



مدل سازی چند مقیاسی شکست در نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانولوله های کربنی سالم و عامل دار شده

امیرحسین اثباتی^۱، سعید ایرانی^{۲*}

۱- دانشجوی دکترا، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران
 ۲- دانشیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران
 * تهران، صندوق پستی ۴۴۱۶-۱۵۸۷۵، irani@kntu.ac.ir

چکیده

در این تحقیق تلاش شده است، عوامل موثر بر خواص مکانیکی و مکانیزم شکست نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانولوله های کربنی سالم و عامل دار شده مورد ارزیابی قرار گیرد. مدل سازی در دو فاز نانو و میکرو انجام شده که اثر نقص های ساختاری حفره و پیوندهای کوالانسی ناشی از فرآیند عامل دار کردن نانولوله ها در فاز نانو و نحوه توزیع، شکل و انحنای نانولوله ها در فاز میکرو نیز بررسی شده است. مشاهده می شود که با توجه به عواملی همچون توزیع، اعوجاج و عامل دار شدن نانولوله های کربنی، امکان کاهش یا افزایش استحکام نانوکامپوزیت های پلیمری در مقابل پلیمر خالص وجود دارد. همچنین عامل دار کردن نانولوله های کربنی باعث بهبود استحکام نانوکامپوزیت پلیمری شده و شکنندگی آن ها را کاهش می دهد. از سوی دیگر، نقص های ساختاری ایجاد شده در پروسه عامل دار کردن نانولوله های کربنی، باعث کاهش مدول الاستیسته نانوکامپوزیت می شود. همچنین چنانچه انحنا نانولوله های کربنی تقویت کننده نانوکامپوزیت پلیمری افزایش یابد، اثر بهبود دهنده عامل دار کردن نانولوله های کربنی کاهش چشمگیری می یابد و به خواص نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله های سالم نزدیک می شود.

اطلاعات مقاله

دریافت: ۹۵/۱/۲۸

پذیرش: ۹۵/۳/۱۳

کلیدواژگان:

نانوکامپوزیت پلیمری
 مدل سازی چندمقیاسی
 نانولوله کربنی عامل دار و سالم
 حل تحلیلی و اجزای محدود

Multiscale modeling of fracture in polymer nanocomposite reinforced by intact and functionalized CNTs

Amir Hossein Esbati, Saied Irani*

Faculty of Aerospace, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran
 *P.O.B. 15875-4416, Tehran, Iran, irani@kntu.ac.ir

Keywords

Polymer nanocomposite
 Multiscale modeling
 Functionalized and intact
 CNTs
 Analytical and finite element
 methods

Abstract

In this research, mechanical properties and fracture mechanism of polymer nanocomposite reinforced by carbon nanotubes (CNTs) has been evaluated employing multiscale modeling method. Effect of CNTs' structural defects and covalent bonds created during functionalization process are investigated in nanoscale analysis and the effect of CNTs' dispersion, curvature and volume fraction are studied in microscale analysis. In microscale modeling both analytical and finite element methods are employed to investigate mechanical properties and their results are compared. It has been investigated that, according to mentioned parameters such as CNTs' dispersion, volume fraction, functionalization and curvature in polymer matrix, both increase and decrease in ultimate strength of polymer nanocomposite are possible with respect to pure polymer. Moreover, polymer nanocomposite's ultimate strength is increased and fracture brittleness is decreased significantly using functionalized CNTs. On the other hand, the CNT's structural defects caused during functionalization process decrease polymer nanocomposite Young's modulus. It also has been demonstrated that by increasing curvature, the improving effects of functionalized CNTs on mechanical properties of polymer nanocomposite, decrease obviously.

۱- مقدمه

اعصار بشری را بر اساس این مواد مانند عصر سنگ و عصر آهن نام گذاری کرده اند. بنابراین بخش عمده ای از تلاش محققان در ادوار مختلف تلاش برای توسعه این مواد بوده که در چند دهه اخیر به صورت ترکیب مواد مختلف برای

بدون شک یکی از پارامترهای موثر در پیشرفت جامعه بشری مواد مورد استفاده در صنایع مختلف آن می باشد. اهمیت این موضوع تا آنجا می باشد که

Please cite this article using:

Esbati, A. H. and Irani, S., "Multiscale modeling of fracture in polymer nanocomposite reinforced by intact and functionalized CNTs", In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 4, No. 1, pp. 35-46, 2017.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده نمایید:

بیشتر تحقیقات معطوف به ارزیابی مدول الاستیسیته و ضریب پواسون می‌گردد. دلیل اصلی آن است که مدل‌سازی خطی مواد تشکیل دهنده نانوکامپوزیت، پاسخ خوبی برای ارزیابی در محدوده خطی داده و تحلیل فرآیند شکست در این مواد نیازمند توانایی در اعمال تغییر خواص مواد در محدوده غیرخطی آنها می‌باشد. با این حال، لی و چو^۲ بدون در نظر گرفتن محدوده غیرخطی مواد تشکیل دهنده، یکی از محدود مراجعی می‌باشد که شکست در نانوکامپوزیت را در ابعاد میکرو به صورت دو بعدی بررسی نموده است [۲۰]. همچنین برخی از تحقیقات اثر فاز واسط را بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت در مدل‌سازی لحاظ نموده‌اند و تیر معادل را به صورت یک تیر ایزوتروپ، با مدول الاستیسیته نانولوله کربنی مدل نموده‌اند که با توجه به تفاوت غیرقابل انکار خواص طولی و عرضی تیر معادل، این فرض پاسخ صحیحی نخواهد داشت [۲۰، ۲۱]. علاوه بر مدل‌سازی غیرخطی، توزیع مناسب نانولوله‌ها در ماتریس پلیمری، تاثیر بسزایی بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها دارد. به طور مثال، اثر کاهنده انحنا و اعوجاج نانولوله‌ها و تجمع آن‌ها از جمله عواملی می‌باشد که تاثیر قابل توجهی بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها دارد. با این حال با توجه به مشکلاتی که ایجاد اعوجاج نانولوله‌های کربنی در فرآیند المان‌بندی ایجاد می‌کند، بر اساس مطالعات نویسندگان مقاله، تمامی مدل‌سازی‌های صورت گرفته با روش مکانیک پیوسته و اجزای محدود، از این اعوجاج صرف‌نظر کرده و با یک مدل ساده تکرار شونده را برای توزیع نانولوله‌ها در نظر گرفته‌اند.

نویسندگان این تحقیق، پیش از این مرجعی که مدل‌سازی غیرخطی نانوکامپوزیت پلیمری را به منظور بررسی فرآیند شکست در المان حجمی مبین^۳ (RVE) در ابعاد میکرو را با در نظر گرفتن توزیع احتمالاتی و اعوجاج در نانولوله‌ها مورد مطالعه قرار داده باشد را نیافته‌اند. در این تحقیق تلاش شده، موارد یاد شده در مدل‌سازی نانوکامپوزیت لحاظ گردد و امکان بررسی فرآیند شکست برای این مدل سه‌بعدی فراهم گردد. همچنین بر اساس مطالعات نویسندگان مقاله، هیچ یک از تحقیقات پیشین، اثر پیوندهای کوالانسی بین نانولوله و ماتریس پلیمری را در اثر عامل‌دار کردن نانولوله‌های کربنی در این ابعاد بررسی ننموده است که در این تحقیق تلاش شده تاثیر این پیوندها نیز بر روی خواص مکانیکی المان حجمی مبین در ابعاد میکرو مورد ارزیابی قرار گیرد.

این تحقیق دارای سه فاز اصلی مدل‌سازی در ابعاد نانو، مدل‌سازی اجزای محدود در ابعاد میکرو و حل تحلیلی در ابعاد میکرو می‌باشد. در بخش دوم مقاله، مدل‌سازی اجزای محدود در ابعاد نانو انجام می‌شود، که در آن نانولوله کربنی، ماتریس پلیمری و فاز واسط با استفاده از اجزای محدود، مدل می‌گردند. همان‌طور که در شکل ۱ (الف) نشان داده شده است، با استفاده از این مدل‌سازی، خواص تیر معادل به دست می‌آید (شکل ۱ (ب)). بر این اساس در بخش سوم که مدل‌سازی در ابعاد میکرو می‌باشد، نانولوله، فاز واسط و پلیمر اطراف آن، با تیر معادل به دست آمده در فصل دوم جایگزین می‌شوند (شکل ۱ (ج)). در زیر بخش ۳-۱، نحوه مدل‌سازی اجزای محدود RVE در ابعاد میکرو، با استفاده از خواص تیر معادل، تشریح می‌گردد. همچنین، یک روش تحلیلی برای مدل‌سازی در ابعاد میکرو برای صحت‌گذاری نتایج مدل‌سازی اجزای محدود در زیر بخش ۳-۲ تشریح شده است. در بخش‌های ۴ و ۵ نیز، نتایج حاصله از مدل‌سازی‌های ابعاد میکرو، برای حالت‌های متفاوت توزیع تیرهای معادل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

دستیابی به خواص موردنظر معطوف شده است. از سال ۱۹۹۱ که نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما^۱ کشف شده است [۱]، این ماده شگفت‌انگیز به دلیل دارا بودن نسبت بالای استحکام به وزن [۲]، نسبت منطری بالا [۳] و خواص استثنایی حرارتی و الکتریکی [۴، ۵] به عنوان بخشی از مواد آینده در نظر گرفته می‌شود. از این رو تلاش برای به دست آوردن خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی به صورت مجزا [۳، ۶، ۷] و یا با ترکیب با مواد دیگر توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف داشته است [۸]. یکی از مهم‌ترین کاربردهایی که برای این ماده شگفت‌انگیز در نظر گرفته شده است، ترکیب با ماتریس پلیمری می‌باشد که در ادامه بسط داده خواهد شد [۲].

خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری از منظرهای متفاوت قابل ارزیابی می‌باشد. به طور مثال، با اضافه نمودن ۰/۱٪ جرمی نانولوله کربنی به ماتریس پلیمری، خواص رسانایی پلیمر به صورت چشمگیری افزایش می‌یابد و این به معنای در دسترس بودن یک ماده رسانای منعطف می‌باشد که می‌توان برای تولید انواع حسگرهای بیومکانیکی و مکانیکی مورد استفاده قرار گیرد. از دیدگاه خواص مکانیکی، هردو اثر مثبت و منفی نانولوله‌های کربنی بر روی استحکام و سفتی مواد پلیمری گزارش شده است. برخی از مطالعات کاهش خواص مکانیکی در ماتریس پلیمری را در اثر اضافه نمودن نانولوله به آن را گزارش کرده‌اند [۵، ۹، ۱۰]. برخی از مطالعات بهبود مدول الاستیسیته را نشان داده ولی بهبودی در استحکام گزارش نشده است [۱۱، ۱۲]. در مقابل، مطالعات بسیاری بهبود در خواص مکانیکی این مواد را در اثر اضافه نمودن نانولوله‌های کربنی به ماتریس پلیمری مشاهده نموده‌اند [۴، ۱۳-۱۵]. از این رو مشاهده می‌شود، خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تابع عواملی همچون نحوه و میزان تعامل بین نانولوله و ماتریس پلیمری، درصد حجمی نانولوله و نحوه توزیع آن در ماتریس پلیمری می‌باشد. با توجه به آنکه مدل‌سازی ریاضی برای بررسی میزان تاثیر هر یک از این عوامل می‌تواند بسیار موثر باشد، در این تحقیق تلاش شده، با بکارگیری این ابزار، برخی از عوامل موثر بر خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله کربنی مورد ارزیابی قرار گیرد.

در مدل‌سازی نانو مواد به طور معمول، محقق باید بین در نظر گرفتن جزئیات موثر بر خواص مکانیکی و توانایی برای مدل‌سازی در ابعاد بزرگ‌تر یکی را انتخاب نمایند. به طور مثال، در مدل‌سازی به روش دینامیک مولکولی، جزئیات در همکنش بین اتم‌های نانولوله کربنی و ماتریس پلیمری بسیار دقیق قابل ارزیابی است. با این حال با توجه به هزینه بالای مدل‌سازی عددی این روش، مدل‌سازی در ابعاد نانو و محدوده زمانی پیکو ثانیه محدود شده است. روش‌های میکرومکانیکی نیز از بخش عمده‌ای از جزئیات در همکنش بین نانولوله‌های کربنی و ماتریس پلیمری، همچنین اثر عواملی چون فرآیند شکست با توجه به جزئیات توزیع نانولوله‌ها صرف‌نظر می‌کنند. بر این اساس می‌توان نتیجه گرفت، مدل‌سازی چند مقیاسی، بهترین روش برای مدل‌سازی و تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری می‌باشد.

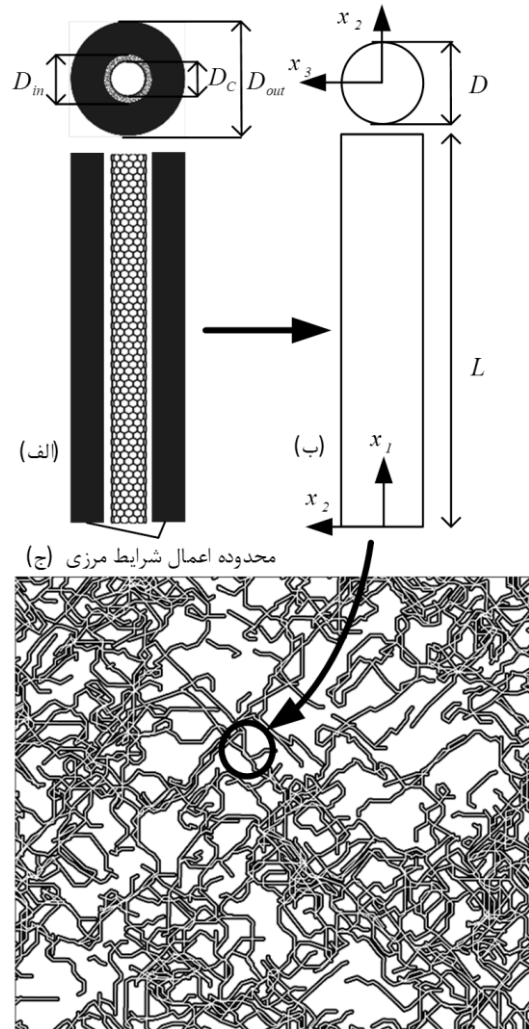
روش‌های چند مقیاسی متفاوتی برای ارزیابی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها مورد استفاده قرار گرفته است [۱۶-۱۹]. به طور معمول این روش‌ها از مدل‌سازی در ابعاد نانو با استفاده از مکانیک پیوسته و دینامیک مولکولی آغاز شده و از نتایج حاصله در ابعاد نانو، برای مدل‌سازی در ابعاد میکرو و بالاتر استفاده می‌شود. با این حال مشاهده می‌گردد مطالعات بسیار محدودی استحکام مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها را مورد ارزیابی قرار داده‌اند و

2. Li and Chou
3. Reprehensive volume element

1. Ijima

۲- مدل‌سازی در ابعاد نانو

خواص نانولوله‌های کربنی به بسیاری از عوامل وابسته است که تنها در زمانی که مدل‌سازی در ابعاد نانو انجام می‌گردد قابل مشاهده می‌باشند. این عوامل به‌طور معمول پارامترهای مربوط به ساختار اتمی مشبک نانولوله‌های کربنی مانند، اندیس کایرال^۱، ابعاد و نسبت منظری، وجود نقص ساختاری، نوع و توزیع آن‌ها می‌باشند.



شکل ۱ ارتباط مدل‌سازی در ابعاد نانو به ابعاد حجمی مبین در ابعاد میکرو، (الف) مدل اجزای محدود در ابعاد نانو، (ب) دستگاه مختصات المان تیر معادل

نانولوله سالم و عامل‌دار نشان داده شده است. پیوند بین اتم‌های کربن در نانولوله با به‌کارگیری پتانسیل بین اتمی مورس^۲ و با استفاده از المان غیرخطی تیر BEAM189 تعریف شده است. تغییرات نیروی محوری، ممان خمشی و پیچشی به‌صورت تابعی از تغییر طول پیوند، انحناء و زاویه پیچش به ترتیب در روابط (۱)، (۲) و (۳) نشان داده شده است.

$$F_c(\Delta r_c) = 2\beta D_e [1 - e^{-\beta(\Delta r_c)}] e^{-\beta(\Delta r_c)} \quad (1)$$

$$M_c(\Delta \theta_c) = k_\theta [1 + 3k_{\text{sextic}}(\Delta \theta_c)^4] \quad (2)$$

$$T_c(\Delta \phi_c) = k_\phi \Delta \phi_c \quad (3)$$

که در این روابط F_c ، M_c ، T_c به ترتیب نیروی محوری، ممان خمشی و ممان پیچشی که در این روابط F_c ، M_c ، T_c به ترتیب نیروی محوری، ممان خمشی و ممان پیچشی وارده برحسب Δr_c ، $\Delta \theta_c$ ، $\Delta \phi_c$ برای پیوند کربن-کربن می‌باشد. دیگر ثوابت مورد نیاز در این روابط در جدول ۱ ارائه شده است.

با توجه به اهمیت عامل‌دار کردن نانولوله برای بهبود درهمکنش بین اتم‌های کربن و ماتریس پلیمری، در این تحقیق تاثیر پیوندهای کوالانسی در کنار نیروهای واندروالس مورد مطالعه قرار گرفته است. توزیع نقص‌های ساختاری و پیوندهای کوالانسی نانولوله‌های عامل‌دار شده به‌صورت یکنواخت بوده که با استفاده از الگوریتم معرفی شده در مرجع [۲۲] توزیع گشته‌اند. پیوندهای کوالانسی از خواص پیوند SP3 در مدل اجزای محدود با به‌کارگیری المان تیر BEAM189، مدل گردیده است. نقص ساختاری استفاده شده در این تحقیق، از نوع نقص حفره^۳ بوده و به ازای هر نقص سه پیوند کوالانسی SP3 بین نانولوله و ماتریس پلیمری ترسیم شده است که در شکل ۳ نشان داده شده‌اند.

در شکل ۲ همچنین مشاهده می‌شود، در مدل‌سازی در ابعاد نانو، مدل اجزای محدود، از سه فاز ماتریس پلیمری، نانولوله کربنی و فاز واسط^۴ تشکیل شده است. برای تحلیل این RVE از نرم‌افزار ANSYS استفاده می‌شود. در این RVE ماتریس پلیمری اپوکسی، با مدول الاستیسیته ۲/۵۵ گیگاپاسکال و ضریب پواسون برابر ۰/۳ با استفاده از المان مکعبی^۵ مدل شده است.

جدول ۱ مقادیر مربوط به پتانسیل مورس [۲۵]

پارامتر	مقدار	واحد
D_e	۰/۶۰۳۱	nN.nm
K_θ	۱/۴۲	nN.nm/rad ²
K_ϕ	۰/۲۷۸	nN.nm/rad ²
K_{sextic}	۰/۷۵۴	rad ⁻⁴

نیروی واندروالس توسط فنر غیرخطی بر اساس پتانسیل لندارد-جونز^۶ (۱۲-۶) بین اتم‌های کربن با به‌کارگیری المان خطی COMBIN39 وارد شده است که رابطه نیرو برحسب فاصله در رابطه (۴) نشان داده شده است.

$$F(x) = -24 \frac{\epsilon_v}{\sigma_v} \left[2 \left(\frac{\sigma_v}{x + \sqrt{2}\sigma_v} \right)^{-13} - \left(\frac{\sigma_v}{x + \sqrt{2}\sigma_v} \right)^7 \right] \quad (4)$$

در این رابطه ثابت‌های ϵ_v و σ_v برای کربن به ترتیب برابر ۰/۰۰۰۳۸۵۹۳ نانونیوتن و ۰/۳۴ نانونیوتن می‌باشند. x نیز جابجایی فنر نسبت به موقعیت تعادل آن، $\sqrt{2}\sigma_v$ می‌باشد. از این رابطه می‌توان نتیجه

در مدل‌سازی در ابعاد نانو بیشتر تلاش معطوف به مدل‌سازی نانولوله و فاز واسط می‌باشد. تاثیر عواملی همچون نقص ساختاری در نانولوله بر خواص مکانیکی آن به‌قدری قابل توجه می‌باشد که با تعداد ثابتی نقص ساختاری، تنها با تغییر در توزیع نقص‌ها، استحکام نهایی نانولوله کربنی تا ۵۰٪ کاهش می‌یابد [۲۲]. از سوی دیگر، خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری به‌طور کلی وابسته به نوع درهمکنش بین اتم‌های کربن و ماتریس پلیمری می‌باشد [۲۳] که تنها با مطالعه در ابعاد نانو قابل ارزیابی است.

در این تحقیق، برای مدل‌سازی نانولوله کربنی به همراه پلیمر اطراف آن، از مدل ریاضی ارائه شده در مرجع [۲۴] استفاده شده که در شکل ۲ برای

2. Modified Morse potential function
3. Vacancy defects
4. Interphase region
5. SOLID185
6. Lennard-Jones potential

1. Chiral index

جدول ۲ مشخصات ابعادی نانولوله کربنی و ماتریس پلیمری در مدل‌سازی ابعاد

نانولوله	چگالی نقص (nm^{-1})	D_c (nm)	D_{in} (nm)	D_{out} (nm)	L (nm)	اندیس کایرال
سالم	-	۰/۹۴	۱/۲۸	۳/۶۲	۵۲/۲	(۱۰۰)
عامل‌دار	۱/۲۱					

بر این اساس برای به دست آوردن این مقادیر سختی باید پنج شرط مرزی مختلف تعریف و اعمال گردد. جایجایی وارده به محدوده پلیمری RVE که در شکل ۱(الف) نشان داده شده است، توسط روابط (۷) و (۸) بیان می‌گردد.

$$G_L^f = C_{44}^f \quad (۸)$$

$$G_T^f = \frac{1}{2}(C_{22}^f - C_{23}^f) \quad (۹)$$

$$u_i(P) = \varepsilon_{ij}x_j \quad (۱۰)$$

$$T_i(P) = \sigma_{ij}n_j \quad (۱۱)$$

که در این روابط P ، محدوده اعمال شرط مرزی است که در شکل ۱(الف) نشان داده شده، x_j بردارهای تعریف شده در شکل ۱(ب) و n_j بردار عمود خارجی به محدوده P می‌باشند. انرژی کلی کرنش نیز بر اساس رابطه (۱۲) تشریح می‌گردد.

$$\Lambda^f = \frac{\pi D^2 L}{8} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} \quad (۱۲)$$

که در آن D و L به ترتیب طول و قطر تیر معادل می‌باشند. شرایط مرزی اعمال شده برای هر یک از خواص مکانیکی در جدول ۳ نشان داده شده است. با اعمال شرایط مرزی ارائه شده و به دست آوردن مقدار کار انجام شده برای اعمال $e = 0.01$ که در مراجع [۲۴، ۲۸] پیشنهاد شده است، با استفاده از نیروهای عکس‌العمل \times جایجایی و برابر قرار دادن با رابطه انرژی نشان داده شده در جدول ۳، مقادیر سختی به دست می‌آیند. این مقادیر برای نانولوله سالم و نانولوله عامل‌دار شده در جدول ۴ با خواص ارائه شده توسط مطالعات دیگر مقایسه شده است. در این جدول مشاهده می‌شود، خواص به دست آمده در این تحقیق، انطباق قابل قبول با دیگر مقالات دارد و در محدوده مقادیر ارائه شده توسط مراجع دیگر می‌باشد. تفاوت در مقادیر ارائه شده در این جدول، دلایل متفاوتی از جمله تفاوت در اندیس کایرال نانولوله، نوع و نحوه مدل‌سازی پلیمر، نوع و نحوه مدل‌سازی فازمیان را دارا می‌باشد. در شکل ۴، خواص غیرخطی مقادیر مورد نیاز برای مدل‌سازی غیرخطی نانولوله کربنی و فاز واسط به‌عنوان تیر غیرخطی معادل در نرم‌افزار ANSYS نشان داده شده است. برای ترسیم این نمودارها، فرآیند ارائه شده برای استخراج مقادیر جدول ۴، در بازه‌های کوچک کرنش ادامه پیدا می‌کند. مقادیر ارائه شده برای تیر معادل با مقطع دایره با قطر ۱/۲ نانومتر بیان شده است.

۳- مدل‌سازی در ابعاد میکرو

در مدل‌سازی در ابعاد میکرو، عوامل دیگری چون درصد حجمی نانولوله در ماتریس پلیمری، توزیع نانولوله در ماتریس پلیمری، اعوجاج نانولوله‌های کربنی و تجمع نقطه‌ای آنها به‌عنوان عوامل موثر در خواص نانوکامپوزیت مورد

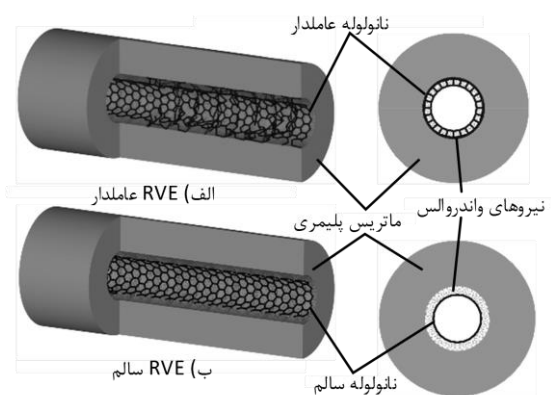
گرفت زمانی که فاصله بین دو اتم بیش از ۸/۵ نانومتر می‌باشد، نیرو واندروالس برقرار نمی‌باشد. در این مدل‌سازی از نیروهای واندروالس بین اتم‌های غیر کربن صرف‌نظر می‌شود. با توجه به آنکه مقدار نیروی واندروالس بین نانولوله و ماتریس پلیمری کاملاً متناسب با تعداد نودهای صفحه داخلی پلیمر می‌باشد، فاصله بین نودهای صفحه داخلی پلیمر برابر میانگین فاصله بین اتم‌های اپوکسی برابر ۰/۱۲ در نظر گرفته شده است [۲۶]. مشخصات ابعادی، چگالی نقص‌های حفره در جدول ۲ ارائه شده است. برای به دست آوردن خواص تیر معادل، همان‌گونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، مدل استوانه‌ای گزینه مناسبی می‌باشد. بر این اساس برای به دست آوردن خواص تیر معادل، انرژی پتانسیل ذخیره شده در محدوده شرایط مرزی (شکل ۱(الف)) در پنج شرط مرزی مستقل، برابر با انرژی پتانسیل ذخیره شده برای تیر معادل شکل ۱(ب) قرار داده می‌شود [۲۷]. بر این اساس رابطه پیوستگی با استفاده از رابطه (۵) نشان داده شده است.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}^f \varepsilon_{kl} \quad (۵)$$

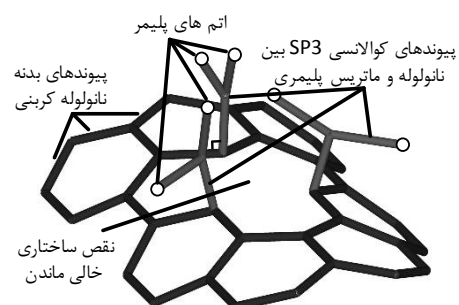
در این رابطه ε_{kl} به ترتیب تنش و کرنش و C_{ijkl}^f سختی الاستیک برای تیر معادل می‌باشند که با بالانویس f نشان داده شده‌اند. پنج خاصیت الاستیک مستقل شامل C_{11} ، مدول الاستیسیته طولی E_L^f ، مدول الاستیسیته حجمی عرضی E_T^f ، مدول پیچشی طولی G_L^f و مدول پیچشی عرضی G_T^f می‌باشند که با ماتریس سختی الاستیک به‌صورت زیر رابطه دارند:

$$E_L^f = C_{11}^f - \frac{2C_{12}^f}{C_{22}^f + C_{23}^f} \quad (۶)$$

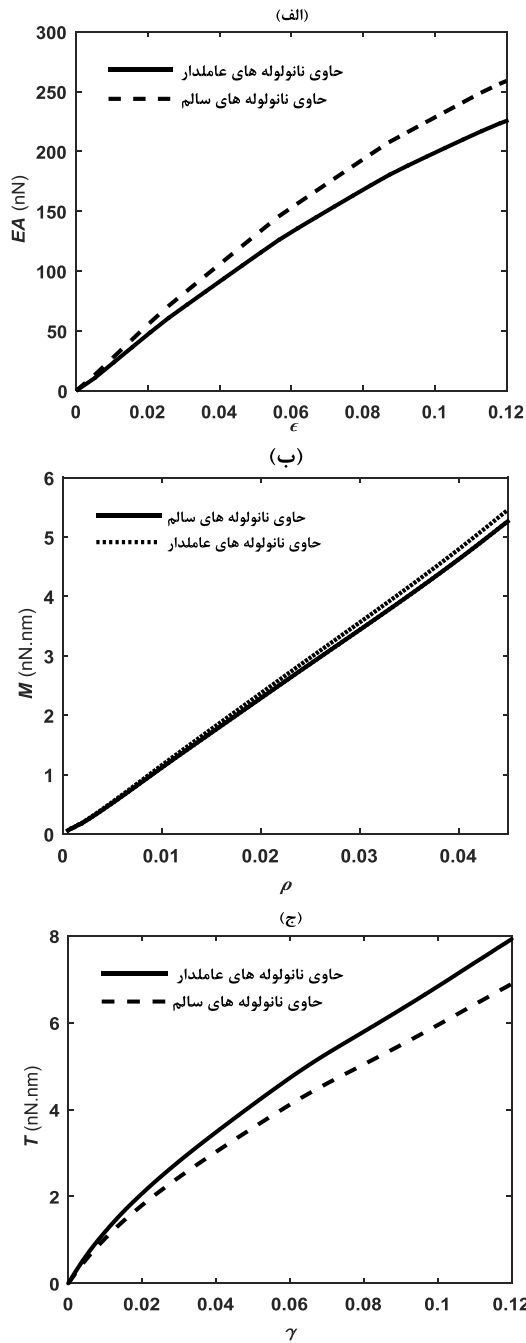
$$E_T^f = \frac{1}{2}(C_{22}^f + C_{23}^f) \quad (۷)$$



شکل ۲ المان حجمی مبین مشتمل بر ماتریس پلیمری، نانولوله کربنی و فاز واسط برای بررسی پلیمر تقویت شده با (الف) نانولوله عامل‌دار شده و (ب) نانولوله سالم



شکل ۳ ترسیم پیوند کوالانسی بین نانولوله کربنی دارای نقص و ماتریس پلیمری



شکل ۴ خواص مکانیکی تیر معادل غیرخطی برای المان حجم مبین شامل نانولوله‌های عامل‌دار شده و سالم (الف) کشش، (ب) خمش و (ج) پیچش

برای امکان توصیف توزیع نانولوله‌های کربنی در ماتریس پلیمری نیاز است تعدادی از پارامترهای اولیه مورد نیاز به شرح زیر تعریف گردد که در شکل ۶ نیز نشان داده شده‌اند:

r_i : طول برش i ام تیر معادل

L : طول کلی تیر معادل

N_i : نود آغاز برش i ام تیر معادل بر روی المان مکعبی

N_{i+1} : نود پایان برش i ام تیر معادل بر روی المان مکعبی

θ_i : زاویه قطبی^۳ برای جهت برش i ام بر اساس دستگاه مختصات کروی

تعریف شده در انتهای برش ۱ - i ام

مطالعه قرار می‌گیرد. برای این منظور مدل‌سازی باید به گونه‌ای انجام گردد که اثر این پارامترها بر روی خواص کلی RVE قابل مطالعه باشد.

جدول ۳ شرایط مرزی و رابطه انرژی معادل برای به دست آوردن پنج خاصیت مستقل الاستیک تیر معادل

خواص الاستیک مستقل	معادله انرژی معادل	شرط مرزی
مدول الاستیسیته طولی	$\frac{\pi D^2 L}{8} E_L^f e^2$	$u_1(P) = ex_1$ $T_2(P) = 0$ $T_3(P) = 0$
مدول حجمی عرضی ^۱	$\frac{\pi D^2 L}{2} E_T^f e^2$	$u_1(P) = 0$ $u_2(P) = ex_3$ $u_3(P) = ex_2$
مدول برشی طولی	$\frac{\pi D^2 L}{8} G_L^f e^2$	$u_1(P) = \frac{e}{2} x_2$ $u_2(P) = \frac{e}{2} x_1$ $u_3(P) = 0$
مدول برشی عرضی	$\frac{\pi D^2 L}{8} G_T^f e^2$	$u_1(P) = 0$ $u_2(P) = \frac{e}{2} x_3$ $u_3(P) = \frac{e}{2} x_2$
المان سفتی الاستیک	$\frac{\pi D^2 L}{8} C_{11}^f e^2$	$u_1(P) = ex_1$ $u_2(P) = 0$ $u_3(P) = 0$

در این تحقیق ارزیابی خواص نانوکامپوزیت با کمک گرفتن از هردو روش اجزای محدود و تحلیلی صورت گرفته که علاوه بر امکان مقایسه نتایج بتوان جزئیات شکست را نیز بررسی نمود.

جدول ۴ خواص الاستیک تیر معادل نانولوله کربنی و پلیمر اطراف

مرجع	نانولوله	E_T^f (GPa)	E_L^f (GPa)	G_T^f (GPa)	G_L^f (GPa)	C_{11}^f (GPa)	L (nm)
[۲۴]	سالم	۹/۹	۴۵۰/۴	۴/۴	۲۷/۴۴	۴۵۷	۳/۵
[۲۸]	سالم	۱۶/۸	۵۳۹/۲	۱	۷/۱	۵۴۸/۷	۴/۳
	عامل‌دار	۲۴/۵	۴۸۱	۲/۵	۱۲/۷	۴۸۷/۷	-
[۲۹]	سالم	۱۱	۶۴۹	-	-	-	-
[۳۰]	سالم	۱۰	۴۵۰	۱	۳۰	-	-
	تحقیق	۲۱/۶	۵۷۳	۲/۹	۲۶/۱	۵۶۳	۵۲
	کنونی	۲۲/۴	۴۹۶	۲/۷	۳۱	۵۱۱	عامل‌دار

۳-۱- مدل‌سازی نانوکامپوزیت در ابعاد میکرو به روش اجزای محدود

همان‌طور که در مقدمه ارائه شد، با توجه به مشکلاتی که توزیع غیرمنظم و موجدار نانولوله در نحوه المان‌بندی ماتریس پلیمری ایجاد می‌کند، بر اساس مطالعات نویسندگان این مقاله تا به حال مرجعی شکست را در المان حجمی مبین ابعاد میکرو، با توزیع سه‌بعدی موجدار نانولوله، با استفاده از روش اجزای محدود مورد مطالعه قرار نداده است. برای این منظور در این تحقیق، ابتدا ماتریس پلیمری برای مدل‌سازی این RVE به صورت مکعب مستطیل، با استفاده از المان‌های مکعبی^۲ منظم مشابه آنچه در شکل ۵ نشان داده شده است، ترسیم می‌گردد. خواص مکانیکی این پلیمر، مانند پلیمر در مدل‌سازی ابعاد نانو می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌گردد این RVE دارای ابعاد $20 \times 20 \times 20$ نانومتر می‌باشد.

1. Transverse bulk modulus
2. Solid186

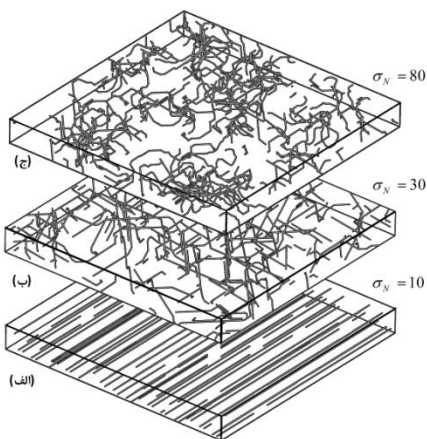
3. Polar angle

می‌باشد. این مقادیر هم با توجه به ماهیت فیزیکی و هم نوع توزیع نانولوله‌کربنی در ماتریس پلیمری، مقادیر کوچک‌تری را دارا می‌باشند. بر این اساس، میزان اعوجاج نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت با اعمال محدودیت بر این دو زاویه تعریف می‌گردد. برای ترسیم تیر معادل دلخواه می‌توان، علاوه بر تعریف بازه زوایای θ_i و ϕ_i ، این زوایا را بر اساس توابع توزیع احتمالاتی تعریف نمود. به‌طور مثال، در صورتی که زاویه ϕ_i برابر با 90° درجه باشد، صرف‌نظر از میزان زاویه θ_i ، نانولوله در جهت قبلی خود امتداد می‌یابد. بر این اساس اگر توابع توزیع احتمالاتی این زوایا به‌گونه‌ای انتخاب گردد که احتمال $\phi_i = 90^\circ$ بالا باشد، نانولوله‌ها تمایل به داشتن شکل مستقیم دارند.

در این تحقیق برای تشریح زوایای θ_i و ϕ_i به ترتیب از توزیع‌های احتمالاتی نرمال و یکنواخت استفاده شده است. برای زاویه سمتی (ϕ_i) از توزیع نرمال $N(90, \sigma_N)$ که در آن 90° میانگین و σ_N انحراف معیار می‌باشد استفاده شده است و برای تعریف زاویه θ_i توزیع یکنواخت بین 0° تا 360° درجه در نظر گرفته شده است. بر این اساس تنها تعریف محدوده 0° تا 180° برای زاویه سمتی (ϕ_i) دارای اهمیت می‌باشد. اکنون می‌توان با کنترل پارامتر σ_N ، اعوجاج نانولوله‌های را در ماتریس پلیمری کنترل نمود.

در شکل ۷، سه RVE با مقادیر متفاوت σ_N نشان داده شده‌اند. مشاهده می‌شود زمانی که $\sigma_N < 10$ ، تیرهای معادل به‌صورت خطوط هم راستا کشیده شده‌اند. زمانی که $\sigma_N = 30$ می‌باشد، ترکیب خطوط مستقیم در نانوکامپوزیت زیاد دیده می‌شود. در نهایت برای $\sigma_N = 80$ ، تقریباً تمامی تیرها از خم بالایی برخوردار می‌باشند. این نشان دهنده آن است که این مدل‌سازی قابلیت ترسیم نانوکامپوزیت‌های پلیمری را با اعوجاج متفاوت، همزمان با حفظ ساختار فیزیکی نانولوله‌های کربنی را دارا می‌باشند.

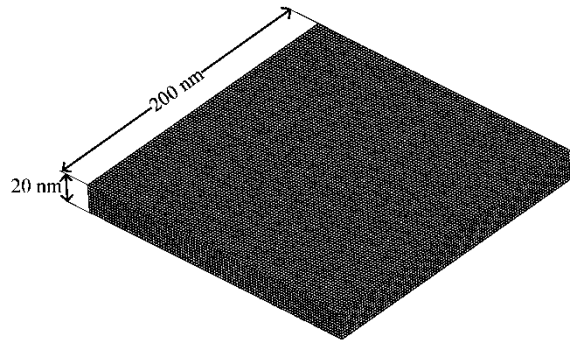
یکی از مهم‌ترین عوامل موثر در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری که در مطالعه المان حجمی مبین در ابعاد میکرو قابل بررسی می‌باشد، تجمع نانولوله‌های کربنی می‌باشد. از این سو الگوریتمی برای مدل‌سازی یک RVE در ابعاد میکرو و بالاتر موفق می‌باشد که توانایی مدل‌سازی این تجمع را دارا باشد. در الگوریتم ارائه شده توسط هان^۲ و همکاران [۳۱]، این توزیع با استفاده از ترسیم کروی انجام شده است.



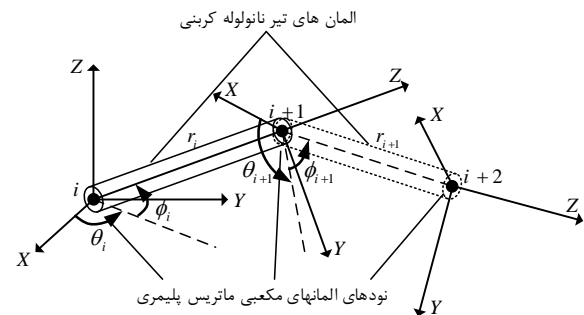
شکل ۷ توزیع نانولوله‌های کربنی در ماتریس پلیمری: الف) $\sigma_N = 10$ ، ب) $\sigma_N = 30$ ، ج) $\sigma_N = 80$

در این روش با استفاده از تعریف یک محدوده مشخص کروی، اجازه خروج نانولوله از محدوده تعریف شده داده نمی‌شود. اگرچه این روش از

θ_i : زاویه سمتی^۱ برای جهت برش i ام بر اساس دستگاه مختصات کروی تعریف شده در انتهای برش $i - 1$ ام
 x_S, y_S, z_S : نقطه آغاز تیر معادل بر اساس محور مختصات کارتزین RVE
 فرآیند ترسیم یک تیر معادل در ماتریس پلیمری به شرح زیر می‌باشد:
 - ابتدا یک نقطه آغازین (x_S, y_S, z_S) نانولوله بر اساس توزیع موردنظر بر روی ماتریس پلیمری انتخاب می‌گردد.
 - یک دستگاه مختصات کروی موضعی در این نقطه در نظر گرفته شده و با در نظر گرفتن θ_1 و ϕ_1 جهت اولین برش مشخص می‌شود.



شکل ۵ ابعاد و المان‌بندی ماتریس پلیمری RVE در مدل‌سازی ابعاد میکرو



شکل ۶ دستگاه‌های مختصات توصیف‌کننده قسمت‌های یک نانولوله در حجم مبین

- نزدیک‌ترین نود موجود در مدل ارائه شده در شکل ۵ برای گره دوم انتخاب می‌گردد و اولین برش ترسیم می‌گردد.

- دستگاه کروی به‌گونه‌ای به نقطه پایانی برش اول انتقال می‌یابد که محور Z این دستگاه در جهت برش ترسیم شده اول باشد.

- این فرآیند برای گره‌های بعدی تکرار شده تا طول مجموع برش‌های تیر معادل، معادل طول کلی نانولوله (L) گردد.

لازم به یادآوری است که این تیر معادل شامل نانولوله، پلیمر اطراف و فازمیانی آنها می‌شود و با به‌کارگیری المان دو نقطه‌ای غیرخطی BEAM188 ترسیم می‌گردد. خواص مکانیکی این تیر نیز با توجه به سالم یا عامل‌دار بودن آن، با توجه به نتایج ارائه شده در جدول ۴ و شکل ۴، در مدل‌سازی ابعاد میکرو وارد می‌گردد.

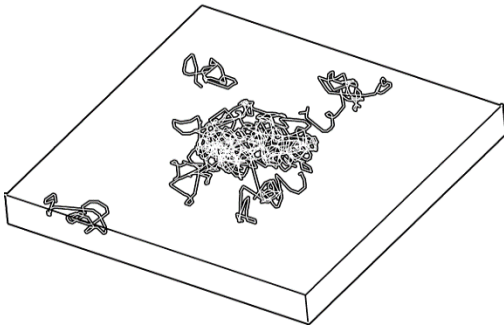
پس از تشریح فرآیند ترسیم یک نانولوله‌کربنی، اکنون باید با کنترل مقادیر یادشده بتوان بر اساس نیازمندی موردنظر، توزیع دلخواه نانولوله‌های کربنی را در مجموعه نانوکامپوزیت فراهم کرد. در حالت کلی بازه تعریف شده برای θ_i و ϕ_i به ترتیب برابر با $90^\circ < \theta_i < 90^\circ$ و $0 < \phi_i < 180^\circ$

با توجه به اینکه روش موری-تاناکا^۱ برای محدوده بزرگ‌تری از کسرهای حجمی قابل استفاده بوده، برهمکنش بین ذرات را در نظر می‌گیرد و هزینه محاسباتی قابل قبولی دارد، نسبت به روش‌هایی مانند اشباع رقیق^۲ و رهیافت خودسازگار^۳ برای این تحقیق مناسب‌تر می‌باشد. بر این اساس مدول الاستیسیته معادل به صورت زیر ارائه می‌گردد.

$$C = (V_m C_m + V_f C_f : A) : (V_m I + V_f A)^{-1} \quad (16)$$

که در این رابطه حروف برجسته شده تانسورهای مرتبه دوم و سوم، I تانسور یکه، V^i و C^i به ترتیب نسبت حجمی و ماتریس مدول الاستیک فاز i می‌باشند. در این رابطه تانسور مرتبه چهارم A به صورت رابطه زیر تعریف می‌شود.

$$A = [I + S : (C_m)^{-1} : (C_f - C_m)]^{-1} \quad (17)$$



شکل ۸ توزیع مجتمع نانولوله‌های کربنی برای $C_r = 0.8$
 $X_l = Y_l = 80 \text{ nm}$, $X_u = Y_u = 120 \text{ nm}$, $\sigma_N = 90$

که در آن S تانسور اشلبی^۴ بوده و به طور کامل در مرجع [۳۲] تشریح شده است. با فرض توزیع یکنواخت در راستای x و طول زیاد نانولوله‌های کربنی، رابطه پیوستگی به صورت رابطه (۱۸) نوشته خواهد شد.

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} k+m & l & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & n & 1 & 0 & 0 & 0 \\ k-m & l & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{Bmatrix} \quad (18)$$

که در این رابطه k, m, l, n, p مدول‌های الاستیک هیل^۵ می‌باشند [۳۳]. اجزای تانسور S برای الیاف بلند و هم‌راستا در جهت X به صورت زیر تعیین می‌گردند:

$$\begin{aligned} S_{1111} = S_{3333} &= \frac{5-4V_m}{8(1-V_m)}, S_{1122} = S_{3322} = \frac{V_m}{2(1-V_m)} \\ S_{1133} = S_{3311} &= \frac{4V_m-1}{8(1-V_m)}, S_{2323} = S_{1212} = \frac{1}{4} \\ S_{1313} &= \frac{3-4V_m}{8(1-V_m)} \end{aligned} \quad (19)$$

با قرار دادن رابطه (۱۹) در رابطه (۱۷) تانسور A به دست می‌آید و با قرار دادن این تانسور در رابطه (۱۶) ماتریس C حاصل می‌گردد. با برابر قرار دادن این ماتریس و ماتریس مدول الاستیسیته نشان داده شده در رابطه (۱۸)، مقادیر مدول‌های الاستیک هیل به صورت رابطه (۲۰) به دست می‌آیند.

دیدگاه ریاضی به طور کامل یک کره مملو از نانولوله را تشکیل می‌دهد. در حالت واقعی، تجمع نانولوله‌ها با یک شکل هندسی مشخص قابل ترسیم نمی‌باشد.

در الگوریتم تدوین شده در این تحقیق، این تجمع با تعیین محدوده برای نقطه آغازین نانولوله کربنی در ماتریس پلیمری و زاویه انحراف نانولوله تعریف می‌گردد. ابتدا پارامتر بسیار مهم نسبت نانولوله‌های مجتمع به کل نانولوله‌های RVE به شکل زیر تعریف می‌گردد:

$$C_r = \frac{\sum_{i=1}^N l_i}{l_r} \quad (13)$$

که در آن l_i مجموع طول نانولوله‌های کربنی موجود در تجمع i ام، N تعداد تجمع‌های موجود در RVE و l_r مجموع طول تمامی نانولوله‌های موجود در RVE می‌باشد. با توجه به رابطه (۱۳) می‌توان نتیجه گرفت این نسبت در بازه $0 < C_r < 1$ تعریف می‌گردد. زمانی که این مقدار برابر صفر می‌باشد به این معنی است که هیچ‌گونه تجمعی در RVE تعریف نشده است. از سوی دیگر زمانی که این مقدار برابر یک است، به این معنی می‌باشد که تمامی نانولوله‌های کربنی به صورت مجتمع در ماتریس پلیمری قرار گرفته‌اند. همان حجم مبین نشان داده شده در شکل ۸ را می‌توان به عنوان مثالی از این نوع RVE تعریف نمود. همچنین طول نانولوله‌های موجود در RVE با استفاده از رابطه (۱۴) بیان می‌شود.

$$l_r = \frac{1}{\rho_f} w_f \rho_p V_{RVE} \quad (14)$$

که در آن w_f نسبت جرمی نانولوله کربنی، ρ_p چگالی پلیمر، V_{RVE} حجم RVE می‌باشد. بر این اساس می‌توان میزان طول نانولوله کربنی موجود در تجمع را با استفاده از رابطه زیر به دست آورد:

$$l_i = \frac{1}{\rho_f} w_{f_i} \rho_p V_i \quad (15)$$

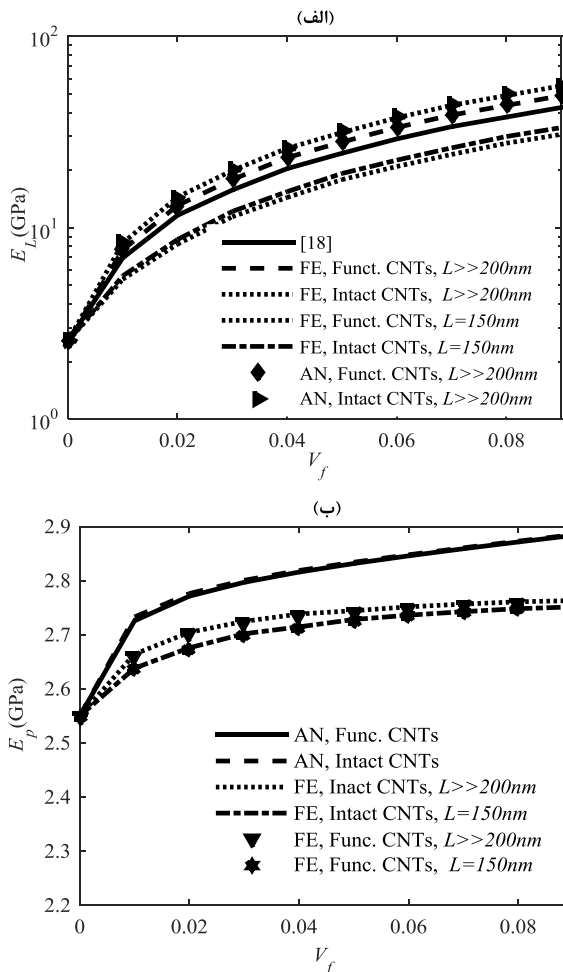
که در این رابطه w_{f_i} نسبت جرمی نانولوله‌ها در محدوده تجمع بوده و V_i نیز حجم تجمع می‌باشد. همانطور که بیان شد به منظور اعمال تجمع در RVE، بازه انتخاب نقطه آغازین محدود می‌گردد. برای این منظور، محدوده بالایی و پایینی محدوده تجمع در جهت S به ترتیب با S_u و S_l تعریف می‌گردد.

در شکل ۸، توزیع مجتمع نانولوله‌های کربنی با توجه به الگوریتم معرفی شده در این تحقیق نشان داده شده است. برای ترسیم این تصویر مقادیر نسبت تجمع $C_r = 0.8$ ، محدوده پایین و بالا برای تجمع در جهت‌های X و Y به ترتیب، $X_l = Y_l = 80 \text{ nm}$ ، $X_u = Y_u = 120 \text{ nm}$ و در نهایت انحراف معیار توزیع احتمالاتی نرمال زاویه $\theta_i = 90, 0$ ، در نظر گرفته شده است. در این شکل مشاهده می‌شود، تیرهای معادل درست در محدوده مرکزی RVE مجتمع شده‌اند که نشان دهنده توانایی الگوریتم یاد شده در مدل‌سازی تجمع نانولوله‌های کربنی می‌باشد.

۳-۲- مدل‌سازی نانوکامپوزیت در ابعاد میکرو با استفاده از حل تحلیلی

به منظور صحت‌گذاری مدل اجزای محدود ابعاد میکرو معرفی شده در این تحقیق، از روش حل تحلیلی استفاده شده است تا بتوان صحت عملکرد این مدل‌سازی را با توجه به مقادیر به دست آمده برای تیر معادل جدول ۴ بررسی نمود. برای تشریح خواص نانوکامپوزیت در ابعاد میکرو با استفاده از روابط تحلیلی، فرض می‌شود این مواد الاستیک و خطی می‌باشند. اگرچه روش‌های زیادی برای ارزیابی مدول الاستیک کامپوزیت‌ها معرفی شده‌اند، ولی

1. Mori-Tanaka
2. Dilute concentration approximation
3. Self-consistent approach
4. Eshelby
5. Hill



شکل ۹ مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت پلیمری بر حسب تغییرات درصد حجمی نانولوله‌های کربنی، (الف) در راستای نانولوله‌های کربنی E_L ، (ب) عمود بر نانولوله‌های کربنی E_p

به‌طور کلی در شکل ۹ (ب) مشاهده می‌شود، مدول الاستیسیته عمود بر راستای نانولوله‌های کربنی، بازه بسیار کوچکی داشته و با افزایش درصد حجمی نانولوله‌های کربنی، مقدار محدودی افزایش می‌یابد. همان‌گونه که در مدل‌سازی در ابعاد نانو مشاهده شده است، درهم‌کنش بین نانولوله‌های کربنی و ماتریس پلیمری، باعث جلوگیری از جدایش نانولوله‌های کربنی از ماتریس پلیمری شده و تنش برشی سطحی را تا $2/5$ برابر افزایش می‌دهد [۳۴]. با توجه به ماهیت مدل‌سازی در ابعاد میکرو، امکان مدل‌سازی جزئیات ارتباط بین نانولوله و ماتریس پلیمری در نانوکامپوزیت عامل‌دار وجود ندارد. در این تحقیق، به‌منظور نشان دادن عدم جدایش نانولوله‌کربنی عامل‌دار از ماتریس پلیمری، بخشی از پلیمر را با تیر معادل همراه نموده و استحکام این المان‌های $1/6$ برابر المان‌های دیگر ماتریس پلیمری درد نظر گرفته شده است. این در حالی است که در محدوده نزدیک به نانولوله‌کربنی، این افزایش تا $2/5$ برابر گزارش شده است [۳۶]. اگرچه این روش، تمامی جزئیات پیوندهای کوالانسی بین نانولوله‌های کربنی عامل‌دار و ماتریس پلیمری را لحاظ ننموده است، تقریب بسیار خوبی از مکانیزم شکست در نانوکامپوزیت عامل‌دار شده و پارامترهای موثر بر آن را در اختیار قرار می‌دهد. بر این اساس، استحکام المان‌های پلیمری برابر $0/14$ گیگاپاسکال در نظر گرفته شده است [۳۴]. بر این اساس در طول بارگذاری،

$$n = \frac{E_m^2 V_m (1+V_f - V_m V_m) V_m V_f (G_L^f E_L^f - E_T^f) (1+V_m)^2 (1-2V_m) + 2}{(1+V_m) [2V_m G_L^f (1-V_m - 2V_m^2) + E_m (1+V_f - 2V_m)]} + \frac{E_m [2V_m^2 G_L^f (1-V_m) + V_f E_L^f (1-2V_m + V_f) - 4V_m E_T^f V_m]}{2V_m G_L^f (1-V_m - 2V_m^2) + E_m (1+V_f - 2V_m)}$$

$$l = \frac{E_m \{V_m V_m [E_m + 2G_L^f (1+V_m)] + 2V_f E_T^f (1-V_m^2)\}}{2(1+V_m) [E_m (1+V_f - 2V_m) + 2V_m G_L^f (1-V_m - 2V_m^2)]}$$

$$k = \frac{E_m \{V_m E_m + 2G_L^f (1+V_m) [1+V_f (1-2)]\}}{2(1+V_m) [E_m (1+V_f - 2V_m) + 2V_m G_L^f (1-V_m - 2V_m^2)]}$$

$$m = \frac{E_m \{E_m V_m + 2G_T^f (1+V_m) (3+V_m - 4V_m)\}}{2(1+V_m) \{E_m [V_m + 4V_f (1-V_m)] + 2V_m G_T^f (3-V_m - 4V_m^2)\}} \quad (20)$$

در این رابطه E_L^f ، E_T^f ، G_L^f ، G_T^f خواص الاستیک تیر معادل می‌باشند که برای نانولوله‌های عامل‌دار و سالم در جدول ۴ ارائه گردیده است. V_m و V_m نیز به ترتیب نسبت حجمی پلیمر و ضریب پواسون آن می‌باشند. بر این اساس مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت در جهت‌های موازی و عمود بر نانولوله‌های کربنی هم‌راستا با استفاده از مقادیر به دست آمده از رابطه (۲۰)، به‌صورت روابط (۲۱) و (۲۲) قابل ارائه می‌باشند.

$$E_L = n - \frac{l^2}{k} \quad (21)$$

$$E_p = n - \frac{4m(kn - l^2)}{kn - l^2 + mn} \quad (22)$$

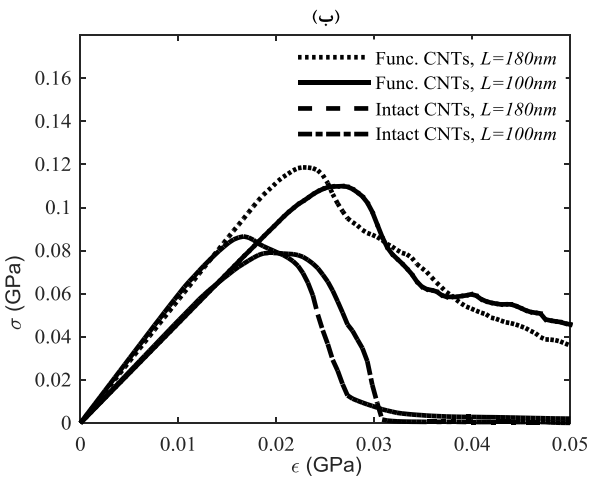
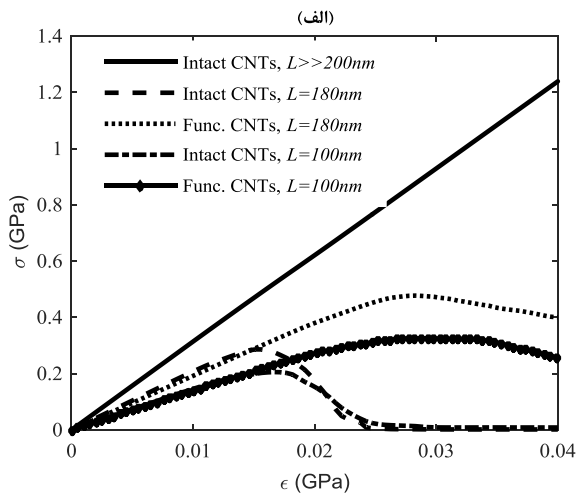
در این روابط، E_L و E_p ، به ترتیب مدول‌های الاستیسیته در جهت لیاف و در جهت عمود بر لیاف می‌باشند. در فصل چهارم، با استفاده از روابط تحلیلی (۲۱) و (۲۲)، مدل اجزای محدود RVE در ابعاد میکرو صحنه‌گذاری خواهد شد.

۴- توزیع یکنواخت نانولوله‌های هم‌جهت

برای مدل‌سازی نانوکامپوزیت پلیمری تشکیل شده از نانولوله‌های کربنی هم‌راستا، همان‌گونه که در شکل ۷ نشان داده شده، مقدار زاویه سمتی برای تمامی برش‌های نانولوله‌های کربنی برابر $\theta_i = 90$ قرار داده می‌شود. همچنین نقاط آغازین هریک از نانولوله‌های کربنی، با استفاده از روش جبری ارائه شده در مرجع [۳۴] تعیین شده است و فرآیند احتمالاتی لحاظ نگردیده است.

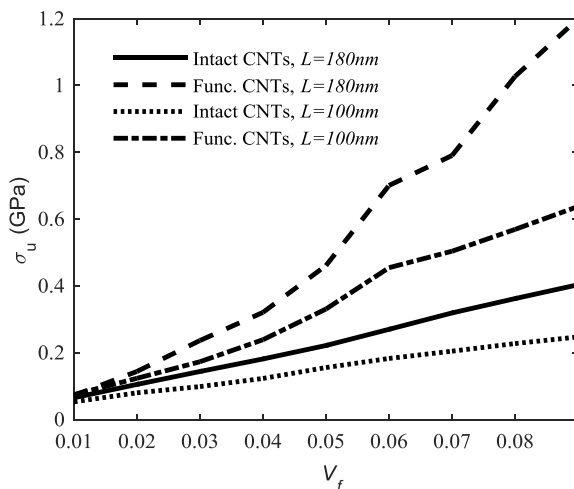
برای صحنه‌گذاری مدل‌سازی اجزای محدود و روش تحلیلی ارائه شده در فصل سوم، مدول الاستیسیته به دست آمده توسط این دو روش با یکدیگر و همچنین با نتایج ارائه شده توسط تحقیقات پیشین در شکل ۹ مقایسه گردیده است. در شکل ۹ (الف)، مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت پلیمری در جهت نانولوله‌های کربنی بر حسب تغییرات در درصد حجمی نانولوله‌کربنی به ازای مقادیر مختلف طول نشان داده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود نتایج حاصل از تحلیل اجزای محدود و روش حل تحلیلی برای نانولوله‌های کربنی بلند کاملاً برهم منطبق می‌باشد. همچنین انطباق قابل قبولی بین نتایج به دست آمده توسط روش‌های یادشده و مرجع [۳۵] مشاهده می‌گردد که تفاوت موجود با توجه به تفاوت بین خواص تیر معادل در نظر گرفته شده قابل توجیه می‌باشد. همچنین مشاهده می‌شود، کاهش طول نانولوله‌های تقویت‌کننده باعث کاهش مدول الاستیسیته می‌گردد. با این حال در تمامی موارد با افزایش درصد حجمی نانولوله تقویت کننده، مدول الاستیسیته افزایش می‌یابد. همان‌گونه که در شکل ۹ (ب) نشان داده شده است، مدول الاستیسیته عمود بر نانولوله‌های کربنی با افزایش درصد حجمی نانولوله‌های کربنی افزایش می‌یابد با این تفاوت که نرخ این افزایش نسبت به مدول الاستیسیته در جهت لیاف بسیار کاهش یافته است.

شکل می‌توان دریافت که نانولوله‌های عامل‌دار شده از طریق تغییر در مکانیزم شکست و بهبود توزیع بار بین سطوح ماتریس پلیمری، باعث افزایش تنش بحرانی حداکثر می‌گردند.



شکل ۱۰ نمودار تنش- کرنش برای حجم مبین با نسبت حجمی،

(الف) $V_f = 0.05$ ، (ب) $V_f = 0.01$



شکل ۱۱ تغییر تنش حداکثر در نانوکامپوزیت‌های پلیمری برحسب تغییرات نسبت حجمی نانولوله‌کربنی

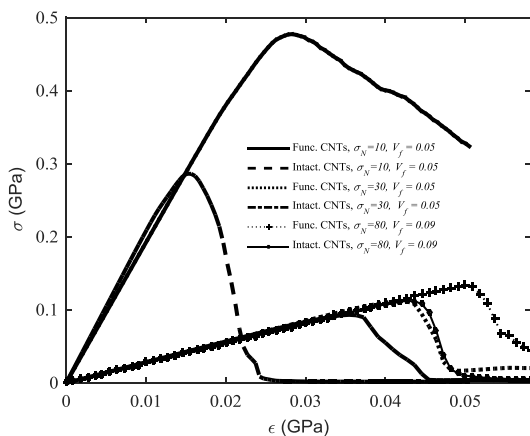
المان‌های ماتریس پلیمری در تنش‌های معادل بالاتر از این میزان غیرفعال می‌گردند.

در شکل ۱۰(الف)، نمودار تنش-کرنش برای نانوکامپوزیت پلیمری با درصد حجمی ۰/۰۵، برای مقادیر متفاوت طول و درهم‌کنش با ماتریس پلیمری نشان داده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود، خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری با نانولوله‌هایی با طول بسیار زیاد، چه از دیدگاه سختی و چه از دیدگاه شکست، از دیگر ترکیبات با اختلاف زیادی بهتر می‌باشد. دلیل اصلی آن، انتقال مستقیم بخشی از بار به نانولوله‌های کربنی بدون استفاده از فاز پلیمری می‌باشد. بر این اساس شکست در این نوع از حجم‌های مبین، با شکست نانولوله‌های کربنی تعریف می‌گردد. این ترکیب تا به حال در دسترس نبوده و در نانوکامپوزیت‌های پلیمری که اکنون مورد استفاده قرار می‌گیرند، نیرو از طریق ماتریس پلیمری منتقل می‌شود. بر این اساس استحکام نانوکامپوزیت پلیمری نمی‌تواند خیلی از مقادیر تنش حداکثر ماتریس پلیمری دور باشد.

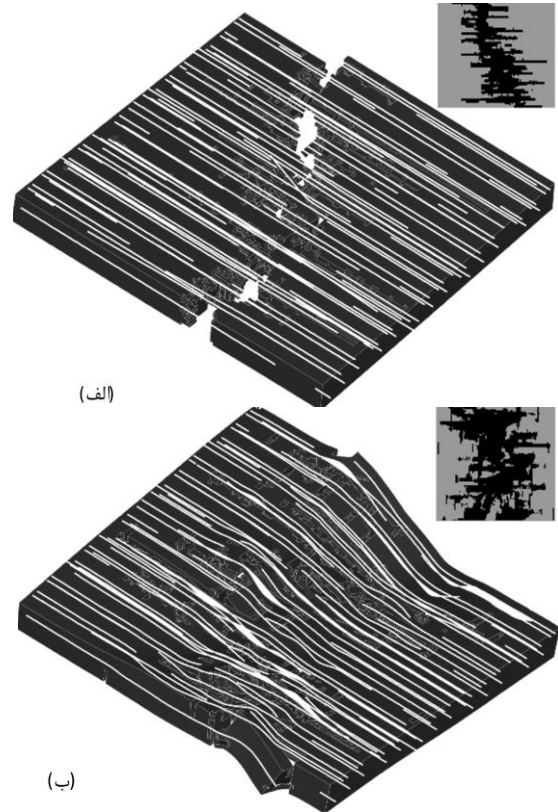
اگرچه مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های سالم کمی بیشتر از نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های کربنی عامل‌دار می‌باشد، ولی استحکام نهایی پایین‌تری داشته و شکست در آنها به میزان قابل توجهی ترد و شکننده می‌باشد. لذا کرنش حداکثر آنها نیز کاهش قابل توجهی یافته است. در شکل ۱۰(ب) نیز، نمودار تنش - کرنش برای درصد حجمی ۰/۰۱ نانولوله‌های کربنی نشان داده شده است. در این شکل نیز مشاهده می‌شود، هم عامل‌دار کردن نانولوله‌های پلیمری و هم افزایش طول آنها باعث بهبود استحکام نانوکامپوزیت می‌شود. با این حال مجدداً فرآیند عامل‌دار کردن نانولوله باعث کاهش مدول الاستیسیته می‌گردد. تاثیر افزایش درصد حجمی نانولوله‌های کربنی بر تنش حداکثر نانوکامپوزیت پلیمری در شکل ۱۱ نشان داده شده است. در این شکل تاثیر عواملی همچون درهم‌کنش نانولوله‌های کربنی و طول آنها نیز قابل ارزیابی می‌باشد. مشاهده می‌گردد، همان‌گونه که در بازنگری مراجع دیگر نشان می‌دهد [۲]، فرآیند عامل‌دار کردن نانولوله‌های کربنی تاثیر بالایی بر بهبود تنش حداکثر دارد که در درصد‌های حجمی بالا این تاثیر دوجندان می‌گردد. همچنین افزایش طول با توجه به بهبود سطح درهم‌کنش بین نانولوله‌های کربنی و ماتریس پلیمری، تاثیر بهبود دهنده بر تنش حداکثری نانوکامپوزیت دارد. در شکل‌های ۱۲(الف) و (ب)، نمونه اجزای محدود شکست در نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های کربنی به ترتیب سالم و عامل‌دار برای درصد حجمی ۰/۰۵ نشان داده شده است. با توجه به اینکه نمایش تنش‌ها به‌طور سه‌بعدی امکان‌پذیر نمی‌باشد، در این شکل‌ها، المان‌های حذف شده نیز نشان داده شده‌اند تا معیاری جهت ارزیابی نحوه توزیع تنش باشند. دلیل اصلی تفاوت در نتایج نشان داده شده در شکل‌های ۱۰(الف) و (ب) بین نانولوله‌های عامل‌دار و سالم را می‌توان با بررسی شکست در این دو نمونه تشریح نمود. در نمونه شکل ۱۲(الف)، شکست از نقاط ابتدایی نانولوله‌های کربنی آغاز می‌شود. این نقاط باعث ایجاد یک ترک شده که به سرعت رشد نموده و باعث جدایی دو سمت نانوکامپوزیت پلیمری می‌شود. برای شکل ۱۲(ب)، نانولوله‌های عامل‌دار شده، اجازه رشد سریع ترک را نمی‌دهند. در این شکل المان‌های حذف شده در اثر افزایش تنش نشان داده شده‌اند. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، نانولوله‌های عامل‌دار شده باعث توزیع بهتر تنش شده و توزیع سراسری المان‌هایی که در اثر افزایش تنش از بین رفته‌اند، مبین این نقش نانولوله‌های عامل‌دار می‌باشند. این در حالی است که المان‌های حذف شده در شکل ۱۲(الف)، در یک خط عرضی واقع شده‌اند. با مقایسه این دو

در شکل‌های ۱۴(الف) و (ب)، شکست در نمونه‌های حجمی مبین، به ترتیب تقویت شده با نانولوله‌های سالم و عامل‌دار شده نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد نحوه و مکانیزم شکست برخلاف نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با الیاف هم‌راستا، در این دو نمونه مشابه یکدیگر می‌باشد. از این رو تفاوت چندانی در منحنی‌های شکل ۱۳ مشاهده نمی‌گردد. در شکل ۱۵، تغییر استحکام نهایی برای نانوکامپوزیت‌های پلیمری برحسب تغییرات σ_N به ازای مقادیر متفاوت درصد حجمی نانولوله‌های کربنی نشان داده شده است. مشاهده می‌شود، با افزایش σ_N ، استحکام نهایی در تمامی نمونه‌ها کاسته می‌شود، با این حال پیش از $\sigma_N = 30$ این کاهش با نرخ بیشتری اتفاق می‌افتد و برای نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های عامل‌دار شیب تغییرات بیشتر است.

پس از $\sigma_N = 30$ ، نرخ کاهش در استحکام نهایی به ازای افزایش میزان σ_N کاهش می‌یابد. از بررسی این رفتار دو نکته قابل استنتاج است، نخست آنکه تا چه میزان تلاش برای هم‌راستا نمودن و حذف منحنی از نانولوله‌های کربنی می‌تواند بر بهبود خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری موثر باشد. از طرف دیگر، همگرایی بین پاسخ‌های پس از $\sigma_N = 30$ ، نشان می‌دهد استحکام نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله‌های کربنی منحنی، چندان به جزئیات خمیدگی نانولوله‌ها وابسته نمی‌باشد. در شکل ۱۶، تغییر استحکام نهایی نانوکامپوزیت پلیمری به ازای مقادیر متفاوت طول نانولوله‌های کربنی برای $\sigma_N = 30$ و $V_f = 0.05$ نشان داده شده است. با توجه به نتایج ارائه شده در این شکل می‌توان نتیجه گرفت، تغییر طول در نانولوله‌های پلیمری تاثیر چندانی بر استحکام نهایی نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های خمیده ندارد. بر این اساس زمانی افزایش طول نانولوله‌های کربنی به بهبود خواص نانوکامپوزیت پلیمری کمک می‌کند که همراه با هم‌راستا نمودن نانولوله‌های کربنی باشد. در شکل ۱۷، نتایج مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت پلیمری برحسب درصد حجمی نانولوله‌های کربنی به دست آمده از مدل‌سازی در ابعاد میکرو با نتایج تجربی مرجع [۳۷] مقایسه شده‌اند. در این شکل مشاهده می‌شود، نتایج به دست آمده در این تحقیق با نتایج تجربی برای انحنای بالای نانولوله‌های کربنی ($\sigma_N = 80$) همخوانی مناسبی دارد. مشاهده می‌شود در درصد حجمی پایین، نتایج حاصل از این تحقیق و نتایج تجربی کاملاً بر یکدیگر منطبق می‌باشند ولی با افزایش درصد حجمی نانولوله‌های کربنی، اگرچه نتایج رفتار مشابهی از خود نشان می‌دهند، ولی اختلاف بین آن‌ها افزایش می‌یابد. دلیل اصلی این اختلاف می‌تواند با توجه به تجمعات نانولوله‌های کربنی توجیه شود.



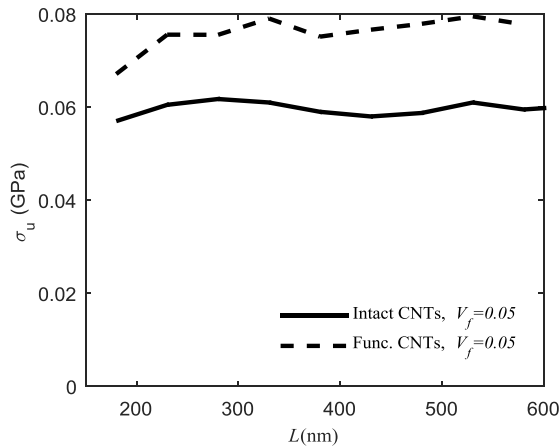
شکل ۱۳ نمودار تنش-کرنش برای مقادیر متفاوت σ_N



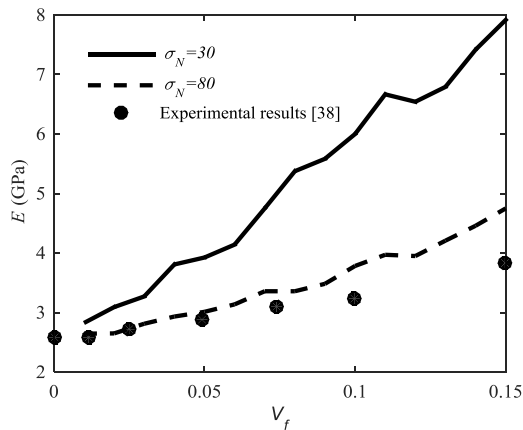
شکل ۱۲ مدل اجزای محدود شکست در نانوکامپوزیت پلیمری با $V_f = 0.05$: (الف) نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربنی سالم، (ب) نانولوله کربنی عامل‌دار شده به همراه همان‌هایی که در اثر افزایش تنش حذف شده‌اند

۵- توزیع یکنواخت نانولوله‌های منحنی

یکی از عوامل موثر در خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری، اثر اعوجاج در نانولوله‌های کربنی می‌باشد. بر این اساس در این تحقیق تلاش شده است، اثر انحنای اعوجاج و توزیع در جهات مختلف نانولوله‌های کربنی بر روی مدول الاستیسیته و شکست نانوکامپوزیت پلیمری بررسی گردد. اگرچه برخی از مراجع حالت توزیع در جهات مختلف را توسط نانولوله مستقیم بررسی نموده‌اند، این توزیع با توجه به نسبت منطقی بالای نانولوله‌های کربنی امکان‌پذیر نمی‌باشد. از این رو، در این تحقیق اثر توزیع در جهات مختلف تنها به همراه اعوجاجی که در نانولوله ایجاد می‌گیرد، مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت. همان‌طور که در الگوریتم مدل‌سازی اجزای محدود حجم مبین بیان گردید، با تغییر مقدار σ_N می‌توان توزیع موردنظر برای تیر معادل، با اعوجاج دلخواه را ترسیم نمود. در شکل ۱۳ نمودار تنش-کرنش نانوکامپوزیت برای مقادیر متفاوت σ_N ، ترسیم شده است. در این شکل مشاهده می‌گردد، شکل منحنی و توزیع در جهات متفاوت، صرف‌نظر از سالم بودن یا عامل‌دار بودن نانولوله، به مقدار قابل‌توجهی باعث کاهش مدول الاستیسیته و استحکام نهایی می‌گردد. با این حال از این شکل می‌توان دریافت که مقدار کرنش نهایی بهبود پیدا می‌کند. در این شکل مشاهده می‌شود که برای یک حجم مبین با نانولوله‌های موج‌دار و خمیده، استفاده از نانولوله‌های عامل‌دار شده نمی‌تواند تاثیر چشمگیری در بهبود خواص مکانیکی نانوکامپوزیت داشته باشد. از این رو توصیه می‌گردد فرآیند عامل‌دار کردن نانولوله‌های کربنی به همراه هم‌راستا نمودن نانولوله‌ها انجام گردد. در غیر این صورت این پروسه تاثیر چندانی بر روی خواص نانوکامپوزیت نخواهد داشت.



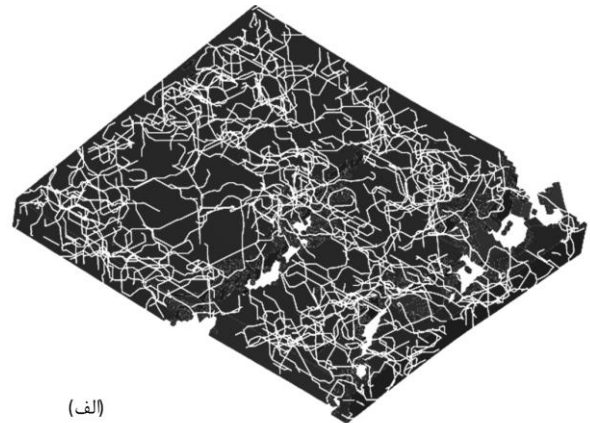
شکل ۱۶ تنش نهایی در نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های کربنی سالم و عامل‌دار شده به ازای تغییر در طول نانولوله‌ها که در آن $\sigma_N = 30$



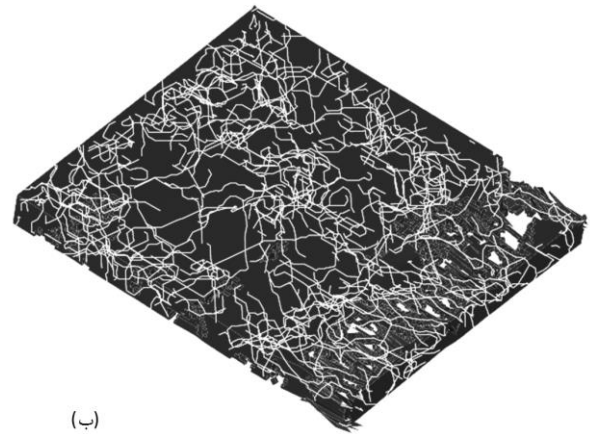
شکل ۱۷ مدول الاستیسیته حجم مبین برحسب درصد حجمی نانولوله‌های کربنی

در مدل‌سازی در ابعاد نانو یک روش پیوسته بر اساس روش اجزای محدود تعریف گردید که در آن تاثیر عواملی چون نقص ساختاری، پیوند کوالانسی ناشی از عامل‌دار کردن نانولوله‌کربنی بر روی خواص غیرخطی تیر معادل با تعریف پنج شرط مرزی متفاوت بررسی گردید. مشاهده شد، مدول الاستیسیته تیر معادل نانولوله عامل‌دار شده به دلیل وجود نقص‌های ساختاری در مقایسه با تیر معادل تقویت شده با نانولوله‌های کربنی سالم کاهش یافته است. برای مدل‌سازی در ابعاد میکرو، یک الگوریتم جدید برای ترسیم نانولوله‌های کربنی در ماتریس پلیمری ارائه شد که توانایی مدل‌سازی عوامل موثر بر روی خواص مکانیکی مانند توزیع، انحنا، اعوجاج، درصد حجمی، طول نانولوله‌های کربنی را در ماتریس پلیمری دارا می‌باشد. به‌منظور صحت‌گذاری بر نتایج این مدل‌سازی یک حل تحلیلی نیز بر اساس روش موری-تاناکا معرفی گردید و مشاهده شد، نتایج حل تحلیلی و مدل اجزای محدود انطباق بسیار خوبی برای نانولوله‌های کربنی با طول بسیار بلند دارند. در ادامه مشاهده گردید عامل‌دار کردن نانولوله‌های کربنی کمی باعث کاهش مدول الاستیسیته می‌گردد ولی استحکام نهایی را بهبود می‌بخشد. از سوی دیگر این فرآیند باعث کاهش شکنندگی در نانوکامپوزیت می‌شود.

همچنین، انحنا نانولوله‌های کربنی در کاهش خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تاثیر بسیار زیادی دارد و این کاهش خواص برای

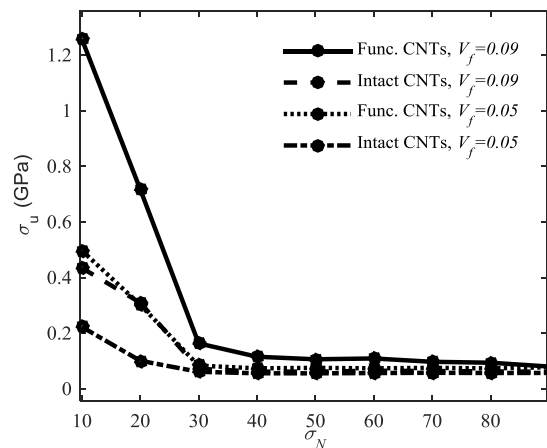


(الف)



(ب)

شکل ۱۴ مدل اجزای محدود شکست در نانوکامپوزیت پلیمری برای $\sigma_N = 80, V_f = 0.05$ (الف) نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله‌کربنی سالم، (ب) نانولوله‌کربنی عامل‌دار شده



شکل ۱۵ استحکام نهایی در نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های کربنی سالم و عامل‌دار شده به ازای تغییر در σ_N ، برای مقادیر متفاوت درصد حجمی

۶- نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از مدل‌سازی سه‌بعدی در ابعاد نانو و میکرو، تاثیر عوامل متفاوت موثر بر روی خواص مکانیکی و مکانیزم شکست در نانوکامپوزیت پلیمری با ماتریس اپوکسی مورد ارزیابی قرار گرفت. بر این اساس تاثیر عواملی چون طول، سالم یا عامل‌دار بودن، درصد حجمی، توزیع و انحنا نانولوله‌های کربنی بر روی خواص نانوکامپوزیت پلیمری مطالعه شد.

نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌ها کربنی عامل‌دار بسیار مشهودتر می‌باشد. علاوه بر آن، افزایش طول نانولوله‌های کربنی می‌تواند باعث بهبود خواص مکانیکی نانوکامپوزیت شود با این شرط که میزان اعوجاج و انحنای نانولوله‌های کربنی زیاد نباشد در غیر این صورت این دو فاکتور تاثیر چندانی بر خواص نانوکامپوزیت ندارند.

۷- مراجع

- Micro Scale", In persian, Modares Mechanical Engineering, Vol. 13, No. 5, pp. 11, 2013.
- [22] Esbati, A. H. and Irani, S., "Probabilistic Mechanical Properties and Reliability of Carbon Nanotubes, Probabilistic Engineering Mechanics", Vol. in Press, 2016.
- [23] Mohammadpour, E. Awang, M. Kakooei, S. and Akil, H. M., "Modeling the Tensile Stress-Strain Response of Carbon Nanotube/Polypropylene Nanocomposites Using Nonlinear Representative Volume Element", Materials & Design, Vol. 58, pp. 36-42, 2014.
- [24] Odegard, G. Gates, T. Wise, K. Park, C. and Siochi, E., "Constitutive Modeling of Nanotube-Reinforced Polymer Composites", Composites science and technology, Vol. 63, No. 11, pp. 1671-1687, 2003.
- [25] Belytschko, T. Xiao, S. Schatz, G. and Ruoff, R., "Atomistic Simulations of Nanotube Fracture", Physical Review B, Vol. 65, No. 23, pp. 235430, 2002.
- [26] Ma, P.-C. Zheng, Q.-B. Mäder, E. and Kim, J.-K., "Behavior of Load Transfer in Functionalized Carbon Nanotube/Epoxy Nanocomposites", Polymer, Vol. 53, No. 26, pp. 6081-6088, 2012.
- [27] Hashin, Z. and Rosen, B. W., "The Elastic Moduli of Fiber-Reinforced Materials", Journal of Applied Mechanics, Vol. 31, No. 2, pp. 223-232, 1964.
- [28] Odegard, G. M. Frankland, S.-J. V. and Gates, T. S., "Effect of Nanotube Functionalization on the Elastic Properties of Polyethylene Nanotube Composites", Aiaa Journal, Vol. 43, No. 8, pp. 1828-1835, 2005.
- [29] Shokrieh, M. M. and Mahdavi, S., "Micromechanical Model to Evaluate the Effects of Dimensions and Interphase Region on the Elastic Modulus of Cnt/Polymer Composites", In Persian, Modares Mechanical Engineering, Vol. 11, No. 3, pp. 12, 2011.
- [30] Popov, V. Van Doren, V. and Balkanski, M., "Elastic Properties of Crystals of Single-Walled Carbon Nanotubes", Solid State Communications, Vol. 114, No. 7, pp. 395-399, 2000.
- [31] Han, F. Azdoud, Y. and Lubineau, G., "Computational Modeling of Elastic Properties of Carbon Nanotube/Polymer Composites with Interphase Regions. Part II: Mechanical Modeling, Computational Materials Science", Vol. 81, No. 0, pp. 652-661, 2014.
- [32] Mura, T., "Micromechanics of Defects in Solids": Springer Science & Business Media, 2013.
- [33] Hill, R., "A Self-Consistent Mechanics of Composite Materials", Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 13, No. 4, pp. 213-222, 1965.
- [34] Esbati, A. H. and Irani, S., "Mechanical Properties and Fracture Analysis of Functionalized Carbon Nanotube Embedded by Polymer Matrix", Aerospace Science and Technology, Vol. 55, pp. 120-130, 2016.
- [35] Huang, Y. Y. Hwang, K.-C. and Gao, H., "The Effect of Nanotube Waviness and Agglomeration on the Elastic Property of Carbon Nanotube-Reinforced Composites", Urbana, Vol. 51, pp. 61801, 2004.
- [36] Shen, J. Huang, W. Wu, L. Hu, Y. and Ye, M., "The Reinforcement Role of Different Amino-Functionalized Multi-Walled Carbon Nanotubes in Epoxy Nanocomposites", Composites Science and Technology, Vol. 67, No. 15, pp. 3041-3050, 2007.
- [37] Andrews, R. Jacques, D. Minot, M. and Rantell, T., "Fabrication of Carbon Multiwall Nanotube/Polymer Composites by Shear Mixing", Macromolecular Materials and Engineering, Vol. 287, No. 6, pp. 395-403, 2002.
- [1] Iijima, S., "Helical Microtubules of Graphitic Carbon", nature, Vol. 354, No. 6348, pp. 56-58, 1991.
- [2] Mittal, G. Dhand, V. Rhee, K. Y. Park, S.-J. and Lee, W. R., "A Review on Carbon Nanotubes and Graphene as Fillers in Reinforced Polymer Nanocomposites", Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 21, No. 0, pp. 11-25, 1/25/, 2015.
- [3] Esbati, A. and Irani, S., "Failure Analysis of Cnts with Stone -Wales Defect Using Nonlinear Finite Element Method, Mechanics of Composite Materials", Vol. in Press, 2016.
- [4] Goh, M. Park, O.-k. Choi, Y. M. Ku, B.-c. Lee, J. H. You, N. H. and You, H. S., "Post-Treatment Method of Carbon Materials for Improving the Electrical Conductivity and Mechanical Properties Via Dehydrocyclization Reaction and Polymer Composite Materials Comprising the Treated Carbon Materials", US Patent 9,040,015, 2015.
- [5] Jiang, Q. Wang, X. Zhu, Y. Hui, D. and Qiu, Y., "Mechanical, Electrical and Thermal Properties of Aligned Carbon Nanotube/Polyimide Composites", Composites Part B: Engineering, Vol. 56, pp. 408-412, 2014.
- [6] Ansari, R. and Rouhi, S., "Atomistic Finite Element Model for Axial Buckling of Single-Walled Carbon Nanotubes", Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, Vol. 43, No. 1, pp. 58-69, 2010.
- [7] Ansari, R. Motevalli, B. Montazeri, A. and Ajori, S., "Fracture Analysis of Monolayer Graphene Sheets with Double Vacancy Defects Via Md Simulation", Solid State Communications, Vol. 151, No. 17, pp. 1141-1146, 2011.
- [8] Yengejeh, S. I. Zadeh, M. A. and Öchsner, A., "On the Tensile Behavior of Hetero-Junction Carbon Nanotubes", Composites Part B: Engineering, Vol. 75, pp. 274-280, 2015.
- [9] Bhattacharyya, A. R. Sreekumar, T. Liu, T. Kumar, S. Ericson, L. M. Hauge, R. H. and Smalley, R. E., "Crystallization and Orientation Studies in Polypropylene/Single Wall Carbon Nanotube Composite", Polymer, Vol. 44, No. 8, pp. 2373-2377, 2003.
- [10] Jia, Z. Wang, Z. Xu, C. Liang, J. Wei, B. Wu, D. and Zhu, S., "Study on Poly (Methyl Methacrylate)/Carbon Nanotube Composites", Materials Science and Engineering: A, Vol. 271, No. 1, pp. 395-400, 1999.
- [11] Wong, M. Paramsothy, M. Xu, X. Ren, Y. Li, S. and Liao, K., "Physical Interactions at Carbon Nanotube-Polymer Interface", Polymer, Vol. 44, No. 25, pp. 7757-7764, 2003.
- [12] Haggenueller, R. Gommans, H. Rinzler, A. Fischer, J. E. and Winey, K., "Aligned Single-Wall Carbon Nanotubes in Composites by Melt Processing Methods", Chemical physics letters, Vol. 330, No. 3, pp. 219-225, 2000.
- [13] Qian, D. Dickey, E. C. Andrews, R. Rantell, T., "Load Transfer and Deformation Mechanisms in Carbon Nanotube-Polystyrene Composites", Applied physics letters, Vol. 76, No. 20, pp. 2868-2870, 2000.
- [14] Liu, T. Phang, I. Y. Shen, L. Chow, S. Y. and Zhang, W.-D., Morphology and "Mechanical Properties of Multiwalled Carbon Nanotubes Reinforced Nylon-6 Composites, Macromolecules", Vol. 37, No. 19, pp. 7214-7222, 2004.
- [15] Withers, G. Souza, J. Yu, Y. Cercone, L. Khabashesku, V. and Davis, D., "Improved Mechanical Properties of a Water-Activated Polyurethane-Glass Fiber Composite Reinforced with Amino-Functionalized Carbon Nanofibers", Journal of Composite Materials, 0021998315581510, 2015.
- [16] Brcic, M. Canadija, M. and Brnic, J., "Multiscale Modeling of Nanocomposite Structures with Defects, Key Engineering Materials", Vol. 577, pp. 141-144, 2014.
- [17] Shokrieh, M. M. and Rafiee, R., "Stochastic Multi-Scale Modeling of Cnt/Polymer Composites", Computational Materials Science, Vol. 50, No. 2, pp. 437-446, 2010.
- [18] Ayatollahi, M. R. Shadlou, S. and Shokrieh, M. M., "Multiscale Modeling for Mechanical Properties of Carbon Nanotube Reinforced Nanocomposites Subjected to Different Types of Loading, Composite Structures", Vol. 93, No. 9, pp. 2250-2259, 2011.
- [19] Zakeri, M. Shayanmehr, M. and Shokrieh, M. M., "Interface Modeling of Nanotube Reinforced Nanocomposites by Using Multi-Scale Modeling Method", In Persian, Modares Mechanical Engineering, Vol. 12, No. 2, pp. 11, 2013.
- [20] Li, C. and Chou, T.-W., "Failure of Carbon Nanotube/Polymer Composites and the Effect of Nanotube" Waviness, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, Vol. 40, No. 10, pp. 1580-1586, 2009.
- [21] Fereidoon, A. Saeedi, E. and Hemmatian, H., "Prediction of Nanocomposite Effective Elastic Moduli by Finite Element Modeling in