} \quad (۵-۱۸)$$

از سه نوع بارگذاری مطابق شکل (۵-۶) جهت یافتن مجهولات استفاده شده است و ثابت‌های مکانیکی دیگر با توجه به فرض نوع ماده از این چهار مجهول بدست می آیند.

در بارگذاری اول المان حجمی تحت بار کششی محوری قرار می گیرد (شکل ۵-۶-۱) که در آن مولفه های تنش و کرنش در هر نقطه بر روی سطح خارجی جسم به صورت زیر می باشند :

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma_r = \sigma_\theta = 0, \quad \varepsilon_z = \frac{\Delta L}{L}, \quad \varepsilon_\theta = \frac{\Delta R_a}{\Delta R}$$

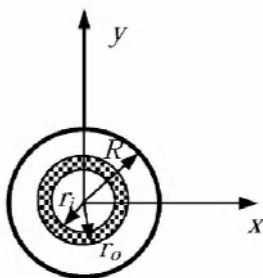
¹ Transverse isotropic

که در آن ΔR_a تغییر طول شعاعی، r و θ به ترتیب مولفه های شعاعی و مماسی در سیستم مختصات قطبی هستند.

با استفاده از معادلات بالا و همچنین بکارگیری مقادیری مانند تنش میانگین از نتایج مدل اجزاء محدود می توان مدول یانگ در راستای اعمال بار E_z و ضریب پواسون در صفحه zx (ν_{zx}) را بدست آورد.

در حالت بارگذاری دوم المان حجمی تحت بار شعاع یکنواخت p (شکل ۵-۶-ب) و در حالت سوم تحت بار پیچشی T شکل (شکل ۵-۶-ج) قرار می گیرد و به روشی مشابه و استفاده از معادلات تئوری الاستیسیته روابطی برای ν_{xy} و E_x بدست می آید. در نتیجه از مجموع این بارگذاری ها و استفاده از نتایج روش اجزاء محدود، ثابتهای مجهول بدست خواهند آمد.

جهت مقایسه نتایج بدست آمده از روش فوق از روش قانون مخلوطها که قانونی بر اساس تئوری مقاومت مصالح می باشد، استفاده شده است. هرچند این قانون روش دقیقی در محاسبه تنش ها بویژه تنشهای سطحی نمی باشد، اما تقریب مؤثر و خوبی جهت محاسبه مقادیر تنش در جهت طولی المان بدست می دهد. در این روش با فرض اینکه ماتریس و نانو تیوب کربنی بصورت مستقل از یکدیگر دچار تغییر شکل می شوند، برای هندسه استوانه ای مورد استفاده مطابق شکل (۵-۷) مدول یانگ نانو کامپوزیت E_z به صورت زیر بدست می آید :



شکل (۷-۵) هندسه استوانه ای جهت محاسبات روش قانون مخلوطها [۲۰]

$$E_z = E^t V^t + E^m (1 - V^t) \quad (19-5)$$

که در آن E^m و E^t به ترتیب مدول یانگ نانو تیوب و ماتریس و V^t کسر حجمی نانو تیوب در المان می باشد که در این مورد به صورت زیر خواهد بود :

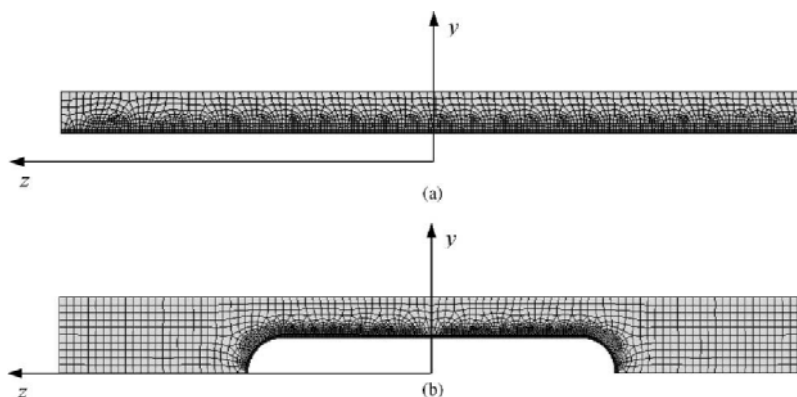
$$V^t = \frac{\pi(r_o^2 - r_i^2)}{\pi(R^2 - r_i^2)} \quad (20-5)$$

برای المان حجمی جایگزین که در آن نانوتیوب و ماتریس غیر هم طول هستند فرمول (20-5) به صورت زیر در خواهد آمد :

$$E_z = \left[\frac{1}{E_m} \left(\frac{L_e}{L} \right) + \frac{1}{E_c} \left(\frac{L_c}{L} \right) \left(\frac{A}{A_c} \right) \right]^{-1} \quad (21-5)$$

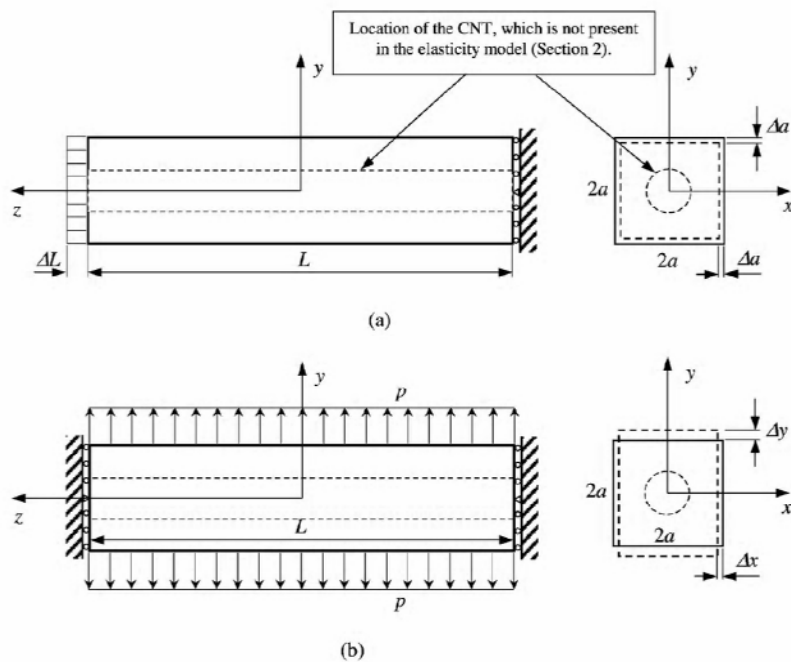
که در آن L_c طول نانو تیوب در المان، E_c مدول یانگ قسمت میانی المان و $L_e = L - L_c$ و $A = \pi R^2$ ، $A_c = \pi(R^2 - r_i^2)$ می باشند.

در همه موارد ذکر شده، از روش اجزاء محدود متقارن، با توجه به هندسه و نوع بارگذاری استفاده شده است و جهت مدلسازی نانوتیوب تک دیواره نیز از یک لایه المان در حالت نانوتیوب هم طول با ماتریس و دو لایه المان در حالت نانوتیوب غیر هم طول با ماتریس استفاده شده است (شکل ۸-۵). نتایج حاکی از آن است با افزایش نانو تیوب کربنی به مقدار ۵ درصد حجمی به المان، سفتی کامپوزیت در جهت طولی تا نزدیک ۱۰ برابر افزایش می یابد.



شکل (۸-۵) مدل‌های اجزاء محدود متقارن برای المان حجمی جایگزین (a) نانو تیوب هم طول با المان حجمی (یک لایه المان برای شبیه سازی نانو تیوب کربنی) (b) نانو تیوب غیر هم طول با المان حجمی (دو لایه المان برای شبیه سازی نانو تیوب کربنی) [۲۰]

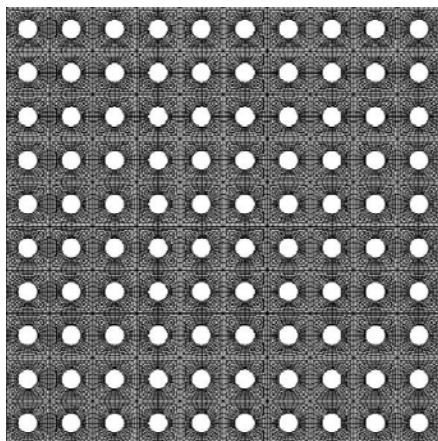
این دو محقق در پژوهشی دیگر [۲۱] از روشی مشابه جهت تعیین خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای حاوی نانو تیوب کربنی استفاده کردند. با این تفاوت که المان حجمی جایگزین بکار رفته بصورت مکعب مستطیل^۱ بوده و معادلات لازم جهت تعیین خواص مکانیکی ماده با اعمال دو نوع بارگذاری یکی به صورت کششی و دیگر به صورت جانبی مطابق شکل (۹-۵) بدست می آیند.



شکل (۹-۵) دو نوع بارگذاری بر روی المان حجمی جهت برآورد خواص مکانیکی موثر نانو کامپوزیت (a) تحت کشش طولی به مقدار ΔL (b) تحت بار جانبی یکنواخت P [۲۱]

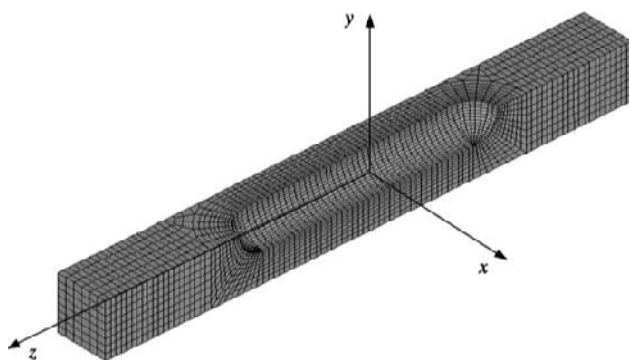
همچنین جهت تعیین مدول یانگ و ضریب پواسون در صفحه عرضی برای المان حجمی جایگزین با چندین نانو تیوب کربنی درون آن مطابق شکل (۱۰-۵)، از روش اجزاء محدود دو بعدی و بارگذاری کرنش صفحه ای استفاده شده است

¹ Square



شکل (۵-۱۰) مدل اجزاء محدود دو بعدی در حال بارگذاری کرنش صفحه ای [۲۱]

نمونه ای از مش سه بعدی بکار رفته در حالت المان حجمی جایگزین ناپیوسته نیز در شکل (۵-۱۱) مشخص است.



شکل (۵-۱۱) مش سه بعدی متقارن برای المان مکعب مستطیلی شامل نانو تیوبهای کوتاه [۲۱]

هو^۱ و همکارانش [۷۸] خواص الاستیک ماکروسکوپی کامپوزیتهای تقویت شده بوسیله نانوتیوبهای کربنی را توسط آنالیز تغییر شکل یک المان حجمی جایگزین تحت بارگذاریهای مختلف بدست آوردند. آنها فرض کردند المان حجمی جایگزین از سه جزء زیر تشکیل شده است :

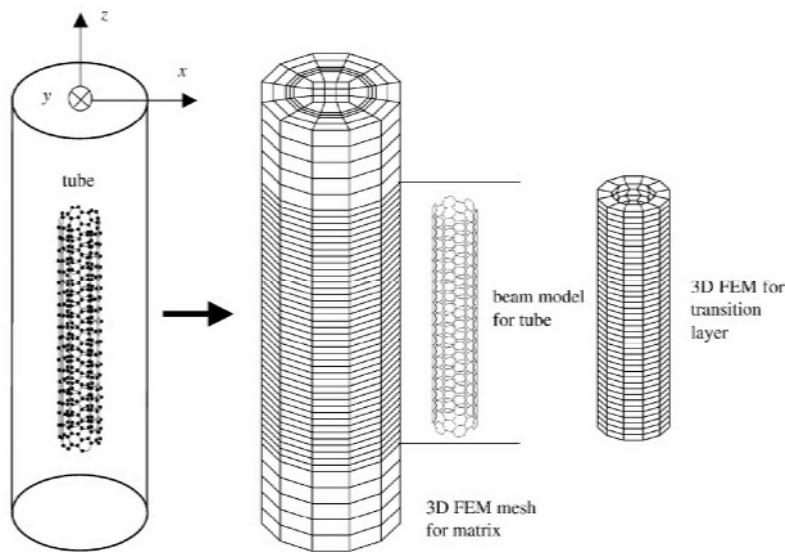
۱. نانوتیوب کربنی؛

۲. لایه حائل (فصل مشترک) میان ماتریس و نانوتیوب^۲؛

^۱ Hu

^۲ Transition Layer

۳. ماتریس پلیمری (شکل ۵-۱۲)



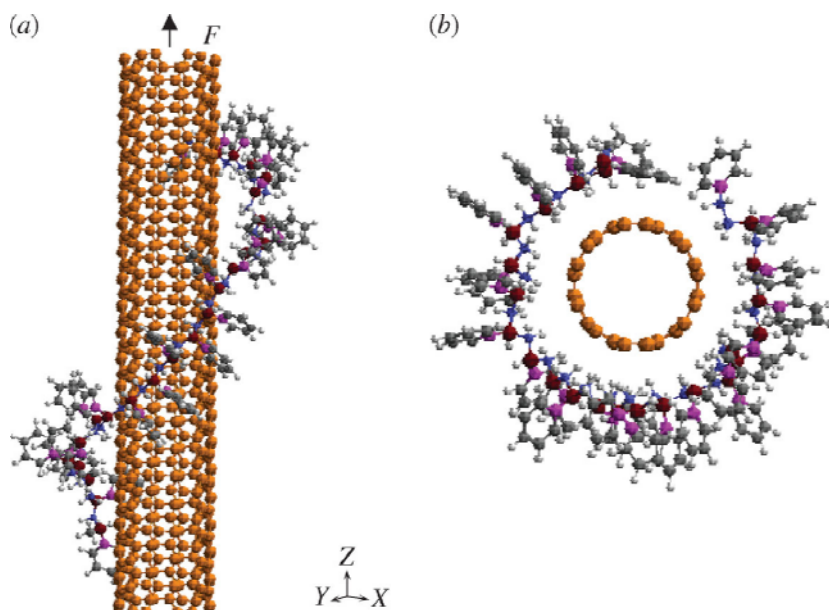
شکل (۵-۱۲) المان حجمی جایگزین مربوط به نانو کامپوزیت حاوی نانو تیوب کربنی [۷۸]

جهت مدل‌سازی نانوتیوب کربنی از یک ساختار تیر سه بعدی بر اساس تئوری دوم میدانهای نیروی مولکولی مربوط به مکانیک ساختاری و مکانیک محاسباتی استفاده شده است و جهت برقراری ارتباط بین ثابتهای نیرو و خواص مکانیکی المان تیر معادل، ثابتهای نیروی بدست آمده برای صفحه گرافیت بکار گرفته شده است. تابع پتانسیل مربوط به ساختار نانوتیوب توسط رابطه زیر بدست می‌آید:

$$E_{pot} = \sum_{bonds} V_s + \sum_{angles} V_a + \sum_{dihedrals} V_t + \sum_{atoms} V_v + \sum_{atoms} V_e \quad (۲۲-۵)$$

که V_s پتانسیل کششی پیوندها، V_a پتانسیل خمشی پیوندها، V_t پتانسیل پیچشی پیوندها مربوط به پیچش خارج از صفحه، V_v پتانسیل وان در والس اتمها و V_e پتانسیل الکترواستاتیک می‌باشند.

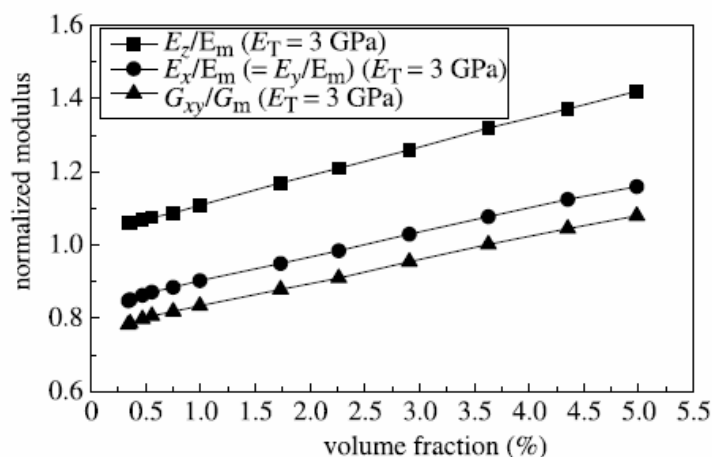
جهت مدل‌سازی و دستیابی به خواص لایه حائل، مانند ضخامت آن، فاصله تعادل میان زنجیره پلیمری و نانو تیوب کربنی و خواص مکانیکی این لایه از دینامیک مولکولی استفاده شده است. بعد از قرار دادن زنجیره پلیمری در جوار نانوتیوب، زنجیره پلیمری بصورت اتوماتیک بعد از چند مرحله، به صورت منظم و ساختاریافته و پایدار شروع به محاصره نانوتیوب می‌کند (شکل ۵-۱۳).



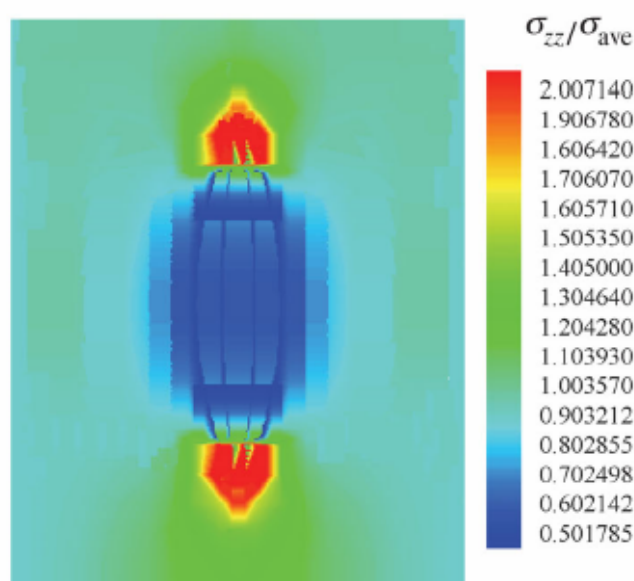
شکل (۵-۱۳) مدل مکانیک مولکولی نانو تیوب و زنجیره پلیمری (a) نمای جانبی (b) نمای فوقانی [۷۸]

فاصله تعادل بین اتمهای کربن در پلیمر (که در این تحقیق پلی استایرن می باشد) و اتمهای کربن در نانوتیوب بین 0.2851 نانو متر و 0.5445 نانو متر متغیر است، که نهایتاً از مقدار متوسط 0.415 نانو متر استفاده شده است.

همچنین از المان brick شامل ۸ گره، جهت مدلسازی لایه حائل و ماتریس در مدل اجزاء محدود استفاده شده است. مدول یانگ و ضریب پوآسون لایه حائل همانند ماتریس به ترتیب 3 GPa و 0.33 انتخاب شده اند. مدل یانگ نرمالایز شده توسط مدول یانگ پلیمر، بر حسب کسر حجمی نانوتیوب در شکل (۵-۱۴) و همچنین توزیع تنش نرمالایز شده روی سطح ماتریس و فصل مشترک σ_{zz} در شکل (۵-۱۵) نمایش داده شده است، که نشانگر افزایش قابل توجه مدول یانگ نانوکامپوزیت (E_z) می باشد.



شکل (۵-۱۴) مدولهای یانگ و مدول برشی نرمالایز شده نانو کامپوزیت [۷۸]



شکل (۵-۱۵) توزیع تنش نرمالایز شده روی سطح ماتریس و فصل مشترک σ_{zz} [۷۸]

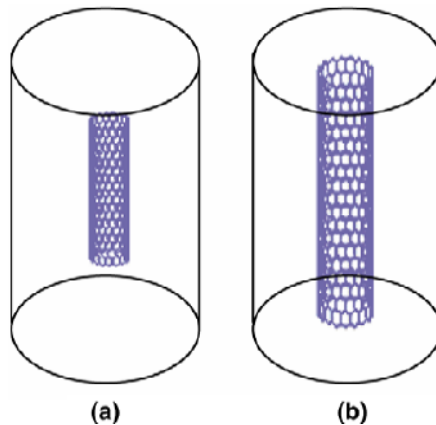
لی^۱ و چو^۲ در سال ۲۰۰۶ [۷۹] رفتار نانوکامپوزیتهای پایه پلیمری را تحت بار گذاری فشاری به روش چند مقیاسه بررسی نمودند. نانوتیوب در مقیاس اتمی و به روش مکانیک مولکولی ساختاری مدل گردیده و تغییر شکل در ماتریس بوسیله روش اجزاء محدود پیوسته و در مقیاس میکروسکوپی

¹ Li

² Chou

تحلیل شده است. همچنین فرض شده است که نانوتیوب و ماتریس پلیمری در فصل مشترک خود، توسط پیوندهای وان در والس به یکدیگر متصل شده اند.

در این پژوهش نانوتیوبهای کربنی تک دیواره به عنوان تقویت کننده ماتریس به کار گرفته شده اند. نانوتیوبها به دو شکل، یکی پیوسته (نانوتیوب هم طول با ماتریس) و دیگری ناپیوسته (نانوتیوب غیر هم طول با ماتریس) انتخاب شده اند (شکل ۵-۱۶).

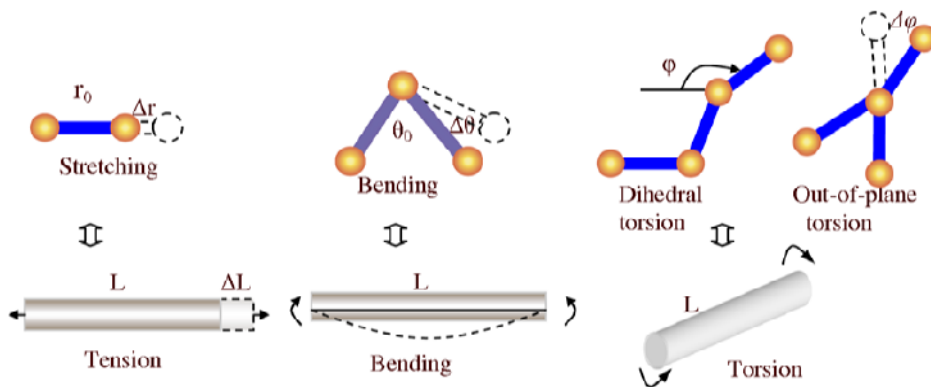


شکل (۵-۱۶) مدل محاسباتی کامپوزیت پلیمر-نانو تیوب کربنی

(a) المان حجمی ناپیوسته (b) المان حجمی پیوسته [۷۹]

نانوتیوبهای کربنی تک دیواره بصورت یک ساختار فضایی در نظر گرفته شده اند. بطوریکه پیوندهای کووالانسی بین اتمهای کربن به صورت مدل تیر و اتمهای کربن به عنوان مفاصل انتهایی این تیرها فرض شده اند.

بر اساس تعادل انرژی میان انرژی پتانسیل موضعی در شیمی محاسباتی و انرژی کرنش المان در مکانیک ساختاری، ثابتهای مکانیکی از قبیل استحکام کشش، استحکام پیچشی و غیره برای یک تیر معادل بصورت زیر بدست آمده است (شکل ۵-۱۷).

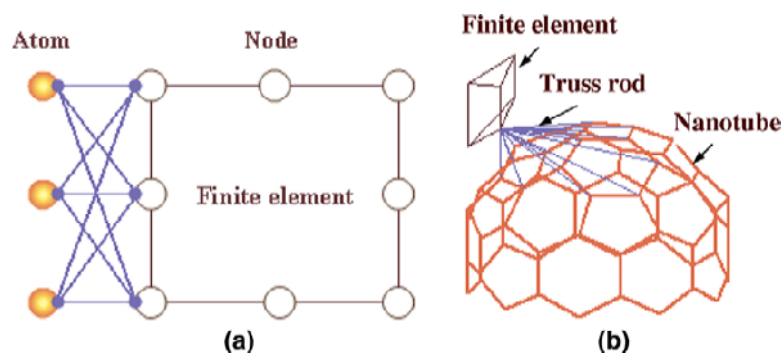


شکل (۱۷-۵) مدل‌سازی نانو تیوب به روش مکانیک ساختاری مولکولی [۷۹]

$$\frac{EA}{L} = K_r, \quad \frac{EI}{L} = K_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = K_\tau \quad (۲۳-۵)$$

که در اینجا K_r ، K_θ و K_τ ثابتهای میدان نیرو در مکانیک مولکولی هستند.

جهت مدل‌سازی پلیمر (ماتریس) در روش اجزاء محدود از دو نوع المان جهت مش بندی استفاده شده است. المان مکعب ۲۰ گرهی، برای سطح جانبی نانوتیوب، المان مثلثی شکل ۱۵ گرهی، برای سطح فوقانی و تحتانی نانوتیوب. جهت مدل‌سازی نیروهای وان در والس در سطح فصل مشترک نانوتیوب و پلیمر از مدل خرپا استفاده شده است (شکل ۱۸-۵).



شکل (۱۸-۵) تصویر المانهای خرپای اتصال دهنده اتمهای کربن و گره های اجزاء محدود

(a) روی سطح جانبی نانو تیوب (b) روی سطوح کلاهک مانند انتهای نانو تیوب [۷۹]

بر اساس پتانسیل لنارد جونز^۱ [79]، نیروی وان در والس میان اتمهای فوق بصورت زیر تعریف شده است:

$$F(r) = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (۲۴-۵)$$

که در آن r فاصله بر هم کنش اتمها و σ و ε ثابتهای رابطه لنارد جونز می باشند. فعال بودن میله های (المانها) خرپا با توجه به فاصله میان اتم کربن در نانوتیوب و گره مربوطه در مدل اجزاء محدود تعیین می شود. به صورتی که اگر این فاصله کمتر از 2.5σ باشد، المانهای خرپا^۲ فعال و در غیر اینصورت غیر فعال خواهند بود.

مرکز اتمهای کربن در نانوتیوب تک دیواره، در سطح مقطع میانی دیواره نانوتیوب که ضخامت آن 0.34 نانو متر است در نظر گرفته شده است.

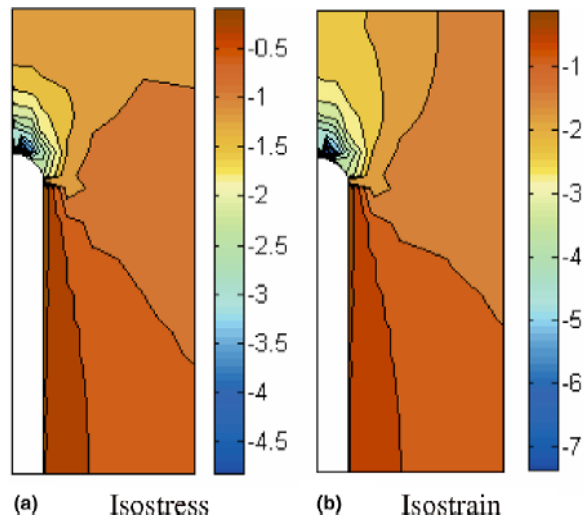
بار کمانشی ساختار نیز توسط آنالیز مقادیر ویژه و با در نظر گرفتن هندسه غیرخطی برای ساختار محاسبه شده است و توزیع تنش نیز در المانهای حجمی شامل نانوتیوبهای ناپیوسته نیز توسط دو نوع بارگذاری ایزو استرس^۳ و ایزو استرین^۴ به ترتیب با اعمال تنش یکنواخت و جابجایی یکنواخت بر روی المانهای سطح فوقانی ماتریس بدست آمده است (شکل ۵-۱۹).

¹ Leonard-Jones

² Truss Rod

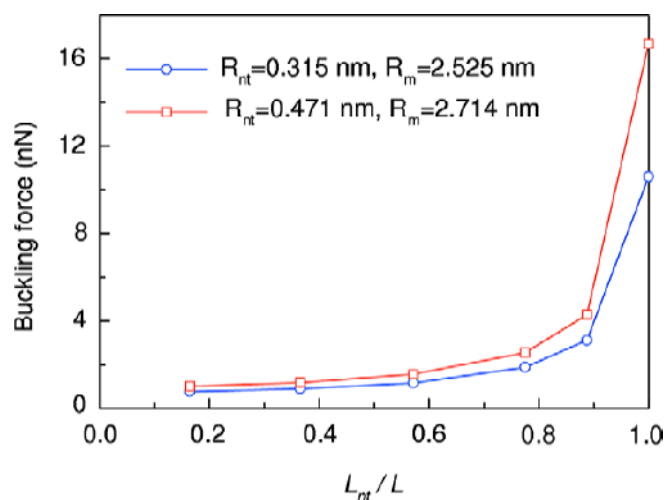
³ Iso stress

⁴ Iso strain



شکل (۵-۱۹) توزیع تنش محوری نرمالایز شده در ماتریس پلیمری [۷۹]

رفتار کمانشی نانوکامپوزیت نیز برای دو نوع المان حجمی پیوسته و ناپیوسته برای نسبت‌های طول به قطر متفاوت نانوتیوب بررسی شده است (شکل ۵-۲۰). همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، بار کمانشی به کسر حجمی نانوتیوب وابسته است و با افزایش طول نانوتیوب بیشتر می‌شود. افزایش ناگهانی در وضعیتی که نانوتیوب هم طول با ماتریس مشهود است که علت آن می‌تواند حذف تمرکز تنش در دو انتهای نانوتیوب و بهبود قابلیت تحمل بار باشد.



شکل (۵-۲۰) منحنی بارکمانشی کامپوزیت تقویت شده با نانو تیوبهای کربنی (R_m و R_{nt}) به ترتیب معرف قطرهای نانو تیوب و ماتریس، و L طول سیلندر ماتریس می‌باشند [۷۹]

همچنین مدلسازی چند مقایسه رفتار کشسانی نانوکامپوزیتهای کربنی در مرجع [۲۴] انجام شده است. در اکثر مواردی که روشهای پیوسته جهت آنالیز نانوتیوبهای کربنی حائل در یک ماده الاستیک بکار رفته، رفتار نانوتیوب بصورت خطی فرض شده است.

رفتار کششی نانوتیوبهای کربنی زیگزاگ و آرمچیر با بکارگیری مدل شکست پیشرفته^۱ توسعه یافته است. از روش اجزاء محدود جهت آنالیز ساختار نانوتیوب و از پتانسیل مورس اصلاح شده جهت تفسیر رفتار غیرخطی پیوند کربن-کربن در آن استفاده شده است. مطابق روش پتانسیل مورس اصلاح شده، انرژی پتانسیل سیستم نانوتیوب بصورت زیر می باشد :

$$E = E_{stretch} + E_{angle} , \quad \text{فرمول (۲۵-۵)}$$

$$E_{stretch} = D_e \left\{ \left[1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right]^2 - 1 \right\}, \quad \text{(۲۶-۵)}$$

$$E_{angle} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 \left[1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4 \right] \quad \text{(۲۷-۵)}$$

که در آن $E_{stretch}$ انرژی پیوند ناشی از کشش آن و E_{angle} انرژی پیوند ناشی از خمش زاویه ای r ، طول کنونی پیوند و θ زاویه میان پیوندهای مجاور می باشد و پارامترهای پتانسیل به صورت زیر می باشند :

$$r_0 = 1.421 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad D_e = 6.03105 \times 10^{-19} \text{ N m}$$

$$\beta = 2.625 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}, \quad \theta_0 = 2.094 \text{ rad},$$

$$k_{\theta} = 0.9 \times 10^{-18} \text{ N m/rad}^2, \quad k_{sextic} = 0.754 \text{ rad}^{-4}$$

و با مشتق گیری از فرمول (۲۵-۵)، نیروی کشش پیوند اتمی در میدان نیروی مولکولی به صورت فرمول زیر در خواهد آمد :

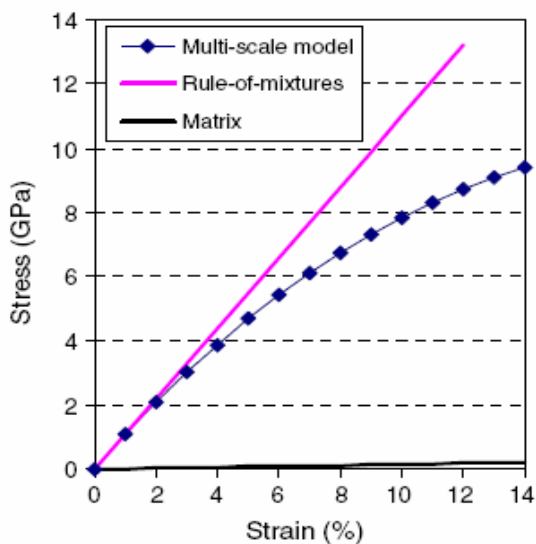
$$F = 2\beta D_e \left(1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right) e^{-\beta(r-r_0)} \quad \text{(۲۸-۵)}$$

جهت شبیه سازی پیوند بین اتمهای کربن از المان الاستیک 3D Beam و در مورد ماتریس از المان 3D Solid استفاده شده است و با قرار دادن نانوتیوب درون ماتریس، المان حجمی جایگزین

¹ Progressive fracture model

تشکیل می گردد. جهت کاهش محاسبات مورد نیاز جهت تحلیل اجزاء محدود المان حجمی جایگزین، تعیین مش بندی بهینه حائز اهمیت خواهد بود. نهایتاً المان حجمی جایگزین تحت بارگذاری کششی قرار گرفته و مدول کششی مؤثر به صورت رابطه ای بر حسب تابعی از کرنش المان بدست می آید.

المان حجمی جایگزین مدل شده توسط روش اجزاء محدود که به شکل مکعب مستطیلی به ابعاد $3 \times 3 \times 3$ نانو متر مکعب می باشد، در جهت طولی تحت بارگذاری کششی قرار گرفته و نتایج بدست آمده بصورت نمودارهای تنش- کرنش با نتایج روش قانون مخلوطها مقایسه شده است (شکل ۵-۲۱).



شکل (۲۱-۵) مقایسه منحنی های تنش- کرنش پیش بینی شده نانو کامپوزیت و قانون مخلوطها [۲۴]

افزایش محسوسی در سفتی پلیمر بدلیل اضافه کردن نانوتیوبهای کربنی به آن مشاهده می گردد، همچنین مقاومت کششی نانوکامپوزیت نیز با افزایش کسر حجمی نانوتیوب کربنی بیشتر می گردد.

۵-۵ روشهای مدلسازی نیروهای ون در والس

حال با توجه به اهمیت مدلسازی پیوند میان اتمهای کربن در نانوتیوب و گره های مربوطه در ماتریس پلیمری و با علم به این موضوع که پیوندهای فوق از نوع نیروهای وان در والس هستند، در این بخش مختصراً به مرور روشهای مدلسازی پیوند فوق در مطالعات قبلی می پردازیم.

لی^۱ و چو^۲ در سال ۲۰۰۳ [۸۰] جهت مطالعه رفتار الاستیک نانوتیوبهای کربنی چند دیواره و تأثیر نیروهای وان در والس میان اتمهای کربن در لایه های مختلف، از پتانسیل لنارد جونز استفاده نمودند و آنها را توسط المانهای خرپا غیرخطی شبیه سازی نمودند.

نیروهای وان در والس می توانند بصورت جاذبه و دافعه میان اتمهای کربن عمل کنند. جاذبه هنگامی رخ می دهد که فاصله دو اتم از حدی بیشتر شود و دافعه زمانی به وقوع می پیوندد که فاصله میان دو اتم از مجموع شعاع تماسی دو اتم کمتر گردد.

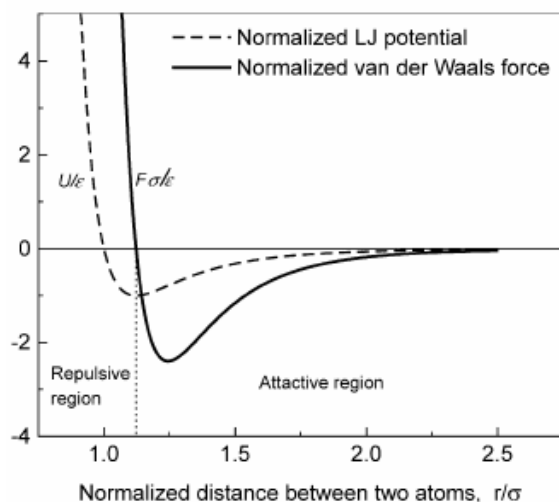
فرم کلی پتانسیل لنارد جونز به صورت زیر بیان می شود :

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (۲۹-۵)$$

بر اساس این رابطه پتانسیل، نیروی وان در والس میان اتمهای درگیر مطابق فرمول (۲۴-۵) خواهد بود و همانطور که گفته شد در فاصله اتمی بیش از $2/5\sigma$ این نیروها غیر فعال می شوند. تغییرات نیروی وان در والس و پتانسیل لنارد جونز در یک نانوتیوب چند دیواره بصورت شکل (۲۲-۵) خواهد بود.

¹ Li

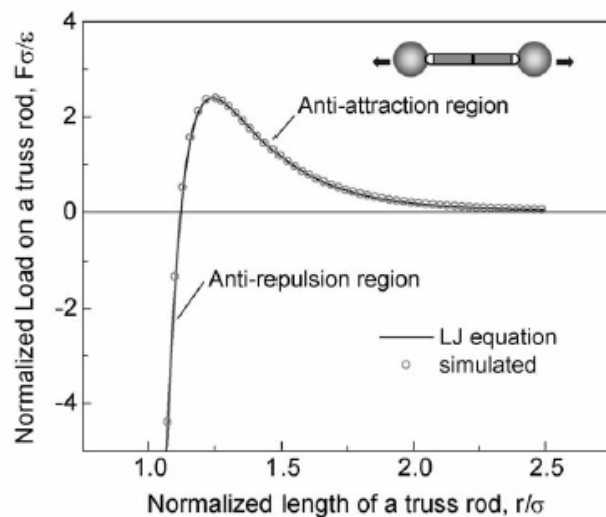
² Chou



شکل (۵-۲۲) منحنی پتانسیل لنارد-جونز و نیروی وان در والس نسبت به فاصله بین اتمی [۸۰]

مطابق رابطه نیروی وان در والس ، المانهای خریا^۱ تنها توانایی تحمل بارهای کششی و فشاری را خواهند داشت. همانطور که در منحنی ملاحظه می گردد، نیروی وان در والس عمل کننده میان دو اتم کاملاً غیرخطی است. بنابراین میله های خریا واسط میان اتمها نیز بصورت المانهای غیرخطی بوده و رابطه نیرو-جابجایی آنها بر اساس رابطه وان در والس خواهد بود. اما باید به این نکته توجه داشت که منحنی نیرو-جابجایی برای المانهای خریا معکوس منحنی نیروهای بین اتمی وان در والس است (شکل ۵-۲۳). به این دلیل که نیروی وان در والس نیرویی ذاتی بین اتمهاست؛ حال آنکه منحنی زیر نیروی لازم برای غلبه بر این نیرو در المانهای خریاست.

^۱ Truss Rods



شکل (۵-۲۳) منحنی نیرو-جابجایی المانهای غیر خطی خرپا [۸۰]

مشخصه منحنی نیرو-جابجایی، مشکلاتی را در شبیه سازی رفتار غیرخطی المانهای خرپا به همراه دارد. بنابراین انتخاب روشی مناسب جهت آنالیز این رفتار بسیار حائز اهمیت است. از روشهای موجود برای انجام این شبیه سازی می توان به روش طول کمان^۱، روش کنترل جابجایی عمومی^۲ و روش کنترل کار^۳ اشاره نمود، که در این تحقیق، روش کنترل جابجایی عمومی با توجه به دقت و پایداری آن مورد استفاده قرار گرفته است.

در مطالعه دیگری که توسط همین دو محقق [۸۱] جهت مدلسازی رفتار کمانشی الاستیک نانوتیوبهای کربنی به روش مقادیر ویژه انجام شد، از روش مشابهی یعنی شبیه سازی پیوند بین اتمهای کربن در لایه های مختلف یک نانوتیوب کربنی چند دیواره بصورت میله های خرپا و رابطه پتانسیل لنارد جونز استفاده شد. اما برای بدست آوردن ماتریس سفتی مربوط به میله های خرپا با توجه به غیرخطی بودن رابطه نیرو - جابجایی آنها، این ماتریس همانند ماتریس های هندسی و بصورت زیر در نظر گرفته شده است:

¹ Arc-length

² Generalized displacement control

³ Work control

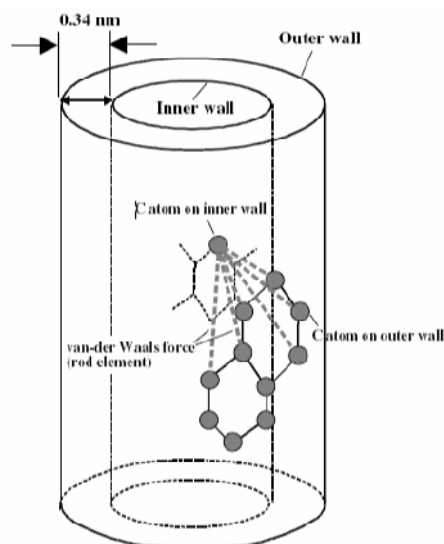
$$\mathbf{K}_{ii}^{\text{vdw}} = \mathbf{K}_{jj}^{\text{vdw}} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (30-5)$$

$$\mathbf{K}_{ij}^{\text{vdw}} = -\mathbf{K}_{ii}^{\text{vdw}},$$

که در آن

$$\alpha = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma^2} \left[26 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{17} - 7 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^8 \right] \quad (31-5)$$

هو^۱ و همکارانش [۸۲] به منظور مطالعه رفتار کمانش نانوتیوبهای کربنی چند دیواره از روش جدیدی برای مدلسازی رفتار نیروی وان در والس استفاده کردند. به این صورت که پیوند بین اتمهای کربن در جداره های مختلف بصورت المانهای میله ای در نظر گرفته شدند (شکل ۵-۲۴).



شکل (۲۴-۵) مدلسازی نیروهای وان در والس میان اتمهای کربن واقع بر روی دیواره های متفاوت [۸۲]

مطابق با رابطه لنارد جونز و نیروی وان در والس، با فرض R_1 به عنوان فاصله اولیه میان اتمهای کربن در دیواره های متفاوت (که معمولاً 0.34 نانو متر است)، پس از اعمال جابجایی بسیار کوچک این فاصله به مقدار ΔR ، تغییر پتانسیل با چشم پوشی از ترمهای مرتبه ۳ و بالاتر بصورت زیر خواهد بود:

¹ Hu

$$\Delta U \approx \frac{dU(R_1)}{dR} \Delta R + \frac{d^2U(R_1)}{2dR^2} \Delta R^2 \quad (32-5)$$

برای یک المان میله با طول اولیه R_1 در این مسئله، با فرض نیروی اولیه داخلی T و سفتی کششی المان EA_R (سطح مقطع المان میله ای)، با تغییر طول المان به مقدار ΔR ، تغییر انرژی کرنش ذخیره شده در المان بصورت زیر خواهد بود :

$$\Delta \Gamma_R = T \Delta R + \frac{EA_R}{2R_1} \Delta R^2 \quad (33-5)$$

با مقایسه دو معادله فوق، می توانیم سفتی کششی^۱ را بصورت زیر بدست آوریم :

$$EA_R = R_1 \frac{d^2U(R_1)}{dR^2} \quad (34-5)$$

نیروی اولیه T در المان میله نیز در حالت تعادل به صورت زیر در می آید:

$$T = \frac{dU(R_1)}{dR} = -F(R_1) \quad (35-5)$$

ژانگ^۲ و همکارانش در [۸۳] جهت بررسی خواص مکانیکی نانوتیوبهای چند دیواره، بر اساس مشخصه نیروی وان در والس حاکم بر عکس عملهای بین اتمهای کربن در لایه های مجاور، از المانهای فنر غیرخطی استفاده نمود. به صورتی که با استفاده از فرمول (۲۴-۵)، ثابت فنر غیر خطی معادل نیروی وان در والس در مدل اجزاء محدود بصورت معادله زیر تعریف شد :

$$k_s = \frac{F(r)}{r} = -\frac{dU(r)}{rdr} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{14} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^8 \right] \quad (36-5)$$

و جهت شبیه سازی رفتار غیرخطی المان فنر از روش تکرار نیوتن اصلاح شده استفاده شد.

لو^۳ و همکارانش در سال ۲۰۰۸ [۸۴] جهت مدلسازی نیروی وان در والس موجود در فصل مشترک نانوتیوبهای کربنی چند دیواره و پلیمر از یک قانون چسبندگی استفاده کردند. در این

¹ Extentional Stiffness

² Zhang

³ Lui

قانون، مقاومت کششی چسبندگی و انرژی چسبندگی بر حسب ترمهایی مانند دانسیته سطحی اتمهای کربن روی دیواره نانوتیوب کربنی، تعداد دیواره های نانوتیوبهای کربنی، و دانسیته حجمی واحدهای $-CH_2-$ در پلیمر (پلی اتیلن) و پارامترهای نیروی وان در والس بدست آمده است. در این پژوهش از تأثیر شعاع نانوتیوب چشم پوشی شده و عکس العملهای میان گرافن و پلیمر، در یک صفحه نامحدود اتمهای کربن بررسی شده است؛ بطوریکه گرافن موازی سطح پلیمر است. اتمهای کربن بر روی صفحه گرافن همگن سازی شده اند و چگالی ρ_C برای آن انتخاب شده است. به همین ترتیب تعداد اتمهای کربن در سطح مقطع dA روی گرافن، $\rho_C dA$ خواهد بود. به شکلی مشابه اگر چگالی پلیمر ρ_P باشد، تعداد مولکولهای پلیمر در حجم dV برابر با $\rho_P dV$ خواهد بود. حال انرژی ذخیره شده در اثر نیروی وان در والس در سطح نامحدود به شکل زیر بدست خواهد آمد :

$$\rho_C dA \int_{V_{Polymer}} V(r) \rho_P dV_{Polymer} = 2\pi\rho_C \rho_P dA \int_{-\infty}^{-h} dx \int_0^{\infty} V(r) r dz \quad (37-5)$$

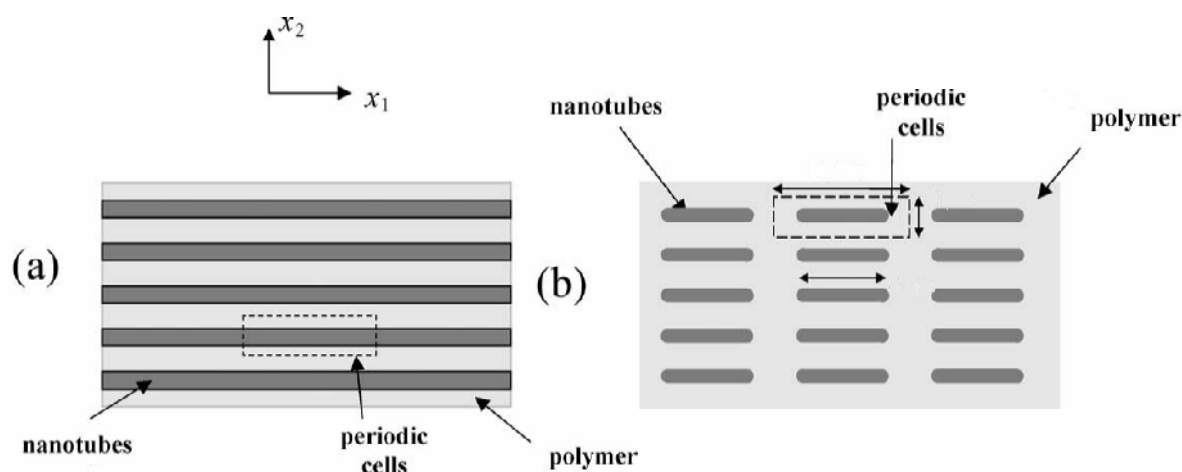
و انرژی چسبندگی در واحد سطح هم با توجه به رابطه بالا قابل حصول خواهد بود و بنابراین قانون چسبندگی برای فصل مشترک پلیمر و نانو تیوب بدست می آید.

فصل ششم:

روش و فرایند مدلسازی

۱-۶ مقدمه

با توجه به مدلسازی نانوتیوب کربنی به صورت ساختاری مولکولی و مدلسازی پلیمر بصورت ساختاری پیوسته، روش بکار رفته جهت پیش بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری روشی چند مقیاسه^۱ خواهد بود؛ زیرا نانوتیوب در مقیاس اتمی و ماتریس در مقیاس میکروسکوپی شبیه سازی شده اند. شکل (۱-۶) دو نمونه از المان حجمی جایگزین های پیوسته و ناپیوسته را نشان می دهد.



شکل (۱-۶) تصویر شماتیک یک نانو کامپوزیت پایه پلیمری حاوی [۷۲]
 (a) نانو تیوبهای کربنی بلند (المان پیوسته) (b) نانو تیوبهای کربنی کوتاه (المان ناپیوسته)

در المان نوع پیوسته، نانوتیوب درون المان حجمی جایگزین با ماتریس هم طول است. اما در نوع ناپیوسته، نانوتیوب و ماتریس دارای طولهای یکسانی نمی باشند. همانطور که در شکل ملاحظه می شود، نانوتیوب های کربنی به صورت تناوبی و در یک راستا درون ماتریس پخش شده اند، که این وضعیت ایده آل در ساخت نانوکامپوزیتها است.

همانطور که در شکل (۱-۶) نیز مشاهده می گردد؛ المان حجمی جایگزین در واقع به عنوان نماینده ای از کلیت جسمی است که تمامی خواص آنرا در بر دارد. در واقع المان حجمی جایگزین، کوچک شده جسم واقعی در ابعادی ریزتر می باشد که تمامی ویژگیهای آنرا به همراه دارد و دلیل این مسئله هم توزیع تناوبی فیبرها در ماتریس می باشد.

¹ Multi-Scale

بنابراین می توان به جای تحلیل جسم در ابعاد واقعی با حجم محاسبات و هزینه بسیار بالا، نمونه کوچک شده آنرا با خواص یکسان در نظر گرفت؛ با علم به این واقعیت که خواص بدست آمده برای المان حجمی جایگزین با خواص جسم یکسان خواهد بود. شبیه سازی با استفاده از نرم افزار ABAQUS 6.6 انجام شده است.

۲-۶ فرایند شبیه سازی المان حجمی جایگزین

در این پایان نامه نانوتیوبهای کربنی که به عنوان فیبرهای استحکام دهنده در ماتریس پلیمری قرار گرفته اند با ساختار زیگزاگ، طولهای مختلف و در سه قطر، یعنی آرایش های (۱۲و۰) با قطر حدود ۰/۹۵ نانومتر، آرایش (۱۶و۰) با قطر تقریبی ۱/۲۵۷ نانومتر و ساختار (۲۲و۰) با قطر تقریبی ۱/۷۲۵ نانومتر شبیه سازی شده اند .

در نانوکامپوزیت مورد نظر، نانوتیوبهای کربنی در دو حالت، یک مرتبه درون ماتریس پلیمری از نوع پلی اتیلن آمورف^۱ که دارای ساختاری بی شکل می باشد، و بار دیگر درون پلی اتیلن- کریستالی^۲ قرار گرفته اند. ساختار ماتریس پلیمری فوق (پلی اتیلن^۳) بصورت زنجیره ای از واحدهای -CH₂- می باشد.

ابعاد انتخابی نیز برای المان حجمی جایگزین مدل شده، بایستی به صورتی باشد که مانع برهمکنش مستقیم بین نانو تیوب های کربنی مجاور شود. در این پایان نامه با توجه به قطرهای مختلف نانوتیوبهای کربنی، از المان های حجمی استوانه ای استفاده شده است که در آنها نانوتیوبهای کربنی مورد استفاده با ماتریس پلیمری هم طول می باشند.

¹ Amorphous Polyethylene

² Crystalline Polyethylene

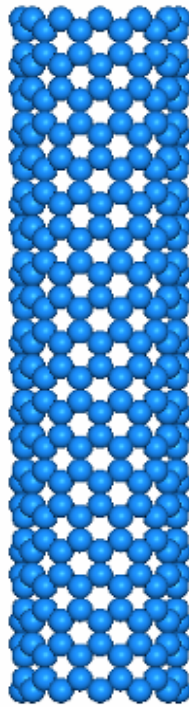
³ Polyethylene (PE)

جهت مطالعه اثر فصل مشترک در انتقال بار بین نانوتیوب و پلیمر از شرایط مختلفی برای قیدگذاری استفاده شده است، که با توجه به این شرایط که در قسمتهای بعدی توضیح داده خواهد شد، به نوعی می توان در مواردی نانوکامپوزیت مدل شده در المان حجمی جایگزین را به صورت ناپیوسته در نظر گرفت.

۶-۲-۱ مدل سازی نانو تیوب کربنی

به صورت اختصار به شرح روش مدل سازی نانوتیوب های کامل در نرم افزار ABAQUS می پردازیم. جهت ایجاد اتمهای کربن به صورت کره های تو خالی در بخش Part ، بر روی گزینه Creat part کلیک کرده و با انتخاب حالت Solid و سپس Discret Rigid، کره ای را با قطری برابر با قطر یک اتم کربن ایجاد می نمائیم. پس از انجام این کار نقطه مرجعی را در مرکز کره در نظر می گیریم که در حقیقت نماینده کل کره می باشد [۸۵].

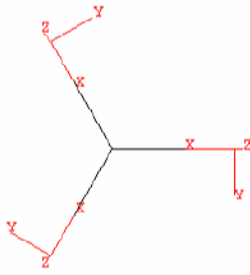
در این مرحله اتمهای کربن مورد نیاز بر حسب تعداد و نوع کایرالیتهی مونتاژ می شوند. با توجه به شکل (۶-۲) مشاهده می شود که چگونه نانوتیوب های با طول های متفاوت و با کایرالیتهی متفاوت را می توان مدل نمود.



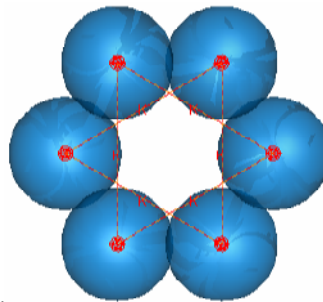
شکل (۶-۲) نانوتیوب‌های مونتاژ شده از نوع زیگزاگ به طول ۴/۱۸۸ نانومتر [۸۵]

جهت اعمال برهم کنش‌های بین اتمی در بخش Interaction می‌توان برهم کنش‌های بین اتمی را تعریف نمود و برای این کار باید طبق روش زیر عمل نمود.

از نقاط مرجع واقع در مرکز اتمهای کربن می‌توان برای ایجاد دستگاه مختصات محلی استفاده نمود. قابل ذکر است که در نرم‌افزار ABAQUS برای نسبت دادن برخی از انواع برهم کنش‌های بین اتصالات، باید بر روی نقاط ابتدائی و انتهائی اتصال یک مختصات محلی تعریف نمود. مختصاتی که در این جا تعریف شده است از نوع کارت‌زین می‌باشد که جهت محور X آن در جهت اتصال بین دو اتم بوده و جهت محور Z آن عمود بر محور مرکزی نانوتیوب در نظر گرفته شده است (شکل ۶-۳). در این بخش ابتدا این دستگاه‌های مختصات محلی را اعمال می‌نماییم؛ پس از آن فنرهایی را که نقش خمش بین اتم‌ها را ایفا می‌کنند، مطابق شکل (۶-۴) بین آنها قرار می‌دهیم. در این حالت فنرها را به صورت الاستیک در نظر می‌گیریم.



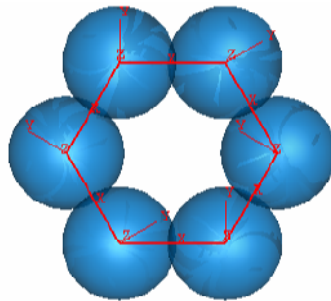
شکل (۳-۶) نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن [۸۵]



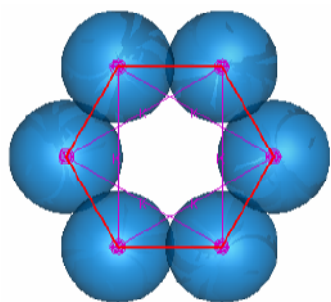
شکل (۴-۶) نحوه قرار گرفتن فنرهای خمشی بین اتم‌های کربن [۸۵]

پس از ایجاد فنرها در این بخش باید بین هر یک از اتم‌های کربن و اتم کربن مجاور آن یک اتصال ایجاد نمود و سپس برای آن اتصال یک رفتار مشخص را تعریف کرد. برای انجام این کار بر روی گزینه Create wire در بخش Interaction کلیک کرده و اتصالات مورد نظر را با انتخاب مرکز اتم‌ها به عنوان نقاط ابتدائی و انتهائی تعریف می‌نماییم. بعد از آن بر روی گزینه Create connector section کلیک کرده و رفتار مورد نیاز را برای آن تعریف می‌نماییم. برای اعمال رفتارهای بین اتمی یعنی کشش بین اتم‌ها، پیچش زاویه‌ای دو سطحی و پیچش خارج صفحه‌ای، مطابق شکل بر روی Basic type کلیک کرده و از قسمت Translational type بر روی Cartesian و از قسمت Rotational type بر روی Rotation کلیک می‌کنیم. سپس در پنجره ظاهر شده بر روی گزینه‌ی add کلیک کرده و Elasticity را انتخاب می‌نماییم. در زیر بخش Nonlinear Definition را انتخاب کرده و داده‌های مورد نیاز را وارد می‌نماییم. در شکل (۵-۶) می‌توان این اتصالات را بین اتم‌های کربن مشاهده کرد. بعد از تعریف رفتارهای مورد نیاز بر روی آیکن assignment Create connector کلیک کرده و با انتخاب اتصالات مربوطه این رفتارها را به اتصالات

نسبت می‌دهیم. در شکل (۶-۶) نیز می‌توان مجموع فنرهای خمشی و اتصالات را که در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند را مشاهده نمود.



شکل (۶-۵) نحوه قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن [۸۵]



شکل (۶-۶) مجموع فنرهای خمشی و اتصالات بین اتم‌های کربن [۸۵]

در بخش Mesh می‌توان اتم‌های کربن را که به صورت یک کره تو خالی تعریف شده‌اند را مش‌بندی کرد.

۲-۲-۶ مدل‌سازی ماتریس پلیمری

پس از مدل‌سازی نانوتیوب، مرحله بعد ساختن مدل مناسبی برای پلیمر و ایجاد پیوندهای مورد نیاز بین پلیمر و نانوتیوب کربنی است. به همین منظور در این بخش به جزئیات مدل‌سازی ماتریس پلیمری و پیوندهای میان آن و نانوتیوب می‌پردازیم.

۶-۲-۱ ایجاد قطعه پلیمری

ابتدا جهت مدلسازی پلیمر در نرم افزار ABAQUS با توجه به اینکه پلیمر را به شکل ساختاری سه بعدی و پیوسته مدل خواهیم کرد، در قسمت Modulus به ترتیب Part و Craet Part را جهت ایجاد قطعه ای جدید انتخاب می کنیم. سپس در قسمت Modeling Space گزینه 3D، در قسمت Type گزینه Deformable و نهایتاً در قسمت Best Feature گزینه Solid و Extrusion را برمی گزینیم.

بهتر است جهت سهولت شبیه سازی، نامی را در قسمت Name برای مدل در حال ساخت (بعنوان مثال Matrix) انتخاب کنیم. مدلسازی پلیمر به صورت استوانه ای توخالی صورت می گیرد که این فرایند با توجه به نوع المان حجمی جایگزین صورت می پذیرد.

جهت انتخاب قطر داخلی استوانه بایستی به این نکته مهم توجه داشت که این انتخاب با توجه به فاصله تعادل میان اتمهای کربن در نانوتیوب و واحدهای $-CH_2-$ در زنجیره پلی اتیلن صورت می پذیرد.

همانطور که در مباحث پیش به این موضوع اشاره گردید؛ این پیوند از نوع پیوندهای وان در والس می باشد که توسط پتانسیل لِنارد- جونز شبیه سازی می گردد. با توجه به فرمول (۵-۲۹)، U انرژی میان اتمهای واقع در فاصله r نسبت به یکدیگر و $\sqrt[3]{2}\sigma$ فاصله تعادل میان اتمهاست که σ و ϵ پارامترهای رابطه لِنارد جونز هستند.

در اینجا برای برهم کنش میان اتمهای کربن C در نانوتیوب کربنی و واحدهای $-CH_2-$ در پلی اتیلن مقدار $\sigma = 0.3825$ نانو متر خواهد بود. بنابراین با محاسبه مقدار پارامتر $\sqrt[3]{2}\sigma$ فاصله تعادل میان نانوتیوب و ماتریس حدود 0.43 نانو متر نانومتر بدست خواهد آمد [۷۹].

البته باید توجه داشت که با توجه به مطالعه انجام شده در مرجع [۷۸]، همانطور که ذکر شد پس از قرار دادن زنجیره پلیمری در کنار نانوتیوب و رسیدن به تعادل نهایی، فاصله میان اتمهای کربن در نانو تیوب و واحدهای زنجیره پلیمری در نقاط مختلف متفاوت است و در منبع فوق این فاصله بصورت میانگین یک بازه انتخاب شده است. همچنین همانطور که در شکل (۵-۱۳) مشخص است،

زنجیره پلیمری در تمام نقاط، نانوتیوب کربنی را احاطه نمی کند و این موضوع موجب می شود تا انتخاب فاصله تعادل به صورت یک مقدار عددی مشخص امکان پذیر نباشد.

حال با احتساب این فاصله، به عنوان مثال در مورد نانوتیوبهای زیگزاگ با آرایش (۱۶۰) و قطر ۱/۲۵۷ نانو متر، قطر داخلی پلیمر ۲/۱۱۶ نانو متر خواهد شد و به همین ترتیب این مقدار برای موارد دیگر نیز قابل محاسبه است. با مشخص شدن قطر داخلی و انتخاب قطر خارجی ماتریس پلیمری جهت ایجاد المان، به ادامه مدلسازی پلیمر می پردازیم.

از گزینه Creat Circle استفاده می کنیم و با وارد کردن شعاعهای داخلی و خارجی، دو دایره هم مرکز با یکدیگر را رسم می کنیم. سپس در پنجره Edit Base Extrusion در قسمت Depth طول مورد نظر ماتریس را وارد می کنیم، که این طول با توجه به نانوتیوب انتخابی هم طول با آن خواهد بود. جهت ایجاد یک نقطه مرجع مورد استفاده در مراحل بعدی از تب^۱ Tools، در Reference Point، مختصات (0,0,0) را در پنجره مربوطه وارد می کنیم. در پایان این مرحله، جهت ایجاد صفحات انتهایی نیز از گزینه discrete rigid در قسمت Tpe استفاده می کنیم.

۲-۲-۲-۶ تعیین خواص مکانیکی

پس از مدلسازی ماتریس پلیمری بایستی خواص مکانیکی آنرا مشخص نمائیم. جهت تعیین خواص مکانیکی پلیمر از قبیل مدول یانگ، ضریب پوآسون و خواص پلاستیک و غیره در قسمت module property، را برمی گزینیم. سپس بر روی creat material کلیک کرده و جهت وارد کردن خواص الاستیک پلی اتیلن از قسمت mechanical به ترتیب Elasticity و سپس Elastic را انتخاب می کنیم.

با توجه به داده های ارائه شده در مرجع [۸۶] پلی اتیلن آمورف ساختاری بسیار نزدیک به مواد ایزوتروپیک دارد. بطوریکه مدول یانگ ارائه شده برای آن در سه محور z,y,x تفاوت بسیار ناچیزی با یکدیگر دارد. لذا در قسمت Type از گزینه Elastic، Isotropic را انتخاب کرده و در

^۱ Tab

پنجره پایین در تب Data در پنجره Youngs Modulus عدد ۳ و در پنجره Poissons Ratio عدد ۰/۳۳ را وارد می کنیم.

انتخاب اعداد ذیل با توجه به داده های ارائه شده در مراجع مختلف از جمله مرجع [۸۶] صورت پذیرفته است. یکای مدول یانگ پلی اتیلن نیز بایستی مطابق با سایر یکاهای ابعادی مسئله در نظر گرفته شود. بدین صورت که در مورد مدول یانگ $3GPa = 3G \frac{N}{m^2}$ با تبدیل ابعادی این عدد بر حسب نانومتر و نانو نیوتن، مدول یانگ پلی اتیلن آمورف $3 \frac{nN}{nm^2}$ خواهد بود. همچنین در مورد پلی اتیلن کریستالی مدول یانگ $215GPa$ می باشد.

جهت بررسی خواص پلاستیک و پیش بینی رفتار شکست نانوکامپوزیت پلیمری مورد نظر، می توان خواص پلاستیک پلی اتیلن آمورف از جمله مقاومت تسلیم و مقاومت کشش نهایی را به ترتیب زیر مشخص نمود. برای این منظور بایستی بر روی Mechanical کلیک کرده و پس از زیرشاخه Plasticity، Plastic را انتخاب کنیم. در پنجره باز شده، ستون سمت چپ Yeild Stress یا همان تنش تسلیم و ستون سمت راست را Plastic Strain یا کرنش پلاستیک می باشند. داده های جدول فوق از نقطه تنش تسلیم ماده شروع شده و به تنش نهایی تسلیم ختم می شوند. بدین صورت که در ردیف اول عدد صفر را وارد می کنیم که متناظر با شروع کرنش پلاستیک است و در نقاط بعدی کرنش پلاستیک متناظر را وارد می نمائیم. با توجه به داده های ارائه شده در مرجع [۸۶]، تنش تسلیم پلی اتیلن آمورف حدود $100 MPa$ و تنش نهایی تسلیم حدود $217 MPa$ می باشند که کرنش متناظر آن حدود ۲۰٪ است.

حال جهت ایجاد Section روی Creat Section کلیک می کنیم. با توجه به شبیه سازی پلی اتیلن به شکل المانهای Solid در قسمت Category گزینه Solid و در قسمت Type با توجه به توضیحات ارائه شده Homogeneous را انتخاب می کنیم. سپس در مقابل material، ماده تعریف شده در مرحله قبل را بر می گزینیم. حال جهت ارجاع دادن نوع ماده تعریف شده به هندسه

مدلسازی شده ، بر روی Assign section کلیک کرده و سپس در پنجره اصلی Part ایجاد شده را انتخاب می کنیم.

۳-۲-۲-۶ مونتاژ قطعات ایجاد شده

جهت گرد هم آوری پارتهای ایجاد شده، در قسمت module گزینه بعدی یعنی Assembly را انتخاب می کنیم. به منظور اضافه کردن پلیمر مدل شده به سایر پارتهای بر روی Instance part کلیک کرده و قطعه ایجاد شده در مرحله قبل را انتخاب می کنیم. حال به منظور همراستا سازی قطعه اضافه شده به اسمبلی، از گزینه Transtate Instance استفاده می کنیم تا ماتریس پلیمری و Part2 که صفحات انتهایی دو سر نانوتیوب کربنی هستند در سطح یکسانی قرار می گیرند، که این موضوع جهت انجام بارگذاری بسیار حائز اهمیت است.

پس از پایان اسمبلی در قسمت module ، Step را انتخاب می کنیم. در این قسمت با توجه به نوع تحلیل و بارگذاری مورد نظر بایستی روش حل مسئله را برای نرم افزار مشخص نمائیم. بدین ترتیب که ابتدا بر روی Creat Step کلیک کرده و در قسمت Procedure type، General را انتخاب کرده و در پنجره زیرین Static, General را انتخاب می کنیم.

لازم به ذکر است این انتخاب با توجه به بارگذاری کششی بر روی المان حجمی جایگزین و نیاز به دستیابی به خواص مکانیکی الاستیک نانوکامپوزیت صورت می پذیرد و نمی توان از گزینه های دیگر جهت بررسی این نوع بارگذاری استفاده نمود.

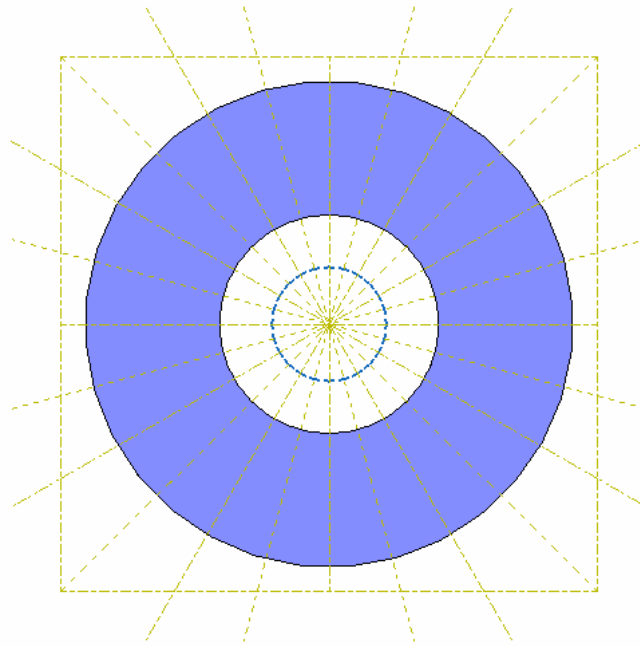
سپس بر روی Continue کلیک کرده و در پنجره باز شده در تب Basic در قسمت Period Time متناسب با اندازه بار اعمال شده و مسئله مورد نظر اعداد را وارد می کنیم (این قسمت مرتبط به مقیاس زمانی آنالیز مورد نظر است). در قسمت Nlgeom برای لحاظ کردن غیرخطی بودن هندسه المان حجمی جایگزین مدل شده، بر روی ON کلیک می کنیم.

۶-۲-۴ اعمال بر هم کنشهای بین مولکولی

در مرحله بعدی در قسمت module، گزینه interaction را انتخاب می کنیم. در این مرحله قسمت مهمی از مدلسازی را پیش رو داریم و آن ایجاد پیوندهایی صحیح میان اتمهای کربن در نانوتیوب و نودهای متناظر در ماتریس پلیمری است.

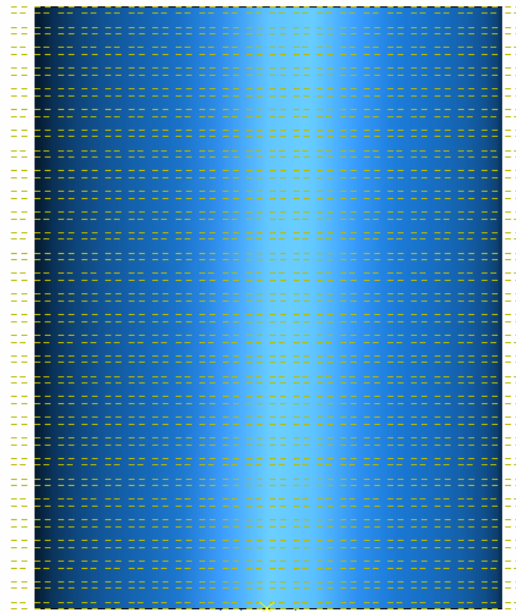
با در نظر گرفتن این موضوع که پیوندهای فوق از نوع پیوندهای وان در والسی هستند و تنها قابلیت تحمل نیروهای کششی و فشاری را دارند؛ بایستی آنها را بوسیله المانهایی مناسب شبیه سازی کنیم. اگر فرض کنیم در مقابل هر اتم کربن در نانو تیوب کربنی، یک واحد -CH₂- از زنجیره پلیمری قرار دارد، یعنی وضعیتی که نانوتیوب کربنی کاملاً توسط ماتریس پلیمری احاطه شده است، جهت ایجاد اتصال میان مرکز اتمهای کربن در نانوتیوب و نقطه مقابل آنها بر روی پلیمر (تصویر مراکز اتمهای کربن بر روی پلیمر) احتیاج به روشی داریم تا این نقاط را ایجاد نمائیم. برای این منظور بایستی ماتریس پلیمری را به پارتیشن‌هایی متناسب با آرایش مولکولی نانوتیوب کربنی تقسیم نمائیم که این مهم بصورت زیر انجام می پذیرد.

ابتدا بایستی صفحات مبنایی ایجاد نمائیم که با استفاده از آنها جسم را جزء بندی نماییم. ممکن است روشهای متعددی برای این منظور وجود داشته باشد، اما بایستی توجه داشت که ایجاد این صفحات مبنا بایستی بر اساس چیدمان اتمهای کربن صورت پذیرد تا هدف مورد نظر حاصل شود. جهت ایجاد صفحات مورد نیاز، ابتدا در تب Tools گزینه Datum را انتخاب کرده و در پنجره باز شده به ترتیب بر روی plane در قسمت type و بر روی 3points در قسمت Method کلیک می کنیم. برای ایجاد این صفحات، سه نقطه واقع در یک قطر نانوتیوب را طوری انتخاب می کنیم که نقاط بر روی یک خط واقع نشوند. با توجه به آرایش نانوتیوبهای کربنی، به عنوان مثال در نانوتیوبهای زیگزاگ (۱۲۰)، بایستی تعداد ۱۲ عدد از این صفحات را ایجاد نمائیم. پس از ایجاد این صفحات، ماتریس پلیمری به شکل زیر در خواهد آمد (شکل ۶-۷).



شکل (۶-۷) ایجاد صفحات مینا در ماتریس پلیمری از نمای فوقانی

در ادامه، بایستی همین روند را برای اتمهای کربن واحد در یک محیط انجام دهیم. انتخاب نقاط کاملاً اختیاری است و تنها بایستی سه نقطه صحیح را در هر مرحله انتخاب نمائیم و با توجه به طول نانوتیوب این فرایند بایستی تکرار گردد تا تمامی اتمهای کربن بر روی صفحات مربوطه قرار گیرند.

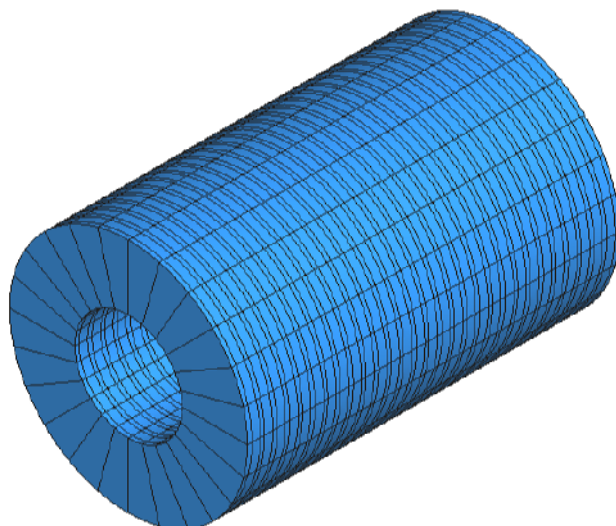


شکل (۶-۸) ایجاد صفحات مینا در ماتریس پلیمری از نمای جانبی

حال با استفاده از صفحات مبنای ایجاد شده و در نظر گرفتن این نکته که این صفحات کاملاً بر اساس آرایش مولکولی اتمهای کربن ساخته شده اند به پارتیشن بندی ماتریس پلیمری می پردازیم. بدین ترتیب که در تب Tools، گزینه Partition را انتخاب کرده و در قسمت Type بر روی Cell و در قسمت Method بر روی Use datum plane کلیک می کنیم.

حال پس از انتخاب نمای جانبی، قطعه پلیمری (Matrix) را در صفحه اصلی انتخاب کرده و سپس بر روی یکی Datum Plane های ایجاد شده در مرحله قبلی کلیک می نمائیم. Creat Partition را انتخاب می کنیم تا Matrix به دو بخش تقسیم شود. این عمل را از یکی از دو انتهای قطعه شروع می کنیم و به ترتیب تک تک Datum plane ها را انتخاب می کنیم تا به انتهای دیگر برسیم.

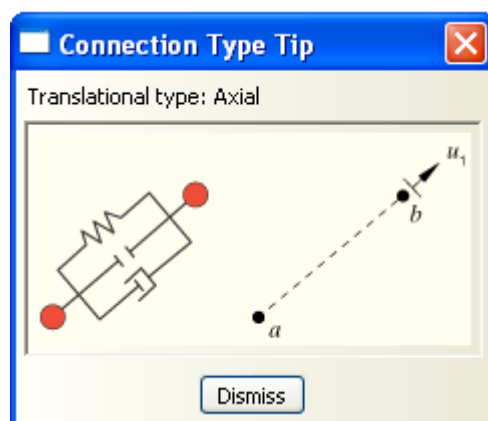
در انتها بایستی به تعداد صفحات مبنای موجود، در نمای مورد نظر پارتیشن داشته باشیم. حال نمای مقابل را انتخاب کرده و همین فرایند را در مورد صفحات مبنای موجود در این نما تکرار می نمائیم. پس از ایجاد پارتیشن های مورد نظر، قطعه مطابق شکل (۶-۹) در خواهد آمد.



شکل (۶-۹) نمای ماتریس پلیمری پس از ایجاد پارتیشن بندی

ملاحظه می شود که با انجام فرایند مشروح، در مقابل هر اتم کربن در نانوتیوب یک نود بر روی ماتریس ایجاد گردید و این بهترین و سریع ترین روش جهت رسیدن به پارتیشن بندی مورد نظر است.

گام بعدی ایجاد پیوندی صحیح و مؤثر میان اتمهای کربن و نودهای ایجاد شده است. جهت ایجاد این پیوندها در نرم افزار ABAQUS، می توان از نوعی Connector استفاده کرد، با لحاظ کردن این موضوع که Connector فوق بتواند نیاز ما را در شبیه سازی یک پیوند وان در والس، که از رابطه ای غیرخطی تبعیت می کند، برآورده نماید. با توجه به خصوصیات مورد نظر، Connector انتخابی بایستی تنها در راستای محور خود فشرده یا کشیده شود که بهترین گزینه برای این منظور می تواند Axial Connector باشد (شکل ۶-۱۰).



شکل (۶-۱۰) شکل شماتیک axial connector

برای این منظور بر روی Creat Connector Section کلیک می نمائیم. این نوع Connector را می توان با انتخاب Basic Type در قسمت Connection Type و سپس انتخاب Axial از Translation type ایجاد نمود. در واقع باید گفت که با انتخاب این Connector پیوندهای وان در والس را به شکل فنرهایی غیرخطی مدل می شوند. با کلیک بر روی Continue وارد پنجره جدیدی می شویم که در آن ویژگیهای Connector ایجاد شده را مشخص می نمائیم. با توجه به اینکه فنرهای مورد نظر از نوع الاستیک بوده و پس از حذف بارگذاری، به حالت تعادل نیرو بر می گردند؛ با کلیک بر روی Add گزینه Elasticity را انتخاب می کنیم. سپس با توجه به غیرخطی

بودن رابطه نیرو بر حسب جابجایی، مطابق منحنی نیروی وان در والس (شکل ۵-۲۳)، در قسمت Definition بر روی nonlinear و در قسمت Force/Moment بر روی F1 کلیک می کنیم. حال در قسمت Data بایستی داده های مربوط به رفتار این پیوند را بصورت جدولی بر حسب نیرو F (ستون سمت چپ) و جابجایی از حالت تعادل U (ستون سمت راست) وارد نمائیم.

اعداد این جدول را بایستی بر اساس رابطه نیروی وان در والس (فرمول ۵-۲۴) و اطلاعات موجود در مورد ثابتهای این رابطه بدست آورد. با توجه به اطلاعات ارائه شده در مرجع [۸۳] مقادیر این ثابتها برای پیوند میان اتم کربن در نانو تیوب و واحد -CH₂- در زنجیره پلیمری به صورت زیر هستند:

$$\varepsilon_{C-CH_2} = 0.004656, \quad \sigma_{C-CH_2} = 0.3825$$

با قرار دادن این ثابتها در فرمول (۵-۲۴) می توان مقادیر نیرو بر حسب جابجایی آنها از حالت تعادل را بدست آورد. همانطور که اشاره شد، فاصله تعادل میان اتمهای کربن در نانوتیوب و واحدهای -CH₂- در زنجیره پلیمری حدود ۰/۴۳ نانو متر در نظر گرفته شد. اما بایستی توجه داشت که در حالت تعادل نیروی وارده بر اتمهای دو طرف این پیوند مقداری غیر صفر است. ولیکن با علم به اینکه پیوندهای وان در والسی، پیوندهای ضعیفی می باشند، مقدار این نیرو در حالت تعادل مقداری ناچیز می باشد.

با وارد کردن اعدادی بزرگتر و کوچکتر از مقدار ۰/۴۳ نانو متر و محاسبه مقادیر نیرو و جابجایی از حالت تعادل، می توان اعداد مورد نیاز برای جدول مورد نظر را بدست آورد. نکته بسیار مهم این است که همانطور که در مباحث پیش اشاره گردید؛ اعداد بدست آمده برای مقادیر نیروی وان در والس منفی اعدادی هستند که بایستی در جدول وارد نمود و علت آن هم این است که نیروی وان در والس نیروی ذاتی بین اتمهاست، حال آنکه اعداد مورد نیاز، نیروهای وارد شده بر اتمهای دو انتهای این پیوند می باشد.

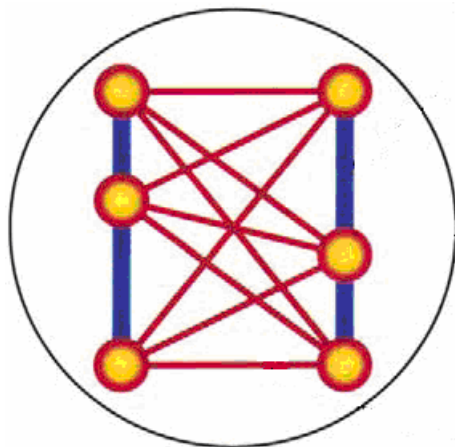
حال جهت برقراری اتصالهای مربوطه گزینه Creat point-to-point wires را انتخاب

می کنیم. بدین صورت که بر روی Creat Wire کلیک می کنیم و در پنجره باز شده در قسمت

Disjoint wires .Point Pairs را انتخاب کرده و بر روی Add کلیک می کنیم. سپس پیوندهای مورد نظر با کلیک بر روی مرکز اتمهای کربن و نودهای مقابل روی ماتریس پلیمری به صورت دو به دو ایجاد می نماییم. با این عمل یک wire section ایجاد می شود . همین روند را تکرار می نماییم تا به انتهای دیگر نانوتیوب برسیم.

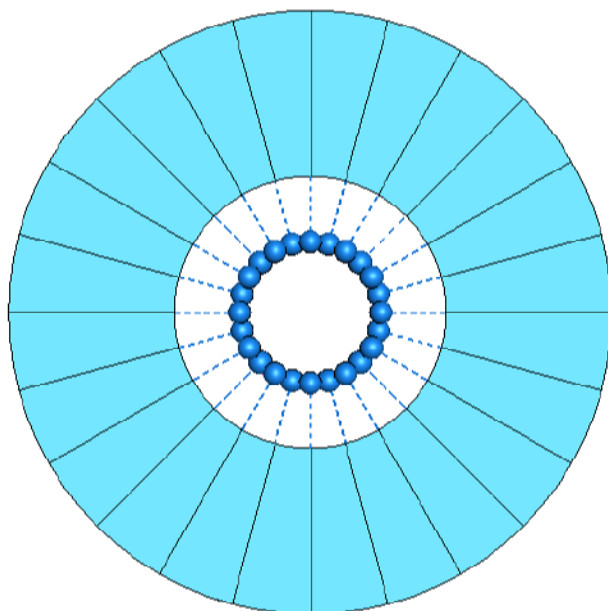
نکته دیگری که در این مقوله مطرح می باشد این است که پیوندهای مورد بحث بایستی در مورد تمامی جفت اتمهایی که فاصله آنها کمتر از 2.5σ است ایجاد شود. اما همانطور که گفته شد با افزایش فاصله میان اتمها، مقادیر این نیروها که ذاتا نیروهای ضعیفی می باشند، بسیار ناچیز شده و قابل اغماض هستند. از طرف دیگر در پروسه ساخت یک نانوکامپوزیت، نانوتیوب به صورت یکنواخت در تمامی نقاط با ماتریس پوشانده نمی شود و این تنها به عنوان یک فرض ایده آل و تقریب مطرح است.

با تفاسیر موجود، با فرض وجود سه پیوند میان هر اتم کربن و نودهای نزدیک تر به این اتم (مطابق شکل ۶-۱۱)، می توان این فرضیه را مطرح نمود که با توجه به اتصال این سه پیوند از یک طرف به مرکز اتم کربن و از طرف دیگر به ماتریس پلیمری (که به صورت ماده ای پیوسته در نظر گرفته شده است)، می توان آنها را در حکم سه فنر موازی در نظر گرفت، که با توجه به جمع شدن ثابت فنرها در حالت موازی برای ایجاد فنری معادل، می توانیم فرض کنیم یک فنر با ثابتی سه برابر تک تک فنرهای منفرد داریم. بنابراین فرضیات مطرح شده را می توان با سه برابر کردن مقادیر نیرو در جدول نیرو- جایجایی جامع عمل پوشاند.



شکل (۶-۱۱) برقراری سه پیوند میان هر اتم کربن در نانو تیوب و نودهای متناظر در ماتریس [۸۰]

در پایان این مرحله جهت ارجاع دادن پیوندهای ایجاد شده به Axial نوع connector، بر روی گزینه Creat Connector Assignment کلیک کرده، wire section ایجاد شده در مرحله قبل را انتخاب و در قسمت Section، connector section ایجاد شده در مرحله پیشین از نوع Axial را بر می‌گزینیم. پس از اتمام این مراحل المان حجمی جایگزین به شکل زیر در خواهد آمد.



شکل (۶-۱۲) نمایی از المان حجمی جایگزین پس ایجاد پیوندهای میان نانو تیوب و ماتریس

در پایان این مرحله جهت قید گذاری های مورد نظر در دو انتهای المان حجمی جایگزین، گزینه Creat Constraint را انتخاب می‌کنیم. در این گام با توجه به اینکه مسئله در دو حالت حل

خواهد شد، نیاز به دو نوع متفاوت قیدگذاری داریم. در نوع اول به منظور بررسی میزان انتقال نیرو و تأثیر فصل مشترک میان نانوتیوب و ماتریس، صفحات انتهایی را به سطوح انتهایی ماتریس در دو طرف آن می چسبانیم، بطوریکه پس از اعمال بارگذاری، نیروی اعمالی به ماتریس و سپس از طریق پیوندهای ایجاد شده میان ماتریس و نانوتیوب، به نانوتیوب منتقل خواهد شد.

در نوع دوم قیدگذاری، صفحات انتهایی را همزمان به سطوح انتهایی ماتریس و اتمهای دو انتهای نانوتیوب می چسبانیم. این موضوع که در مورد آن در مطالب آینده بیشتر توضیح داده می شود، در المان حجمی جایگزین نوع پیوسته رخ می دهد.

۶-۲-۲-۵ اعمال بار گذاری، شرایط مرزی و مش بندی

در گام بعدی جهت اعمال بارگذاری و شرایط مرزی مسئله، از قسمت module وارد Load می شویم. بر روی Creat Load کلیک کرده و step تولید شده در مراحل قبلی و سپس به ترتیب Mechanical و Concentrated Force را انتخاب می کنیم.

حال در صفحه اصلی یکی از نقاط مرجع ایجاد شده بر روی صفحات انتهایی را انتخاب می کنیم. با توجه به حل الاستیک مسئله، به منظور دستیابی به ثابتهای الاستیک المان حجمی جایگزین، بارگذاری به صورت اعمال بار کششی به المان صورت می پذیرد.

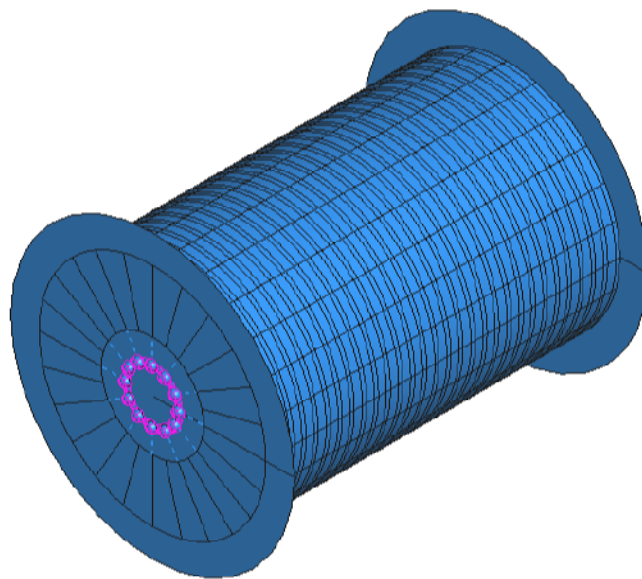
پس از اعمال نیرو جهت تعیین شرایط مرزی متناسب با بارگذاری کششی بر روی Creat Boundry Condition کلیک کرده و به ترتیب در قسمت Step، Initial، در Mechanical گزینه Displacement/ Rotation و در صفحه نمایش نقاط مرجع واقع بر صفحات انتهایی را انتخاب می کنیم. در نقطه اعمال نیرو، تمامی قیدها جز حرکت در راستای بارگذاری و در انتهای دیگر تمامی قیدهای حرکتی را می بندیم.

پس از اعمال بار گذاری و شرایط مرزی در گام بعدی، جهت انجام مش بندی ماتریس پلیمری از قسمت module وارد mesh می شویم. ابتدا بایستی دانه بندی مش مورد نظر را در

Seed Part Instance انجام گردد. باید توجه داشت که انتخاب دانه بندی بسیار ریز حجم محاسبات را بالا می برد. ضمن اینکه ریز کردن دانه بندی از مقداری بیشتر، تأثیری در پاسخ حاصله وارد نمی کند، از طرفی انتخاب دانه بندی درشت نیز از دقت حل می کاهد. لذا بایستی دانه بندی بهینه جهت نیل به اهداف فوق انتخاب گردد.

در Assign mesh Control، با توجه به پارتیشن بندی در مراحل قبلی Structure و در Assign Element type، المان S4R را بر می گزینیم. در پایان بر روی Mesh Part Instance و سپس بر روی Matrix کلیک می کنیم تا مش بندی انجام شود.

در آخرین قسمت شبیه سازی پس از تکمیل عملیات مدل سازی، یک نانوکامپوزیت پلیمری به شکل یک المان حجمی نمونه مطابق شکل (۶-۱۳)، جهت حل مسئله در module، گزینه Job را انتخاب کرده و مسئله را submit می نماییم.



شکل (۶-۱۳) نمونه ای از المان حجمی جایگزین شبیه سازی شده به روش اجزاء محدود

فصل هفتم:

بررسی و استخراج نتایج

۷-۱ روش استخراج نتایج

بعد از اتمام حل نوبت به استخراج نتایج می رسد. جهت بدست آوردن خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری مدل شده نیاز به دستیابی به منحنی تنش - کرنش این ماده داریم تا با استفاده از این منحنی بتوانیم ویژگیهای الاستیک آنرا بدست آوریم. اما با توجه به اینکه استخراج منحنی تنش بر حسب کرنش بصورت مستقیم در نرم افزار ABAQUS میسر نمی باشد، لذا بایستی با استفاده از منحنی نیرو بر حسب جابجایی و روابط مربوطه در مکانیک جامدات، به منحنی تنش - کرنش دست یابیم. با طی کردن مراحل زیر منحنی نیرو- جابجایی بدست خواهد آمد.

پس از اتمام حل در مرحله قبل، در قسمت Module وارد Visualization شده و Creat XY Data و پس از آن ODB Field Output را انتخاب می کنیم. سپس در قسمت Position، وارد Unique Nodal می شویم. حال بایستی داده‌های مربوط به جابجایی نقطه اعمال نیرو که در آن درجه آزادی در راستای اعمال بار آزاد بود را بر حسب نیروهای وارده در همین راستا بدست آوریم. بدین منظور Spatial displacement در تب Variables را انتخاب کرده و سپس وارد تب Elements/Nodes می شویم. نقطه مرجع روی صفحه انتهایی، محل اعمال نیرو را در صفحه نمایش اصلی با کلیک ماوس مشخص کرده و سپس Save می نمائیم.

برای ثبت داده های نیرو به تب Variables بازگشته و Reaction Force را انتخاب کرده و فرایند قبلی را تکرار می نماییم. سپس در قسمت Operate on XY Data، Creat XY Data را انتخاب کرده و با استفاده از گزینه Combine واقع در Oparators، داده های بدست آمده را به منظور بدست آوردن منحنی نیرو- جابجایی با یکدیگر ترکیب می کنیم.

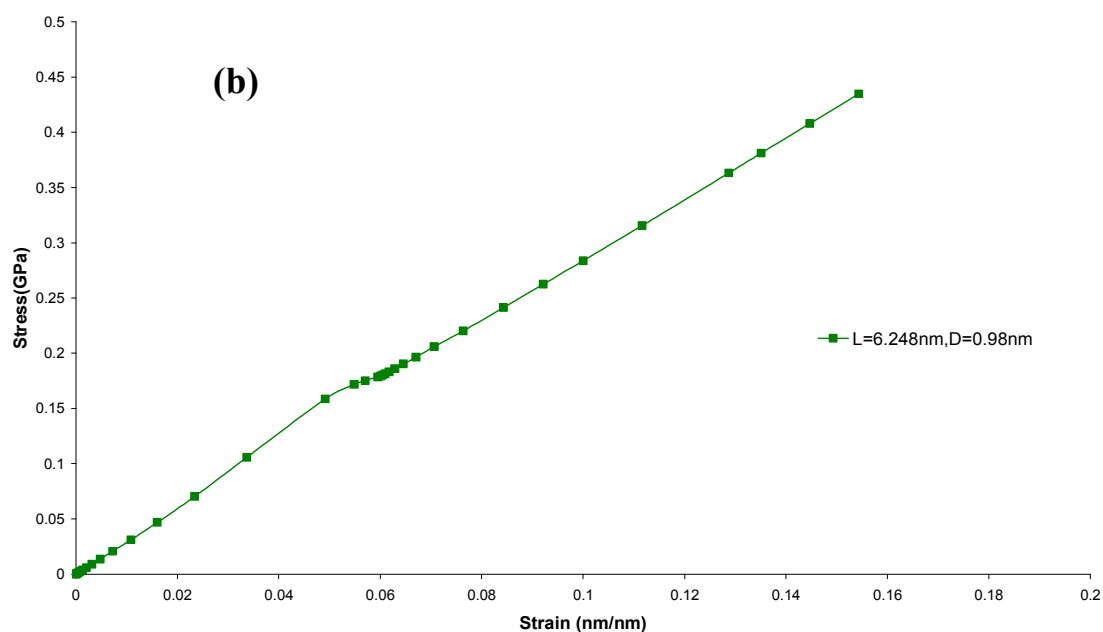
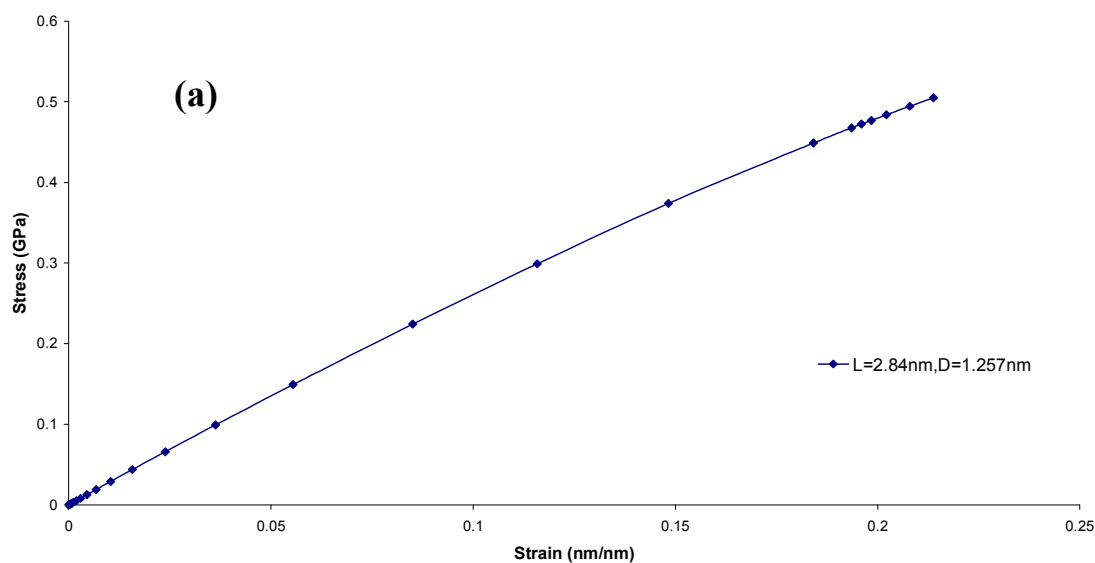
۷-۲ محاسبه خواص مکانیکی الاستیک

در این مرحله به منظور دستیابی به منحنی تنش - کرنش با استفاده از داده های مرحله قبل کافیسیت به صورت زیر عمل نماییم. جهت بدست آوردن مقادیر تنش بایستی مقادیر بدست آمده نیرو را بر سطح مقطع اولیه المان حجمی جایگزین تقسیم نمائیم.

سطح مقطع المان حجمی جایگزین شامل سطح مقطع ماتریس و سطح مقطع نانوتیوب می باشد. سطح مقطع ماتریس به صورت استوانه ای توخالی می باشد که شعاع داخلی و شعاع خارجی آن مشخص است. سطح مقطع نانوتیوب نیز توسط ضخامت دیواره آن بدست می آید، که این مقدار با توجه به اطلاعات ارائه شده در مراجع مختلف 0.34 نانو متر می باشد.

بنابراین با استفاده از روابطی ساده سطح مقطع هر المان حجمی جایگزین که در وضعیتهای مختلف مقداری متفاوت است، به سادگی قابل محاسبه است. مقادیر کرنش نیز با استفاده از داده های بدست آمده در مرحله قبل، با تقسیم کردن مقادیر جابجایی در نقطه اعمال بار بر طول اولیه المان حجمی جایگزین بدست خواهد آمد.

با بدست آمدن مقادیر تنش و کرنش، منحنی های مورد نظر قابل ترسیم هستند. با توجه به اینکه تحلیل انجام شده جهت دستیابی به خواص مکانیکی تحلیلی الاستیک بوده، خواص بدست آمده در این آنالیز نیز ویژگیهای الاستیک نانوکامپوزیت خواهند بود. نمودارهای تنش بر حسب کرنش برای تمامی آرایش ها و طولهای نانوتیوب های زیگزاگ قابل حصول است، که در شکل (۷-۱) نمونه هایی از این منحنی ها ترسیم شده اند.



شکل (۱-۷) منحنی تنش- کرنش حاصل حل الاستیک دو نمونه المان حجمی شامل پلی اتیلن آمورف، در حالت اول بارگذاری (a) نانو تیوب آرایش (۱۶ و ۰) به طول ۲/۸۴ نانو متر (b) نانو تیوب آرایش (۱۲ و ۰) به طول ۶/۲۴۸ نانو متر

مدول یانگ E را برای نمونه های مورد تحلیل را می توان با استفاده از این نمودارهای

تنش- کرنش بدست آورد. بدین صورت که مطابق با تعاریف مقاومت مصالح، E برای هر منحنی به

عنوان شیب قسمت خطی ابتدایی این نمودارها، قابل دستیابی است.

۱-۲-۷ بارگذاری در حالت اول (اعمال نیرو به ماتریس)

همانطور که گفته شد تحلیل خواص مکانیکی المان حجمی جایگزین برای دو حالت انجام شده است. در حالت اول نیروی متمرکز که بر روی یکی از صفحات انتهایی قرار گرفته، تنها بر روی ماتریس پلیمری اعمال می گردد. این وضعیت برای آزمایش کردن توان انتقال بار و حد تحمل فصل مشترک میان نانوتیوب و ماتریس بکار رفته است. مطابق اطلاعات قبلی نیروی اعمالی به ماتریس پلیمری بایستی از طریق پیوندهای وان در والس مدل شده توسط connector، از ماتریس به نانوتیوب منتقل شوند. انتظار می رود با توجه به ماهیت ضعیف نیروهای وان در والس، پیوندهای موجود نقش چندانی را در انتقال بار به نانو تیوب ایفا نمایند. در این قسمت به بررسی این موضوع خواهیم پرداخت.

مطابق با آنچه که گفته شد، مدول یانگ با استفاده از داده های قسمت خطی نمودار تنش - کرنش بدست می آید. بطوریکه نقطه ابتدای این منحنی (۰ و ۰) و نقطه پایانی آخرین نقطه ایست که پس از آن نمودار از حالت خطی خارج می گردد. در حالت تحلیل پلاستیک با توجه به تعریف تنش تسلیم برای ماده، نقطه تغییر شیب نمودار و خروج از حالت خطی به سادگی قابل تشخیص است، اما این وضعیت در مورد تحلیل الاستیک صادق نمی باشد.

مقادیر بدست آمده مدول یانگ، برای طولهای مختلف و آرایشهای متفاوت نانوتیوبهای کربنی، یعنی آرایشهای (۱۲۰)، (۱۶۰) و (۲۲۰)، در ماتریس پلیمری از جنس پلیمر آمورف در جداول (۱-۷)، (۲-۷) و (۳-۷) ارائه شده است.

جدول (۱-۷) مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت در حالت اول بارگذاری برای آرایش (۱۲۰) و طولهای مختلف نانوتیوب

RVE's Length (nm)	Young's Modulus (Gpa)	Aspect Ratio	CNT Volume Fraction (%)	Chirality
1.988	2.78	2.092	9.1	(12,0)
4.188	2.86	4.408	9.1	(12,0)
6.248	2.97	6.576	9.1	(12,0)
8.378	3.07	8.818	9.1	(12,0)
10.508	3.12	11.061	9.1	(12,0)

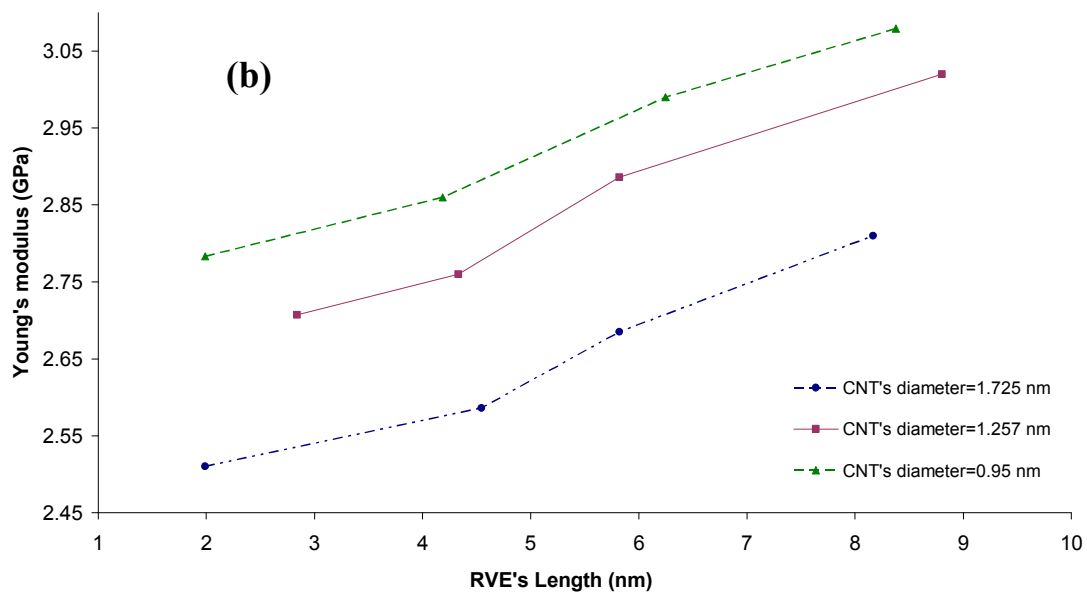
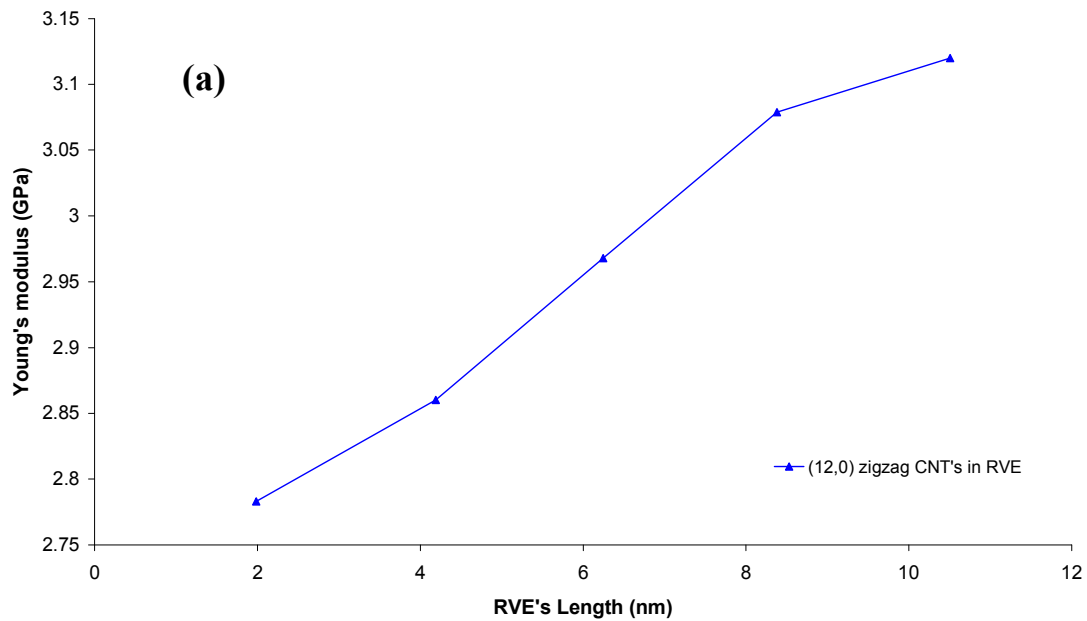
جدول (۲-۷) مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت در حالت اول بارگذاری برای آرایش (۱۶۰ و ۱۶۰) و طولهای مختلف نانوتیوب

RVE's Length (nm)	Young's Modulus (Gpa)	Aspect Ratio	CNT Volume Fraction (%)	Chirality
2.84	2.70	2.259	12.9	(16,0)
4.331	2.76	3.445	12.9	(16,0)
5.822	2.88	4.631	12.9	(16,0)
8.804	3.02	7.004	12.9	(16,0)

جدول (۳-۷) مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت در حالت اول بارگذاری برای آرایش (۲۲ و ۲۲) و طولهای مختلف نانوتیوب

RVE's Length (nm)	Young's Modulus (Gpa)	Aspect Ratio	CNT Volume Fraction (%)	Chirality
1.988	2.51	1.152	20	(22,0)
4.544	2.58	2.634	20	(22,0)
5.822	2.68	3.375	20	(22,0)
8.165	2.81	4.733	20	(22,0)

نتایج بدست آمده در جداول فوق حاکی از آن است که مطابق انتظار، مدول یانگ نانو کامپوزیت نسبت به مدول یانگ پلیمر خالص تفاوت چندانی نکرده است و حتی در برخی موارد کاهش نیز یافته است. این موضوع به ماهیت ضعیف پیوندهای وان در والسی باز می گردد. اما همانطور که ملاحظه می شود با افزایش طول نانوتیوبهای کربنی در مورد هر یک از آرایشهای (۱۶ و ۱۶)، (۲۲ و ۲۲) و (۲۲ و ۲۲) مدول یانگ نیز روندی صعودی را طی می کنند (شکل ۲-۷). علت این مسئله می تواند با افزایش فصل مشترک و در نتیجه افزایش پیوندهای وان در والسی موجود توضیح داده شود، بطوریکه نیروی بیشتری از طریق این پیوندها به نانوتیوب کربنی منتقل شده و در نتیجه نانوتیوب نقش بیشتری را در تحمل بار وارده ایفا خواهد کرد.



شکل (۲-۷) منحنی تغییر مقادیر مدول یانگ نانو کامپوزیت بر حسب طول نانو تیوبهای کربنی در حالت اول بارگذاری (a) نانو تیوب آرایش (۱۲ و ۰) به قطر ۰/۹۵ نانو متر (b) مقایسه سه آرایش (۱۲ و ۰)، (۱۶ و ۰) و (۲۲ و ۰)

تحقیقات سایر پژوهشگران در زمینه بکارگیری نانو تیوبهای کربنی با طولهای کوتاه در ساختار نانوکامپوزیتهای پایه پلیمری، حاکی از نتایج نسبتاً مشابهی است. به عنوان می توان به نتایج بدست آمده در مرجع [۸۶] اشاره نمود. در پژوهش فوق رفتار کششی و شکست نانوکامپوزیت های کربنی توسط روش مکانیک مولکولی بررسی شده و از نانوتیوبهای کربنی آرمچیر (۱۰ و ۱۰) با طول ۶/۲

نانو متر در زمینه پلی اتیلن آمورف استفاده شده است. نتایج این تحقیق به صورت جدولی جهت مقایسه در ذیل آورده شده است. همانطور که ملاحظه می گردد مطابقت نسبتا خوبی میان نتایج بدست آمده و نتایج تحقیق فوق وجود دارد.

جدول (۷-۴) مقایسه مدول یانگ نانو کامپوزیت پلی اتیلن آمورف - نانو تیوب کربنی برای المان ناپیوسته

CNT Volume Fraction (%)	Young's Modulus (Gpa) [86]	Predicted Young's Modulus (Gpa)
6.3386	2.5447	2.68
6.9206	2.8802	2.91

مسئله بسیار مهمی که از داده های بدست آمده در این پایان نامه قابل استنتاج می باشد این است که با افزایش نسبت طول به قطر نانوتیوب، مدول یانگ نیز افزایش محسوسی خواهد یافت. بطوریکه در یک طول تقریبا یکسان، مدول یانگ المان حجمی جایگزین با آرایش نانوتیوب (۱۲۰ و)، نسبت به مقدار مشابه برای المان حجمی با آرایش نانو تیوب (۱۶۰ و)، بزرگتر می باشد. این مسئله به موضوع نسبت وجهی نانوتیوبهای کربنی باز می گردد، به نحویکه با افزایش این نسبت خواص مکانیکی نانوتیوب کربنی نیز بهبود می یابد.

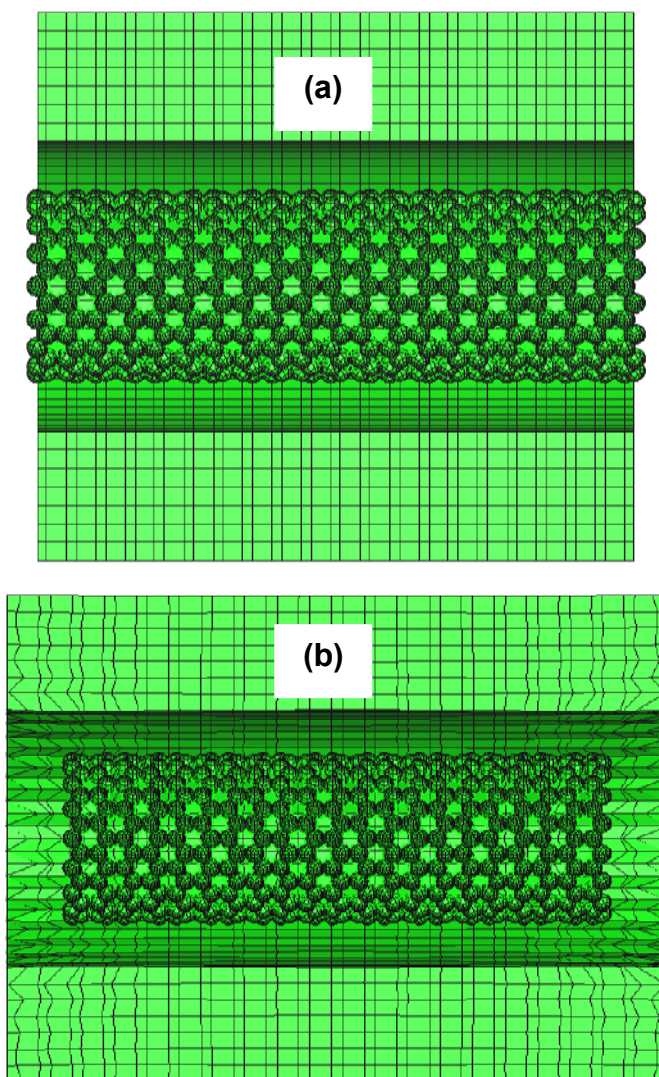
نتیجه دیگری که می توان به آن اشاره نمود، مسئله کسر حجمی نانوتیوب می باشد. با توجه به ابعاد متفاوت انتخابی جهت مدل سازی پلیمر و آرایشهای متفاوت مولکولی نانوتیوبها، کسر حجمی اجزاء تشکیل دهنده هر المان حجمی جایگزین متفاوت خواهد بود. اما در مورد یک آرایش مولکولی، کسر حجمی نانوتیوب و کسر حجمی ماتریس پلیمری در المان حجمی جایگزین مقادیر ثابتی می باشند. آنچه مشهود است این است که با افزایش کسر حجمی نانوتیوب در المان حجمی جایگزین، خواص مکانیکی بهبود می یابند. اما تأثیر این پارامتر، به اندازه تأثیر نسبت وجهی در تغییر خواص مکانیکی نانو کامپوزیت، چشمگیر نیست.

با توجه به نحوه برقراری ارتباط میان اتمهای کربن در نانوتیوب و نودهای مربوطه در ماتریس، این وضعیت قیدگذاری را می توان به نانوکامپوزیتهای ناپیوسته که در آن نانوتیوب و ماتریس غیر هم طول هستند، تشبیه نمود. بطوریکه در هر دو حالت بارهای وارده به ماتریس، از طریق پیوندهای مؤثر وان در والس میان نانوتیوب و ماتریس، به نانوتیوب منتقل می گردد.

مطلب دیگری که از این نتایج قابل استحصال است، این است که در مورد آرایش های مختلف، در نسبت وجهی حدود هفت، تأثیر پیوندهای فصل مشترک نانوتیوب و ماتریس به اندازه ای می رسد که خواص مکانیکی نانوکامپوزیت رو به بهبود می رود. بنابراین اینطور می توان نتیجه گرفت که طول مؤثر یک نانوتیوب در آرایشهای با قطرهای متفاوت که در آن طول مدول یانگ نانو کامپوزیت تقریباً با مدول یانگ پلی اتیلن آمورف برابر می گردد، با در نظر گرفتن نسبت وجهی هفت به صورت تقریبی قابل محاسبه است.

به عنوان مثال در مورد نانوتیوب با آرایش (۲۲۰) و قطر متوسط ۱/۲۲۵ ، طول مؤثر نانوتیوب جهت اثربخش بودن اضافه کردن نانوتیوبهای کربنی در خواص مکانیکی کامپوزیت، حدوداً ۱۳ نانو متر خواهد بود و این موضوع برای موارد دیگر نیز قابل پیش بینی است.

در شکل (۷-۳) ساختار تغییر شکل یافته المان حجمی جایگزین پس از اعمال بارگذاری قابل رؤیت است.

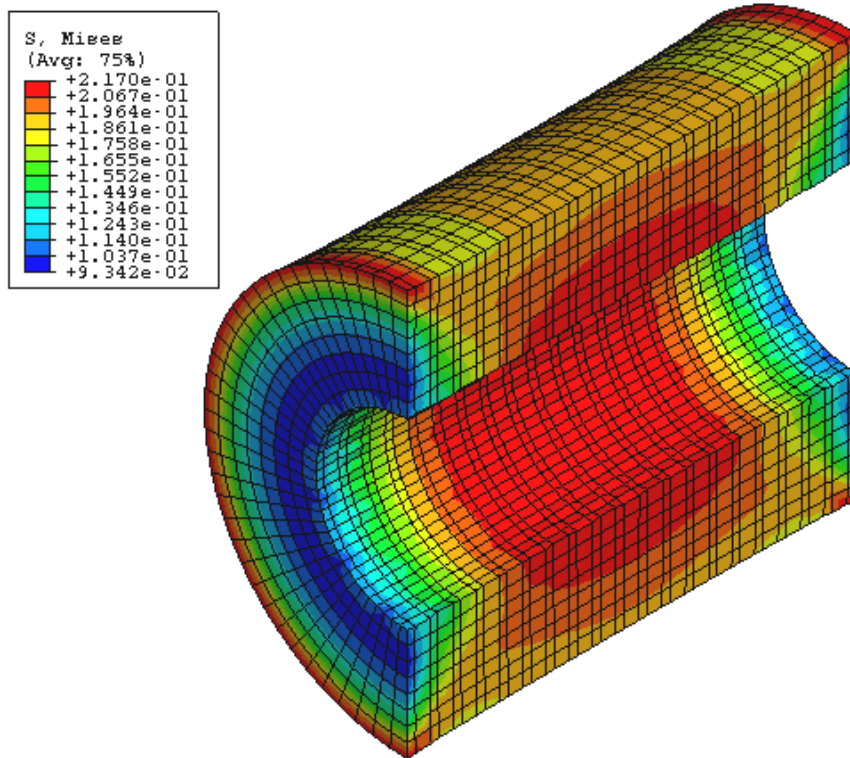


شکل (۳-۷) المان حجمی جایگزین در حالت اول بارگذاری (a) قبل از تغییر شکل (b) پس از تغییر شکل

همانطور که در شکل مشاهده می گردد، توانایی انتقال بار در فصل مشترک به اندازه ای بوده که موجب جابجایی نانوتیوب از محل اولیه خود در المان شده است. اما این نیروها به اندازه ای نبوده که باعث شکسته شدن پیوندهای کوالانسی درون ساختاری نانوتیوب گردد. در واقع اثربخشی نانوتیوب در بهبود ویژگیهای الاستیک نانوکامپوزیت بصورت محدود و ناچیزی بوده و حتی در نسبت های وجهی پائین، این اثر معکوس خواهد بود.

شکل (۴-۷) تنش های فون- میزز وارده به المان حجمی جایگزین را به تصویر می کشد. در شکل جابجایی نوده های مربوط به زنجیره پلیمری از محل خود، بعلت مدول یانگ به مراتب پائین تر

آن نسبت به نانوتیوب کربنی (حدود ۴۰۰ برابر) ملاحظه می شود. بدیهی است این جابجایی ها با افزایش مدول یانگ ماتریس پلیمری، کمتر خواهد شد. تمامی این نتایج در مورد نانوکامپوزیتهای با طول کوتاه فیبرهای نانو ذرات^۱ صادق می باشد.



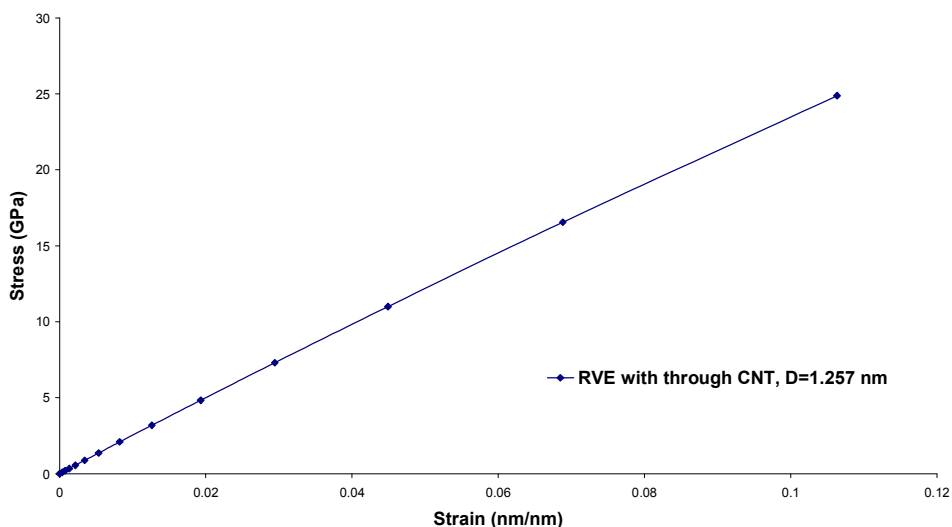
شکل (۴-۷) کانتور تنش وارده (بر حسب GPa) به المان حجمی جایگزین ($L = 4.188 \text{ nm}$, $D = 0.95 \text{ nm}$)

۲-۲-۷ بار گذاری در حالت دوم (اعمال نیرو به ماتریس و نانو تیوب)

در حالت دوم که در آن بار اعمالی بصورت همزمان بر روی ماتریس پلیمری و نانوتیوب وارد می گردد، مسئله به گونه دیگری تغییر می کند. این وضعیت که در مورد نانوکامپوزیتهای با طول بلند فیبرهای نانو ذرات^۲ نیز صادق است، بهبود چشمگیری را در خواص مکانیکی مجموعه نانوکامپوزیت نشان می دهد (شکل ۵-۷). به عنوان مثال در مورد نانوتیوب با آرایش (۱۲۰) افزایش در مدول یانگ به حدود ۴۰ برابر پلی اتیلن غیرساختاری می رسد.

¹ Short Fiber Nanocomposite

² Long Fiber Nanocomposite

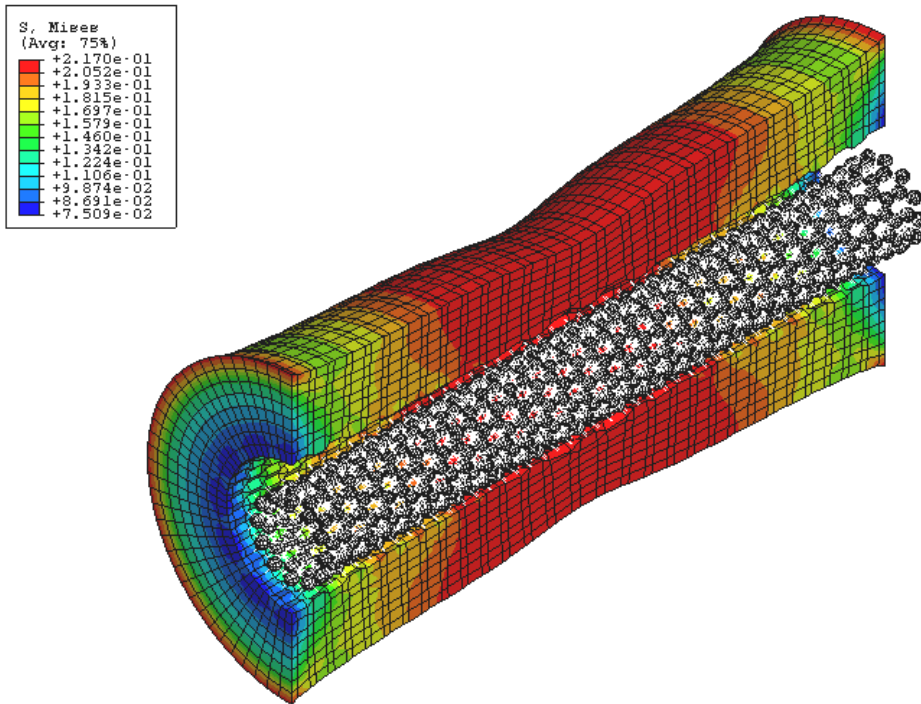


شکل (۵-۷) منحنی تنش بر حسب کرنش در حالت دوم بارگذاری برای نانوتیوب آرایش (۱۶ و ۰)

افزایش ناگهانی در مدول یانگ به بارگذاری مستقیم بر روی نانوتیوب کربنی باز می گردد. به نحویکه قسمت اعظم بار توسط این استحکام دهنده ها تحمل شده و پیوندهای وان در والسی نقش بسیار اندکی در انتقال بار میان نانوتیوب و ماتریس ایفا می کند. پیش بینی می شود با حذف این پیوندها نیز تغییر محسوسی در خواص مکانیکی مجموعه وارد نشود؛ بطوریکه در مورد نانوتیوب با آرایش (۱۲ و ۰)، با حذف این پیوندها مدول یانگ از ۱۱۵ GPa به ۱۱۴ GPa می رسد.

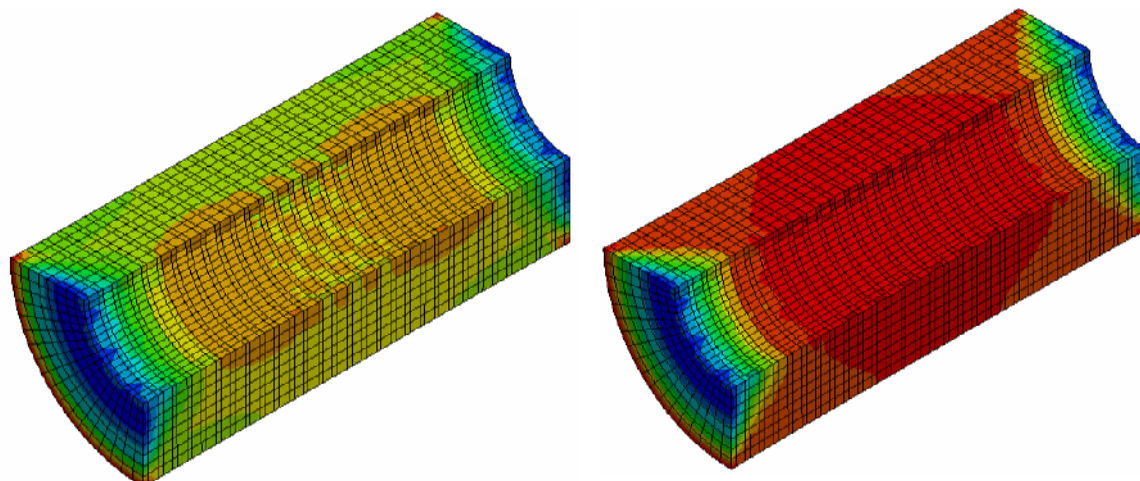
همانطور که گفته شد، در صورت نیاز به تحلیل بهتر نانوکامپوزیت می توان خواص پلاستیک پلی اتیلن آمورف را جهت رسیدن به وضعیت نهایی جسم، پس از خروج از حالت الاستیک و ورود به حالت پلاستیک، در نرم افزار وارد نمود.

شکل (۶-۷) نمونه ای از المان حجمی جایگزین تغییر شکل یافته را در هنگام تغییر شکل پلاستیک ماده نشان می دهد. همانطور که در این شکل مشاهده می شود، به علت جابجایی یکسان نقطه اعمال نیرو در نانوتیوب و پلیمر، نانوتیوب نقش بسزایی در بهبود خواص مکانیکی دارد که این مسئله در مورد نانوتیوبهای با نسبت وجهی بالا، بیشتر نمود پیدا می کند



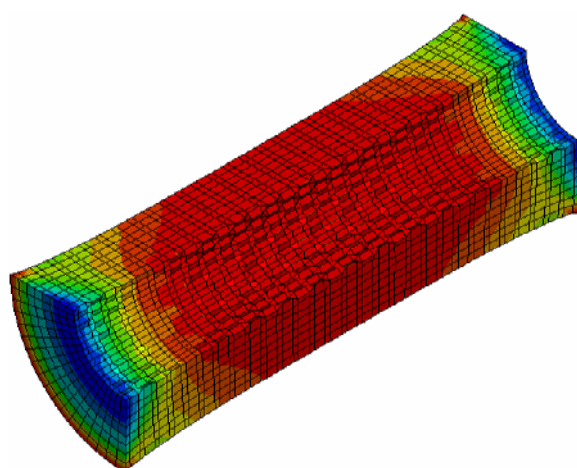
شکل (۶-۷) کانتور تنش فون- میزز (بر حسب GPa) و تغییر شکل پلاستیک در المان حجمی شامل نانو تیوب آرایش (۱۲۰)، در حالت دوم بارگذاری

بنابراین می توان نتیجه گرفت که قسمت اعظم بار توسط نانوتیوب کربنی تحمل شود و ماتریس پلیمری تنها بخش کوچکی در تحمل بار دارد. اما آنچه مسلم است این است که تحمل بار توسط نانوتیوب و ماتریس بصورت مستقل از یکدیگر انجام می شود و این موضوع بدین صورت توجیه می گردد که با حذف پیوندهای میان این دو در فصل مشترک، تغییر محسوسی در خواص مکانیکی برای المان حاصل نمی گردد. تغییر شکل پلاستیک ماتریس نیز در چندین گام متناوب، در شکل (۷-۷) نمایش داده شده است.

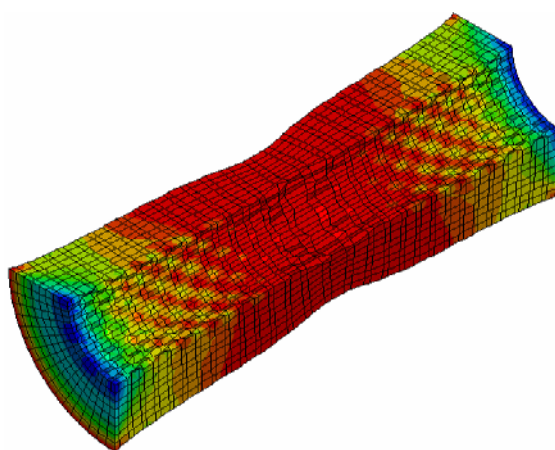


(1)

(2)



(3)



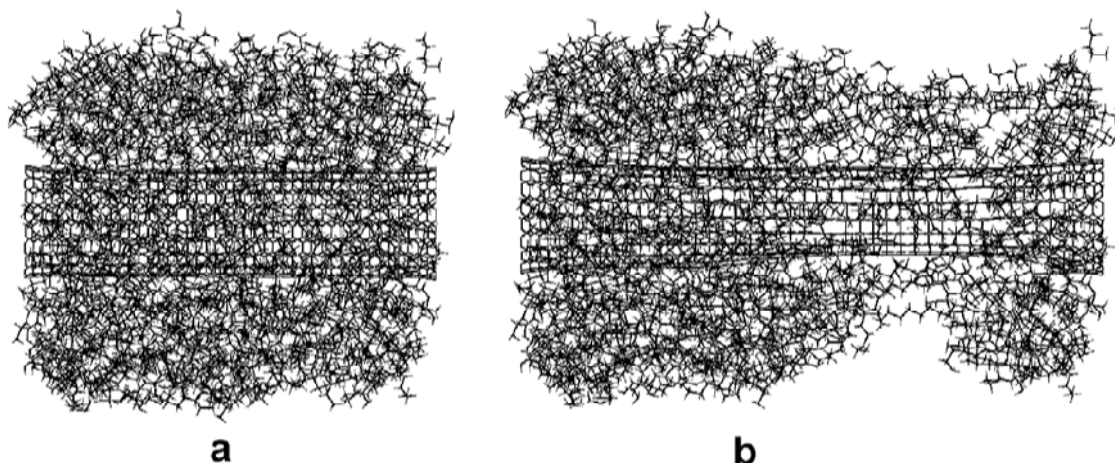
(4)

شکل (۷-۷) تغییر شکل پلاستیک در المان حجمی جایگزین در چهار گام متوالی

با توجه به اینکه المانهای حجمی جایگزین بصورت پیوسته در نظر گرفته شده اند، لذا همانطور که انتظار می رود افزایش طول این المانها و در نتیجه افزایش طول نانوتیوب کربنی، تأثیری در مقادیر مدول یانگ نانوکامپوزیت نخواهد داشت. به عنوان مثال در مورد آرایش (۱۲۰) با افزایش طول المان حجمی و نانوتیوب از $۶/۲۴۸$ نانو متر به $۸/۳۷۸$ نانو متر، مدول یانگ از $۱۱۵/۴$ GPa به $۱۱۶/۱$ GPa افزایش می یابد که این موضوع کاملاً منطقی است. زیرا همانطور که از تعریف المان

حجمی جایگزین بر می آید، با توجه به پیوسته بودن نانوتیوب در ماتریس پلیمری، انتخاب اندازه طولی المان نبایستی تأثیری در خواص مکانیکی بدست آمده داشته باشد.

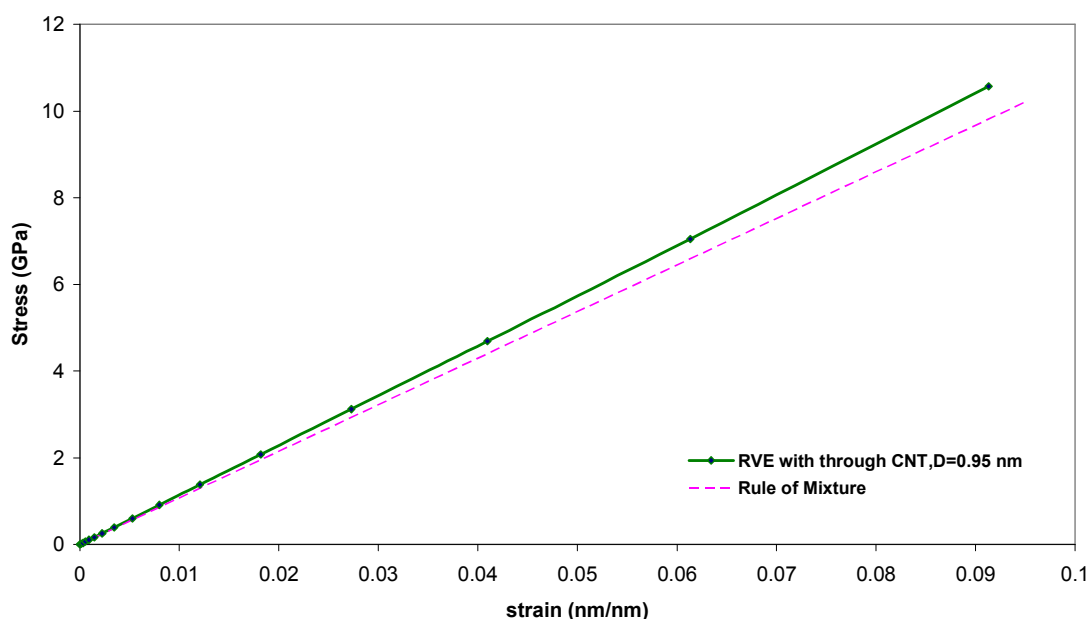
این حالت نیز با مقادیر ارائه شده در مقایسه با نتایج بدست آمده در مرجع [۸۶] از مطابقت خوبی برخوردار است. در این مورد برای یک المان حجمی به ابعاد $4/5\text{nm} \times 4/5\text{nm} \times 4/5\text{nm}$ که نانوتیوبی پیوسته درون آن قرار دارد، مدول یانگ المان نانو کامپوزیت در حدود ۲۵ برابر مدول یانگ پلی اتیلن آمورف افزایش می یابد (با فرض اینکه مدول یانگ نانوتیوب کربنی 860GPa و کسر حجمی آن المان حجمی جایگزین ۷ درصد باشد). شکل (۷-۸) بصورت شماتیک تغییر شکل ساختاری در المان حجمی جایگزین بدست آمده در این تحقیق را نشان می دهد.



شکل (۷-۸) بارگذاری کششی کامپوزیت پلی اتیلن آمورف- نانو تیوب کربنی
(a) ساختار در وضعیت تعادل (b) ساختار پس از شکست نانو تیوب [۸۶]

اما نکته حائز اهمیت این است که در این حال حاضر درک ساختار نانو کامپوزیتهای پایه پلیمری که در آن نانوتیوب های کربنی هم طول با ماتریس باشند، دور از ذهن به نظر می رسد. زیرا ساخت نانوتیوبهای کربنی که از نظر طولی به اندازه کافی بلند باشند، دشواریهایی را از نظر سنتز و تولید به همراه دارد. ساخت این نانوتیوبها در دست بررسی بوده و در حال حاضر طول نانوتیوبهای تجاری موجود تنها از مرتبه میلی متر است.

نتایج بدست آمده در حالت های مختلف بارگذاری را می توان با روش قانون مخلوط ها^۱ مقایسه کرد. همانطور که گفته شد قانون مخلوطها روشی ساده بر اساس تئوری مقاومت مصالح است و در آن فرض بر این است که اجزاء تشکیل دهنده یک جسم کاملاً مستقل از یکدیگر دچار تغییر شکل می شوند. لذا با توجه به فرمولهای (۵-۱۹) و (۵-۲۰)، نتایج این روش را می توان با نتایج روش اجزاء محدود مقایسه نمود. مطابق شکل (۷-۹) ، این قانون در برخی از موارد، تقریب خوبی از خواص مکانیکی مورد نظر را بدست می دهد.

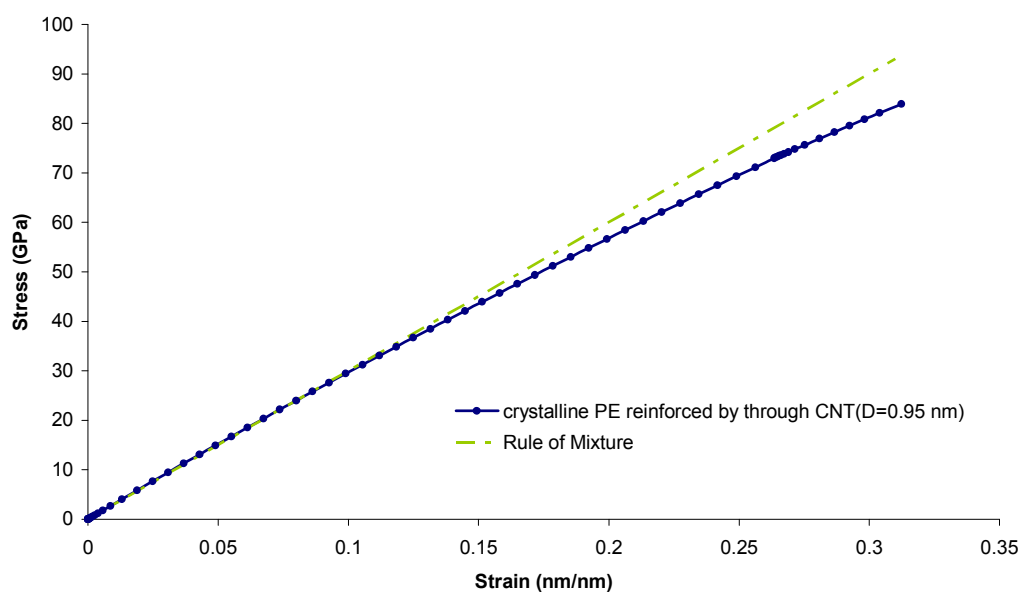


شکل (۷-۹) منحنی تنش - کرنش در وضعیت دوم بارگذاری برای نانو کامپوزیت و مقایسه آن با روش قانون مخلوطها برای نانو تیوب آرایش (۱۲۰)

نتایج بدست آمده در مورد نانو کامپوزیتی که ماتریس آن از نوع پلی اتیلن کریستالی می باشد نیز قابل قبول است. بطوریکه در المانهای حاوی نانو تیوب کربنی با آرایشهای (۱۲۰)، (۱۶۰) و (۲۲۰)، مدول یانگ بدست آمده به ترتیب $289/9$ GPa، $235/86$ GPa و 220 GPa می باشد. نمونه ای از منحنی تنش بر حسب کرنش حاصله برای نانو تیوب آرایش (۱۲۰) در شکل (۷-۱۰) نمایش داده شده است که با نتایج روش قانون مخلوطها نیز مقایسه شده است.

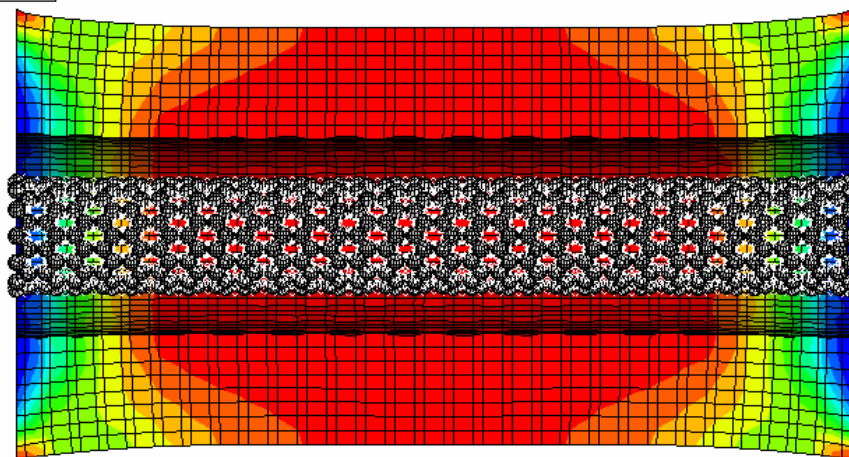
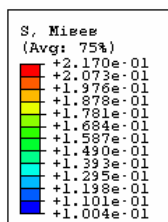
¹ Rule of mixture

افزایش در مدول یانگ نانو کامپوزیت در هر سه مورد قابل مشاهده است، ولیکن این افزایش در مقایسه با نانو کامپوزیت متشکل از پلی اتیلن آمورف چندان محسوس نمی باشد. علت این مسئله، صلبیت بیشتر پلی اتیلن کریستالی می باشد. بصورتیکه در مورد این المان ، مدول یانگ پلی اتیلن ماتریس حدود ۰/۲ مدول یانگ نانو تیوب کربنی است. اما در این وضعیت نیز، با افزایش نسبت وجهی، بهبود در خواص مکانیکی مشهود است.



شکل (۷-۱۰) منحنی تنش - کرنش در وضعیت دوم بارگذاری برای نانو کامپوزیت حاوی پلی اتیلن کریستالی و مقایسه آن با روش قانون مخلوطها

تغییر شکل المان حجمی جایگزین و ماتریس پلیمری به صورت کانتورهای تنش در شکل (۷-۱۱) ملاحظه می گردد.



شکل (۷-۱۱) کانتور تنش فون-میزز (بر حسب GPa) و تغییر شکل پلاستیک نانو کامپوزیت پلی اتیلن کریستالی- نانو تیوب کربنی در وضعیت دوم بارگذاری

این نتایج نیز با داده های بدست آمده در مرجع [۸۶] که در آن بار گذاری به شکل کاملا

مشابهی بوده و ابعاد المان حجمی نیز تقریبا یکسان می باشد، قابل مقایسه است (جدول ۷-۵).

جدول (۷-۵) مقایسه مدول یانگ نانو کامپوزیت پلی اتیلن کریستالی - نانو تیوب کربنی برای المان پیوسته

	CNT Chirality	CNT Volume Fraction (%)	CNT Young's Modulus	$\frac{E(RVE)}{E(CNT)}$
Reference [86]	(10,10)	8.03	860	0.276
This Study	(12,0)	9.1	1150	0.252

فصل هشتم :

نتیجه گیری و پیشنهاد

۸-۱ نتیجه گیری

نتایجی که از این تحقیق می توان بدست آورد را می توان بشرح ذیل خلاصه نمود. در حالت اول بارگذاری که نیروی اعمالی به ماتریس پلیمری وارد شده و سپس از طریق پیوندهای وان در والس به نانوتیوب منتقل می شود، ملاحظه گردید که خواص مکانیکی تنها در مواردی که نسبت وجهی نانو تیوب از حدود عدد هفت بزرگتر بود، بهبود یافتند. این در حالی بود که بخصوص در قطرهای کوچکتر به علت فصل مشترک کم میان نانوتیوب و ماتریس مدول یانگ بدست آمده، حتی از مدول یانگ پلی اتیلن آمورف نیز کمتر بودند. اما در مجموع در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت بهبود چندانی حاصل نگردید، که این مسئله به ماهیت ضعیف پیوندهای وان در والس باز می گردد.

همچنین می توان این حالت را به نانوکامپوزیتهای با فیبرهای ناپیوسته شبیه دانست که در آنها ماتریس و فیبر دارای طولهای غیر یکسان می باشند. به همین منظور نتایج این روش با نتایج بدست آمده در مرجع [۸۶] در جدول (۷-۴) مقایسه گردید و دقت خوبی در آنها ملاحظه شد. به این موضوع نیز بایستی اشاره کرد که در مورد هر آرایش با قطر مشخص، افزایش طول نانوتیوب باعث افزایش مدول یانگ شد.

در حالت دوم، بارگذاری به شکل همزمان بر روی سطوح انتهایی ماتریس و نودهای دو انتهای نانو تیوب کربنی وارد گردید. این حالت را می توان مشابه با نانوکامپوزیتهای پیوسته ای دانست که در آن ماتریس و فیبر هم طول هستند. در این حالت در مدول بدست آمده برای نانوکامپوزیت بهبود محسوسی قابل مشاهده است.

در این وضعیت نیز با افزایش نسبت وجهی، خواص مطلوبتری برای المان بدست می آید. علت این مسئله آن است که قسمت اعظم بار را نانوتیوبهای کربنی تحمل می کنند و ماتریس پلیمری تنها سهم کوچکی از تحمل بار را برعهده دارد و این مسئله به دلیل اختلاف بسیار زیاد مدول یانگ بین نانوتیوب کربنی و ماتریس پلیمری است. با توجه به این توضیحات می توان نتیجه گرفت که نانوتیوب

و ماتریس بار را به صورت مستقل از یکدیگر تحمل می کنند. بطوریکه با حذف پیوندهای وان در والس، تغییر محسوسی در خواص مکانیکی مجموعه وارد نگردید.

اما با توجه به اینکه ساخت نانوتیوبهای کربنی با طولهای بالا مشکل بوده و هنوز در دست بررسی است، لذا این حالت را می توان به عنوان وضعیتی ایده آل در نظر گرفت.

نتایج نسبتاً مشابهی در حالت استفاده از پلی اتیلن کریستالی در ساختار المان حجمی جایگزین بدست آمد. بصورتیکه با اضافه کردن نانو تیوب کربنی به ماتریس پلیمری خالص، خواص مکانیکی بهبود یافتند، اما این بهبود در مقایسه با حالت پیشین چندان قابل ملاحظه نبود. بنابراین می توان به این نتیجه رسید که هر چه اختلاف میان صلبیت ماتریس و فیبرهای تقویت کننده بیشتر باشد، خواص مکانیکی کامپوزیت حاصله مطلوبتر خواهد بود.

۸-۲ پیشنهاد:

با توجه به قابلیت بسیار بالا و انعطاف پذیری مدل اجزاء محدود ارائه شده می توان مطالعات متعددی را با استفاده از مدل نانوکامپوزیت ارائه شده انجام داد که از جمله آنها می توان به موارد زیر اشاره کرد:

۱- می توان از المانهای حجمی با اشکال دیگر جهت مدلسازی نانو کامپوزیت استفاده کرد و تاثیر این تغییر را در خواص مکانیکی مجموعه بررسی نمود.

۲- همچنین می توان تاثیر بارگذاری در جهات دیگر یعنی در جهات عمود بر محور طولی المان حجمی جایگزین را مورد بررسی قرار داده و مدول یانگ و سایر خواص مکانیکی مورد نظر را در جهات مربوطه بدست آورد.

۳- از مدل ارائه شده می توان به منظور پیش بینی خواص مکانیکی سایر پلیمرها با ساختار و زنجیره پلیمری مشابه استفاده کرد.

۴- بعلاوه می توان تاثیر جهت گیری نانوتیوب در ماتریس را مطالعه نمود و تاثیر افزایش کسر حجمی نانوتیوب در المان حجمی را نیز با افزایش تعداد نانوتیوبها در یک المان برای ساختارهای دیگر نانوکامپوزیتها مورد تحلیل قرار داد.

فهرست مراجع

- [١] Cox H. L. (1952) “The elasticity and strength of paper and other fibrous materials”
Brit. J. Appl. Phys., 3, 72, pp 9
- [٢] Dow N. F. (1963). Study of stress near a discontinuity in a filament reinforced composite metal, In: “**Space. Sci. Lab**”, Missile and space Div., General Electric Co. Tech. Report. No R63SD61
- [٣] Rosen B. W. (1964) “**Tensile failure of fibrous composite**”, AIAA J, 2, pp11985
- [٤] Rosen B. W. (1965). “Mechanics of composite strengthening in fiber composite materials”, **American society for metals**, pp 37
- [٥] Lauke B. and Schultrich B. (1983), “Deformation behavior of short-fiber reinforced materials with debonding interfaces” **Comp. Sci. Technol.**, pp111
- [٦] Fu S. Y., You C.Y, Hu .X and Mai .Y .W. (2000) “on the elastic stress transfer and longitudinal modulus of unidirectional multi-short-fiber composite”, **Comp. Sci. Technol.**, 60, pp 569
- [٧] McCullough R. L.(1990), Micro-Model for composite materials - continuous fiber composites, In: “**Delaware Composite Design Encyclopedia**”, Vol. 2, Micromechanical Materials Modeling, Whitney J M, McCullough R L, Editors. Lancaster, PA, Tehcnomic Pub Co.
- [٨] McCullough R. L. (1990), Micro-model for composite materials - Particulate and discontinuous fiber composites. In: “**Delaware Composite Design Encyclopedia**”, Vol. 2, Micromechanical Materials Modeling, Whitney J M, McCullough R L, Editors. Lancaster, PA, Tehcnomic Pu b Co.

- [٩] Odegard G. M., Gates T. S., Nicholson L. M. and Wise K. E.(2002), “Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials” **Comp. Sci. Technol.**, 62, 14, pp1869
- [١٠] Schadler L. S., Giannaris S. C. and Ajayan P. M. (1998) “Load transfer in carbon Nanotube epoxy composite” **Appl. Phys. Lett.**, 73, 26, pp 3842
- [١١] Frankland S. J. V. and Harik V. M. (2003) “Analysis of carbon nanotube pull-out from a polymer matrix” **Surf. Sci.**, 525, pp 103
- [١٢] Wagner H.D. (2000), Mechanical properties of carbon nanotubes and their composites”, **ESCM Newsletter**, 3, pp 2
- [١٣] Odegard G. M., Gates T. S., Wise K. E., Park C. and Siochi E. J.(2003) “Constitutive modeling of Nanotube-reinforced polymer composites”. **Comp. Sci. Technol.**, 63, pp1671
- [١٤] Pipes R. B., Hubert P. (2002) “Helical carbon Nanotube arrays: Mechanical properties”**Comp. Sci. Technol.**, 62, pp 419
- [١٥] Pipes R. B. and Hubert P. (2003) “Scale effect in carbon nanostructures: self-similar analysis” **Nano. Lett.**, 3, pp 1
- [١٦] Li C.Y. and Chou T. W. (2003) “Multiscale modeling of carbon nanotube reinforced polymer composites ”**J. Nanosci. Nanotech.**, 3, 5, pp 423
- [١٧] Li C.Y and Chou T. W. (2003) “A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes” **Int. J. Solid. Struct.**, 40, 10 , pp 2487
- [١٨] Xiao K.W, Zhang L.C, (2004) “The stress transfer efficiency of a single-walled carbon nanotube in epoxy matrix” **J. Mater. Sci.**, 39, pp 4481
- [١٩] Gao X.L., Li K.(2005) “A shear-lag model for carbon nanotube-reinforced polymer composites” **Int. J. Solid. Struct.**, 42, 5, pp 1649
- [٢٠] Liu Y. J. and Chen X .L. (2003) “Evaluations of the effective material properties of carbon nanotube-based composites using a nanoscale representative volume element” **Mech. Mater.**, 35, pp 69

- [۲۱] Liu Y. J. and Chen X. L. (2004) "Square representative volume elements for evaluating the effective material properties of carbon nanotube-based composites", **Comput. Mater. Sci.**, 29, pp 1
- [۲۲] Iijima S. (1991) "Helical microtubules of graphitic carbon" **Nature**, 354, pp56
- [۲۳] Oberlin A., Endo M. and Koyama T. (1976) "Filamentous Growth of carbon Trough Benzene decomposition", **J. Cryst. Growth.** 32, pp 335
- [۲۴] Tserpes K. I., Papanikos P., Labeas G. and Pantelakis S.G. (2007) "Multi-scale modeling of tensile behavior of carbon nanotube-reinforced composites" **Theo. Appl. Frac. Mech.**, 49, 1, pp 51
- [۲۵] Wikipedia, the free encyclopedia, Carbon nanotube
- [۲۶] Popov V. N. (2004) "Carbon nanotubes: properties and application", **Mater. Sci. Eng.**, 43, pp 61
- [۲۷] Thostenson E. T., Li C. and Chou T. W. (2005), "Nanocomposites in context", **Comp. Sci. Technol.**, 65, pp 491
- [۲۸] Tserpes K. I. and Papanikos P. (2005), "Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes", **Composites**, Part B, 36, pp 468
- [۲۹] Iijima S. and Ichaihashi T. (1993) "Single-Shell carbon nanotubes of 1 nm Diameter", **Nature**, 363, pp 603
- [۳۰] Fully and symmetrically investigate and characterize the mechanical and Physical Properties of Nanotube Bucky Paper Reinforced composites. (2001), Florida, **advanced Center for Composite Technologies**
- [۳۱] کریم زاده ف (۱۳۸۴) ، "نانو مواد (خواص، تولید و کاربرد)" ، انتشارات واحد صنعتی اصفهان
- [۳۲] Namilae S., Chandra N. and Shet C. (2004) "Mechanical behavior of functionalized nanotubes" **Chem. Phys. Lett.**, 387, pp 247
- [۳۳] Meyyappan M. (2001) "**Carbon nanotube based nanotechnology**" NASA, Ames Research Center, Moffett Field, CA, AIAA-323

- [۳۴] Wei B. Q., Vajtai R. and Ajayan P. M. (2001) “Reliability and current carrying capacity of carbon nanotubes” **Appl. Phys. Lett.**, 79, 8, pp 1172
- [۳۵] Lourie O. and Wagner H. D. (1998) “Evaluation of young’s modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy” **J. Mater. Res.**, 13, 9, pp 2418
- [۳۶] Yu M. F., Files B. S., Areallia S. and Rouff R. S. (2000) “Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties” **Phys Rev. Lett.** , 84, 24, pp 5552-5555
- [۳۷] Overney G., Zhong W. and Tomanek D. (1993) “Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules”, **Z. Phys. D: At, Mol. Clusters**, 27, 1, pp 93
- [۳۸] Treacy M. M. J., Ebbesen T. W. and Gibson J. M. (1996) “Exceptionally high young’s modulus observed for individual carbon nanotubes” **Nature**, 381, 6584, pp 678
- [۳۹] Tibbetts G. G. (1984) “why are carbon filaments tubular”, **J. Cryst. Growth.** , 66, 3, pp 632
- [۴۰] Lu J. P. (1997) “Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes” **Phys. Rev. Lett.**, 79, 7, pp 1297
- [۴۱] Yao N. and Lordi V. (1998) “Young's modulus of single-walled carbon nanotubes” **J. Appl. Phys.**, 84, pp 1939
- [۴۲] Wong E. W., Sheehan P. E. and Lieber C. M. (1997) “Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength and Technology of nanorods and nanotubes” **Science**, 227, 5334, pp 1971
- [۴۳] Salvetat J. P., Kulik A. J., Bonard J. M. and Briggs G. A. D. “Elastic Modulus of Ordered and Disordered Multiwalled Carbon Nanotubes” **Adv. Matter.**, 11, 2 , pp 161
- [۴۴] Nardelli M. B. and Yakobson B. I. (1998) “Mechanism of strain release in carbon nanotubes” **Phys. Rev. Lett.**, 81, 21, pp 4656

[۴۵] Walters D. A., Ericson L. M., Casavant J. M., Liu J., Colbert D. T., Smith K. A. and Smalley R. E. (1999) "Elastic strain of freely suspended single-wall carbon nanotube ropes", **Appl. Phys. Lett.**, 74, 28, pp 3803

[۴۶] Pan Z. W., Xie S. S., Lu L., Chang B. H., Sun L. F., Zhou W. Y., Wang G. and Zhang D. L. (1999) "Tensile test of ropes of very long aligned multiwall carbon nanotubes" **Appl. Phys. Lett.**, 74, 21, pp 3152

[۴۷] Yao Z., Kane C. L. and Decker C. (2000) "High-field electrical transport in single-walled carbon nanotubes", **Phys. Rev. Lett.**, 84, pp 2941

[۴۸] شکوه فر ع ، (۱۳۸۴) ، "مقدمه ای بر نانو تکنولوژی" ، انتشارات مرکز فرهنگی نشر گستر

[۴۹] اف.ال.ماتیو، (۱۳۸۴) ، "علم و مهندسی مواد مرکب" ، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد

[۵۰] <http://daneshnameh.roshd.ir>

[۵۱] <http://www.iranpolymerinstitute.org>

[۵۲] Moroney M. (2003) "**Polymer News**", pp 8

[۵۳] www.azom.com/details.asp?ArticleID=936

[۵۴] دلشاد خطیبی پ، (۱۳۸۵) "نانو ساختارها و نانو کامپوزیتها، انتشارات دانش پژوهشان جوان"

[۵۴] Kelly A. and Zweben C. "**Comprehensive composite materials**" 1, 268, pp13

[۵۵] Gilman J. W. , Bourbigot S., Davis R., Nydenm M. , Kashiwagi T. , Sheilds J. and Demory W. (2003) "High throughput methods for polymer nanocomposites research" **J. Mater. Sci.**, 38, pp 4451

[۵۶] Gilman J. W. , Bourbigot S., Davis R., Nydenm M. , Kashiwagi T. , Sheilds J. and Demory W. (2003) "High throughput methods for polymer nanocomposites research" **J. Mater. Sci.**, 38, pp 4451

[۵۷] Kenny J. M., Torre L., Valentini L., Biagiotti J. and Puglia D.(2002) "**Processing structure and properties of polymer matrix nanocomposites for industrial applications**" Materials engineering center, University of Perugia, China-EU Forum on Nanosized Technology, Beijing, P. R.

- [۵۸] Shaffer M. S. P., Fan X and Windle A. H. (1988) "Dispersion and packing of carbon nanotubes", **Carbon**, 36, 11, pp 1603
- [۵۹] Park C., Ounaies Z., Watson k. A., Crooks R. E., Smith J., Lowther S. E., Connell J. W. , Siochi E. J., Harrison J. S., Terry L. and Claire S. (2002) "Dispersion of single wall carbon nanotubes by In-Situ polymerization under sonication" **Chem. Phys. Lett.**, 634, pp 303
- [۶۰] Mai Y. W. and Zhong Z. (2006), "**Polymer nanocomposites**", Woodhead Publishing Limited, pp 329
- [۶۱] [۶۱] عسکری م، (۱۳۸۶) ، پایان نامه کارشناسی ارشد، "مدلسازی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله های کربنی"، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران پردیس
- [۶۲] Valavala P. K. and Odegard G. M., (2005), "Modeling Techniques for determination of mechanical properties of polymer nanocomposites", **Rev. Adv. Mater. Sci.**, 9, pp 34
- [۶۳] Thostenson E. T and Chou T. W. (2003) "On the elastic properties of carbon nanotube-based composites: modelling and characterization" **J. Phys.**, 36, pp 573
- [۶۴] Lagoudas D .C. and Seidel G. D. (2004) "**Effective Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites**", In: American Institute of Aeronautics and Astronautics Conference, Palm Springs, CA
- [۶۵] Bradshaw R. D., Fisher F. T. and Brinson L. C. (2003) "Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites—II: modeling via numerical approximation of the dilute strain concentration tensor" **Comp. Sci. Technol.**, 63, 11, pp 1705
- [۶۶] Fisher F. T., Bradshaw R. D. and Brinson L. C. (2003) "Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites—I: Modulus predictions using effective nanotube properties" **Comp. Sci. Technol.**, 63, 11, pp 1689
- [۶۷] Chen X. L. and Liu Y. J. (2005) "An advanced 3D boundary element method for characterizations of composite materials" **Engng. Anal. Bound. Elem.**, 29, 6, pp513

- [٤٨] Ingber M. S. and Papathanasiou T .D. (1997) “A parallel-supercomputing investigation of the stiffness of aligned, short-fiber-reinforced composites using the Boundary Element Method” **Int. J. Numer. Mech. Engng.**, 40, pp 3477
- [٤٩] Liu Y. J., Nishimura N., Otani Y., Takahashi T., Chen X. L. and Munakata H.(2004) “Large-scale modeling of carbon-nanotube composites by a fast multipole boundary element method ”, **ASME. J. Appl. Mech.**, 72, pp 115.
- [٥٠] Liu Y., Nishimura N. and Otani Y. (2005) “Large-scale modeling of carbon-nanotube composites by a fast multipole boundary element method” **Comp. Mater Sci.**, 34, 2 , pp173
- [٥١] Cornell W. D., Cieplak P., Bayly C. I., Gould I. R., Merz K. M., Ferguson D. M., Spellmeyer D. C., Fox T., Caldwell J. W. and Kollman P. A. (1995) “A Second Generation Force-Field for the Simulation of Proteins, Nucleic-Acids, and Organic-Molecules”**J. Ame.r Chem. Soc.**, 117, pp 5179
- [٥٢] Frankland S. J. V., Harikb V. M., Odegard G. M., Brennerc D. W. and Gatesd T. S. (2003) “The stress–strain behavior of polymer–nanotube composites from molecular dynamics simulation” **Comp. Sci. Technol.**, 63, pp 1655
- [٥٣] Wei K. H. and Tien Y. I. (2002) “The effect of nano-sized silicate layers from montmorillonite on glass transition, dynamic mechanical, and thermal degradation properties of segmented polyurethane”, **Nanoletters**, 2 , pp 647
- [٥٤] Liang Z., Gou J., Zhang C., Wang B. and Kramer L. (2004) “Investigation of molecular interactions between (10, 10) single-walled nanotube and Epon 862 resin/DETDA curing agent molecules”, **Mater. Sci. Engng.** 365, pp 1345
- [٥٥] Ford M. H. (2004), “On the mechanical properties and phase behavior of silica: A simple model based on low coordination and strong association”, **J. Chem. Phys.**, 121, pp 8415
- [٥٦] Chui C. and Boyce M. C. (1999) “Monte Carlo Modeling of Amorphous Polymer Deformation: Evolution of Stress with Strain”, **Macromolecules**, 32, 11, pp 3795

- [٧٧] Mylvaganam K. and Zhang L. C. (2004), “Chemical Bonding in Polyethylene-Nanotube Composites: A Quantum Mechanics Prediction” **J. Phys. Chem.**, 108, pp5217
- [٧٨] Hu N., Fukunaga H., Lu C., Kameyama M. and Yan B.(2005) “ Prediction of elastic properties of carbon nanotube reinforced composites” **Proc. R. Soc.**, 461, pp 1685
- [٧٩] Li C. and Chou T. W. (2006) “Multiscale modeling of compressive behavior of carbon nanotube/polymer composites” **Comp. Sci. Technol.**, 66, pp 2409
- [٨٠] Li C. and Chou T. W.(2003) “Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and The effect of van der Waals forces”**Comp. Sci. Technol.**, 63, pp 1517
- [٨١] Li C. and Chou T. W. (2004) “Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach” **Mech. Mater.** 36, pp 1047
- [٨٢] Hu N., Nunoya K., Pan D., Okabe T. and Fukunaga H. (2007) “Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes”, **Intl. J. Sol. Struct.**, 44, pp 6535
- [٨٣] Zhang Y. C., Chen X. and Wang X.(2008) “Effects of temperature on mechanical properties of multi-walled carbon nanotubes” **Comp. Sci. Technol.**, 68, pp 572
- [٨٤] Lu W. B., Wu J., Song J., Hwang K .C., Jiang L. Y. and Huang Y.(2008) “ A cohesive law for interfaces between multi-wall carbon nanotubes and polymers due to the van der Waals interactions” **Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.** , 197, pp 3261
- [٨٥] Parvaneh V., Shariati M. and Majd Sabeti M. (2009), “Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs Via a structural mechanics approach” **Eur. J. Mech.**, In Press
- [٨٦] Mokashi V. V., Qian D. and Liu Y. (2007) “A study on the tensile response and fracture in carbon nanotube-based composites using molecular mechanics” **Comp. Sci. Technol.**, 67, pp 530

Abstract

Carbon nanotubes (CNTs) possess extremely high stiffness, strength and resilience, and may provide the ultimate reinforcing materials for the development of nanocomposites

In this study, the effective mechanical properties carbon of nanotube-reinforced composites is evaluated using a 3-D nanoscale representative volume element (RVE) based on continuum mechanics and using the finite element method (FEM). The systems being investigated consist of amorphous as well as crystalline polyethylene (PE) composites with embedded zigzag single-walled CNTs.

The nanotube is modeled at the atomistic scale, and the matrix deformation is analyzed by the continuum finite element method. The nanotube and polymer matrix are assumed to be bonded by van der Waals interactions at the interface. Van der Waals forces between carbon atoms in CNT and nodes in polymer matrix are simulated by using the nonlinear springs.

For testifying the effect of the interface between CNT and matrix, different boundary conditions and load cases are applied on the RVE. In one case, uniform stress is imposed, on the finite element nodes at the top surface of the matrix and the results show degradation in Young's modulus at low aspect ratios. In ther other case, uniform stress is imposed on CNT end and matrix nodes simultaneously. The results show moderate improvement in predicted properties.

Keywords:

Nanocomposite - Carbon nanotube (CNT) - Finite element method – Polymer matrix – Interface – Van der Waals force



Shahrood University of Technology

Faculty of Mechanic

**Determination of the Young's modulus for polymer
nanocomposites using Finite Element Method**

Kian Hessari

Supervisor:

Dr. Mahmoud Shariati

July 2009