

پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی تک‌جداره با در نظر گرفتن جدایش سطحی بین فازی

محمدعلی مقصودلوراد^۱، رضا بارباز اصفهانی^۲، سعید صابر سمندری^۳، مجتبی صدیقی^۴

۱. دانشجو کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

۲. دانشجو دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک، پژوهشکده فناوری نو، گروه مواد پیشرفته، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

۳. استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، پژوهشکده فناوری نو، گروه مواد پیشرفته، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

۴. استاد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

چکیده

در این پژوهش به بررسی تجربی و عددی مدول یانگ اپوکسی تقویت شده با نانولوله کربنی تک‌جداره پرداخته شده است. در ابتدا، شبیه‌سازی المان محدود برای پیش‌بینی مدول الاستیسیته بدون در نظر گرفتن جدایش بین ماتریس و نانولوله کربنی صورت گرفت و مشاهده شد که نتایج این مدل با نتایج تجربی اختلاف زیادی دارد که دلیل آن فرض ناقص اتصال کامل ماتریس و نانولوله است. در مرحله بعدی با در نظر گرفتن جدایش، شبیه‌سازی انجام شد. با محاسبه تنش‌های بحرانی جدایش و تعریف المان سطحی چسبنده در نرم‌افزار ABAQUS، مدول الاستیسیته محاسبه شد. در مرحله آخر با در نظر گرفتن انحنا در نانولوله‌های کربنی، شبیه‌سازی انجام شده و نتایج ارائه گردید. با مقایسه نتایج، مشاهده شد که مدل با فرض جدایش ماتریس و نانولوله بیش‌ترین تطابق را با نتایج تجربی دارد.

تاریخ دریافت:

۹۵/۵/۳۰

تاریخ پذیرش:

۹۵/۱۱/۱

نانوکامپوزیت مدول الاستیسیته، شبیه‌سازی المان محدود، جدایش

واژگان کلیدی

۱) مقدمه

طی دهه‌های گذشته، نانوکامپوزیت‌ها به دلیل خواص منحصر به فرد، مورد توجه قرار گرفته‌اند جلب کرده‌اند. دلیل اصلی افزودن نانوذرات به پلیمر، بهبود خواص پلیمرهای خالص است. پلیمرهای تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی یکی از پرکاربردترین نانوکامپوزیت‌ها در سال‌های اخیر هستند. به دلیل نسبت منظری و نسبت تماس بالای نانوذرات، نانولوله‌های کربنی می‌توانند خواص مکانیکی پلیمرها را افزایش دهند [۱]. در حالت کلی سه روش برای تعیین و پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت‌ها وجود دارد: آزمایشگاهی، تحلیلی و عددی. اخیراً، بیشتر تحقیقات بر روی پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی به روش تحلیلی [۲، ۳]، المان محدود [۴] یا ترکیبی از این دو روش [۵] متمرکز شده است. در تحقیقات پیشین، اختلاف مدول محاسبه‌شده بین این سه روش را بیان کرده‌اند. کلتزیدو^۱ و همکاران [۶] تطابق خوبی بین نتایج حاصل از مدل هالپین-سای و نتایج تجربی را برای درصد‌های وزنی پایین نانوکلی گزارش کرده‌اند. اما با افزایش نانوکلی، مدل‌های تحلیلی نسبت به نتایج تجربی، مدول یانگ بزرگ‌تری را تخمین می‌زنند؛ که دلیل آن می‌تواند به خاطر انباشتگی نانوکلی در فاز زمینه باشد که در مدل‌های تحلیلی اعمال نمی‌شوند. براساس تحقیقات شنگ^۲ و همکارانش [۵] می‌توان به این نتیجه رسید که مدل یانگ حاصل از روش‌های المان محدود و مدل‌های تحلیلی بزرگ‌تر از نتایج تجربی است. همچنین اختلاف نتایج تحلیلی و تجربی با افزایش درصد حجمی نانوذرات ناشی از اتصال ناقص بین نانوذرات و فاز زمینه است [۷]. نتایج مشابه را می‌توان در مراجع [۸، ۹] مشاهده کرد. برخلاف مواد کامپوزیتی، مدول یانگ نانوکامپوزیت‌ها با افزایش درصد وزنی نانوذرات به طور پیوسته افزایش نمی‌یابد. در نانوکامپوزیت‌ها، با افزایش درصد وزنی نانوذرات مدول یانگ افزایش می‌یابد تا زمانی که به حد بحرانی برسد که آن را حد بهینه درصد وزنی می‌نامند. بعد از این نقطه به دلیل تمرکز تنش موجود در نمونه، مدول یانگ کاهش می‌یابد [۱۰، ۱۱]. درحالی‌که مدول یانگ پیش‌بینی‌شده به روش المان محدود و مدل‌های تحلیلی با افزایش درصد وزنی نانوذرات همواره صعودی هستند؛ که بنا به مسایل مذکور نتایج درستی نیستند. علاوه بر این، بعضی از فرضیات نظیر اتصال کامل و عدم لغزش نانوذرات و فاز زمینه در تمامی مدل‌های المان محدود مورد بررسی در تحقیقات پیش مورد استفاده قرار گرفته است [۱۲، ۱۳]. فرضیه اتصال کامل و قوی نانوذرات با فاز زمینه، فرضیه کاملی نیست [۱۴]. بر اساس مرجع [۱۵] جدایش نانوذره و فاز زمینه یک نوع مود خرابی در نانوکامپوزیت‌ها به حساب می‌آید. جدایش باعث می‌شود انرژی کرنشی موجود در نانوذره آزاد شده و حفره ایجاد شود.

مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که جدایش نانوذرات که با رشد حفره همراه است، در پلیمرها رخ می‌دهد. دست‌جردی و همکاران [۱۵] اختلاف فاحشی بین نتایج تجربی و مدل بدون جدایش در نمودار تنش-کرنش نانوکامپوزیت AZ31 / Al₂O₃ تحت کشش تک‌محوره گزارش کرده‌اند که دلیل آن همان فرضیه ناقص مدل بدون جدایش است. در سال‌های اخیر، تحقیقات زیادی بر روی مدل‌های با جدایش متمرکز شده است تا بتوانند تنش بحرانی برای جدایش نانوذرات و فاز زمینه پیشنهاد کنند. با مشاهده مراجع [۱۵-۱۷] باید به این نکته اشاره کرد که بیشتر نانوذرات مورد بررسی به شکل کروی بوده‌اند. در این پژوهش بررسی تجربی و عددی مدول یانگ پلیمر/نانولوله کربنی انجام شده است. هدف اصلی از این تحقیق بررسی جدایش و عدم جدایش و اعمال شعاع انحنا برای نانولوله‌های کربنی است. المان حجمی نماینده شامل نانولوله، فاز میانی و پلیمر با توزیع تصادفی نانولوله در پلیمر در نرم‌افزار آباکوس شبیه‌سازی شد. نتایج نشان دادند که با در نظر گرفتن جدایش و شعاع انحنا برای نانولوله در مدل‌های المان محدود، اختلاف نتایج تجربی و عددی کاهش می‌یابد.

۲) روش تحقیق

۱(۲) روند آزمایشگاهی

۱(۱) مواد اولیه

در این تحقیق از رزین اپوکسی بر پایه بیسفنول و هاردنر آن (خریداری شده از شرکت لاوان، ایران) با نسبت ترکیب وزنی ۱۰۰:۱۰ استفاده شده است. نانولوله مورد استفاده در این پژوهش نانولوله کربنی تک‌جداره عامل‌دار OH (خریداری شده از US Research Nanomaterials، آمریکا) است.

۲(۱) ساخت نمونه‌ها و آزمون کشش

نمونه‌های ساخته شده در این قسمت به منظور انجام آزمون کشش و حصول مدول یانگ می‌باشد. درصد وزنی نانولوله استفاده شده در نمونه‌های نانوکامپوزیتی صفر، ۰/۱، ۰/۳، ۰/۵ و درصد وزنی نسبت به کل محلول (مجموع وزن اپوکسی، هاردنر و نانولوله) انتخاب شده است. برای پخش نانولوله درون اپوکسی، ابتدا نانولوله به اپوکسی اضافه شده و به صورت دستی به مدت ۱۰ دقیقه هم زده شده است سپس با استفاده از دستگاه آلتراسونیک Bandelin ساخت کشور آلمان، فرآیند پخش با ۵۰ درصد دامنه دستگاه به مدت ۲۵ دقیقه صورت پذیرفته است. سپس برای خروج حباب‌های ریز درون محلول، به مدت ۲۰ دقیقه درون آون خلأ قرار داده شده است. پس از خروج حباب‌های احتمالی ایجاد شده در این مرحله، محلول حاصل درون قالب‌های رو بازی که مطابق با استاندارد ASTM D638 [۱۸] هستند، ریخته شده است. پس از گذشت یک هفته از ساخت نمونه‌ها برای پخت، آزمون‌های کشش در دستگاه کشش تک‌محوره با سرعت ۴ میلی‌متر بر دقیقه انجام شده است.

1 Kalaitzidou

2 Sheng



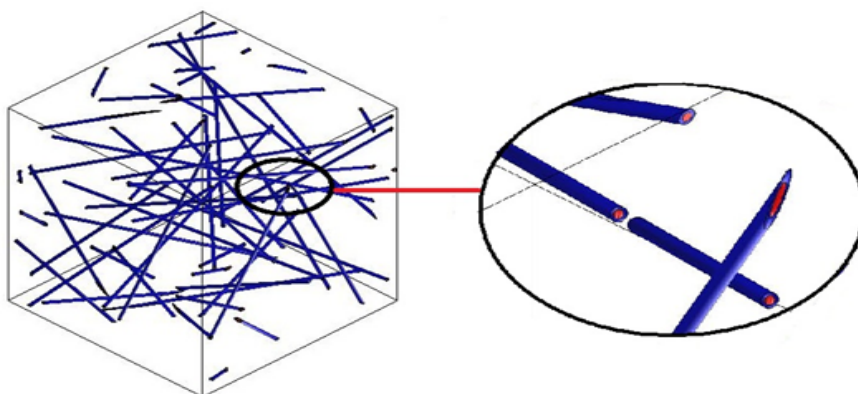
شکل ۱) قالب سیلیکونی و نمونه‌های کشش با استاندارد ASTM D6۳۸

که با دریافت پارامترهای ورودی مطابق با هربخش (از قبیل ضریب منظری نانولوله، درصد وزنی نانولوله، مدول الاستیسیته هر فاز و ...)، به تولید خودکار یک المان نماینده بدون تداخل نانولوله‌ها با یکدیگر می‌پردازد. شکل ۱ تصویری از المان نماینده تولید شده به صورت خودکار را نمایش می‌دهد.

۲-۲-۱-۲ خواص مکانیکی و شرایط مرزی برای نانولوله پارامتری هندسی به نام ضریب منظری تعریف می‌شود که به صورت نسبت طول نانولوله به قطر آن بیان می‌گردد. در اکثر منابع ذکر شده که ضریب منظری نانولوله بین ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ [۲۱] می‌باشد. از طرف دیگر قطری که برای نانولوله بیان شده، ۱ نانومتر است. در تحقیق حاضر با انتخاب ضریب منظری ۵۰۰ و قطر ۱ نانومتر، مدل‌سازی صورت پذیرفته است. ابعاد هندسی در نظر گرفته شده برای نانولوله و فاز واسطه در جدول ۱ خلاصه شده است.

جدول ۱) ابعاد هندسی در نظر گرفته شده برای نانولوله و فاز واسطه

فاز	طول (nm)	قطر (nm)
نانولوله	۵۰۰	۱
فاز واسطه	۵۰۲	۲



شکل ۲) المان نماینده تولید شده با سه فاز ماتریس، نانولوله و فاز واسطه

۲(۲) شبیه‌سازی المان محدود ۱(۲) شبیه‌سازی بدون در نظر گرفتن جدایش ۱(۱) المان نماینده

یک المان نماینده متشکل از سه فاز ماتریس و فاز واسطه و نانولوله با هندسه سه بعدی در نرم‌افزار Abaqus مدل‌سازی شده است. با توجه به ماهیت نانولوله‌ها، در این شبیه‌سازی به صورت استوانه مدل‌سازی شده‌اند. توزیع نانولوله درون ماتریس در مدل المان محدود سه بعدی و سه فازی به صورت تصادفی در نظر گرفته شده تا جواب‌های مدل‌سازی عددی با نمونه‌های تجربی تطابق بیشتری داشته باشد [۱۹]. تحقیقات پیشین ثابت کرده‌اند که در کامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات، فاز واسطه نقش بسیار مهمی را بین ماتریس و نانوذره ایفا می‌کند؛ در نتیجه باید در مدل‌سازی برای پیش‌بینی خواص مکانیکی آن‌ها در نظر گرفته شود [۲۰]. با توجه به دشوار بودن توزیع تصادفی نانولوله درون ماتریس به صورت دستی و با توجه به بررسی تعداد زیادی المان نماینده و تغییر ورودی‌های آن به ازای هر مدل‌سازی، کدنویسی به زبان پایتون در قسمت ABAQUS PDE صورت گرفت

۲(۲) شبیه‌سازی با در نظر گرفتن جدایش

۱(۲(۲) مقدمه و روابط مورد نیاز

در مدل‌های تئوریمعمولاً فرض بر این است که تماس مابین تقویت‌کننده در مقیاس نانو و ماتریس از نوع ایده‌آل بوده و هیچ‌گونه جدایشی بین آن‌ها اتفاق نمی‌افتد. این در حالی است که فرض تماس ایده‌آل در نانوکامپوزیت‌ها همواره فرض صحیحی نیست [۱۵]. در نانوکامپوزیت‌ها انواع مودهای خرابی شامل شکست تقویت‌کننده و جدایش بین تقویت‌کننده و ماتریس وجود دارند. هنگامی که جدایش بین تقویت‌کننده و ماتریس اتفاق می‌افتد، انرژی کرنشی الاستیک ذخیره شده در تقویت‌کننده آزاد شده و سبب ایجاد سطوح جدیدی می‌شود. نانوذراتی که به صورت کامل از ماتریس جدا شوند، ظرفیت باربری خود را از دست داده و به عنوان حفره عمل می‌کنند [۱۵]. برای نانوکامپوزیت تقویت‌شده با شکل نانوذره کروی و در حالت سه فازی، مقدار تنش بحرانی در سطح مشترک ماتریس و تقویت‌کننده که برای مقادیر بیشتر از آن جدایش رخ می‌دهد، از رابطه (۳) محاسبه می‌شود [۲۴]:

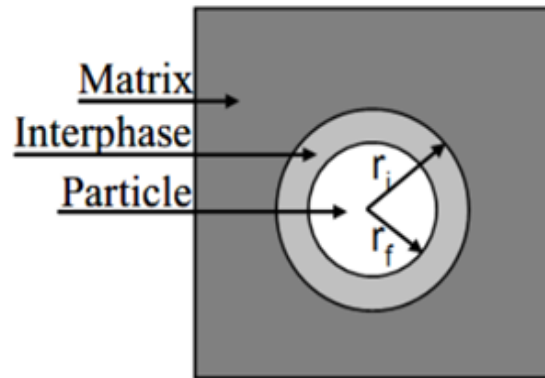
$$\sigma_{cr} \cong \sqrt{\frac{\gamma}{r_0}} \frac{4E_m}{1+\nu_m} \sqrt{\frac{\chi(4+\xi) - \xi(\chi-1)(r_0/a)^3}{4+\xi+4(\chi-1)(r_0/a)^3}} \quad (3)$$

که در این رابطه γ انرژی مخصوص چسبندگی سطح مشترک بوده و واحد آن J/m^2 می‌باشد. a و r_0 به ترتیب شعاع ذره کروی و شعاع ناحیه فاز واسطه هستند. ضمن آنکه سایر پارامترهای موجود در رابطه (۳)، به صورت زیر تعریف می‌شوند [۲۴]:

$$\chi = \frac{G_i}{G_m} \quad \xi = \frac{3K_i}{G_m} \quad K_i = \frac{E_i}{3(1-2\nu_i)} \quad (4)$$

مطابق رابطه (۴)، تنش بحرانی سطح مشترک نه تنها به ماتریس و تقویت‌کننده وابسته است، بلکه به خواص فاز واسطه نیز بستگی دارد. مقدار γ برای رزین‌هایی با انرژی سطحی بالا حدود $۵۰/۴ - ۶۴/۶$ mJ/m^2 تغییر می‌کند [۲۵]. به علت عدم دسترسی به مقدار این پارامتر برای اپوکسی، میانگین این بازه، یعنی ۴۰ در نظر گرفته شده است. تنش بحرانی برشی برای این نوع نانوکامپوزیت با توجه به مرجع [۲۶]، بین $۳۰ - ۱۵۰$ Mpa ذکر شده که میانگین این بازه، یعنی ۹۰ Mpa، به عنوان تنش بحرانی برشی انتخاب شده است.

مدول الاستیسیته نانولوله و اپوکسی در اکثر مقالات آورده شده ولی از آنجا که فاز واسطه ساختار پیچیده‌تر و مبهمی دارد، مدول الاستیسیته آن به طور واضح در مقالات آورده نشده است. صابرسمندری و همکاران [۲۲]، مدول فاز واسطه برای یک نانوکامپوزیت زمینه پلیمری تقویت‌شده با نانوذره کروی با مدل سه فازی مطابق شکل ۲ را به صورت زیر بیان نموده‌اند:



شکل ۳) نانوذره کروی در نظر گرفته شده در مرجع [۲۲]

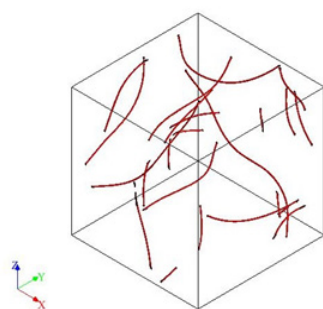
$$\tilde{E}_i = E_m * \frac{r_i}{r} + [(r_i - r) / (r_i - r_f)]^{n/2} * [E_f - E_m * \frac{r_i}{r_f}] \quad (1)$$

که در رابطه (۱)، E_i و E_f و E_m به ترتیب بیانگر مدول الاستیسیته فاز واسطه در شعاع r ، مدول الاستیسیته تقویت‌کننده و مدول الاستیسیته ماتریس می‌باشند و r_f شعاع تقویت‌کننده و r_i شعاع بیرونی فاز واسطه است. ضمن آنکه n ضریبی بی‌بعد بوده و وابسته به رفتار شیمیایی، عملیات حرارتی و نحوه توزیع نانوذرات در ماتریس است [۱۲، ۲۲]. مطابق با رابطه (۱)، مدول فاز واسطه بسته به فاصله r متغیر است، در نتیجه مدول الاستیسیته میانگین فاز واسطه به صورت انتگرالی (۲) تعریف می‌شود:

$$E_i = \frac{1}{r_i - r_f} * \int_{r_f}^{r_i} \tilde{E}_i(r) dr \quad (2)$$

در مواردی که تقویت‌کننده در مقیاس نانو، شکلی غیر از کروی (استوانه‌ای، صفحه‌ای) داشته باشد، می‌توان از روابط اخیر نیز استفاده کرد. برای نانوذره به شکل استوانه‌ای، Π و f به ترتیب به نصف قطر استوانه و نصف قطر فاز زمینه تعریف می‌گردد [۲۳]. با احتساب $n=13$ مدول الاستیسیته فاز واسطه محاسبه شده است. لازم به ذکر است که با توجه به درد دست نبودن مقادیر چگالی و ضریب پواسون فاز واسطه، این دو کمیت به صورت میانگین مقادیر متناظر دو فاز دیگر در نظر گرفته شده است.

برای اعمال شرایط مرزی، دو نوع شرط مرزی متقارن و یا پریودیک را می‌توان در نظر گرفت. در مرجع [۴] نشان داده شده که شرط مرزی متقارن در عین سادگی، نتایج نزدیکی را به شرط پریودیک می‌دهد، بنابراین از شرط مرزی متقارن استفاده شده است.

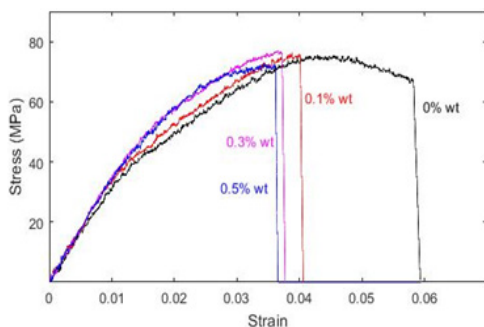


شکل ۴) المان نماینده تولید شده با در نظر گرفتن انحنا

۳) نتایج و بحث

۱) ۳) مدول الاستیسیته تجربی

به ازای هر درصد وزنی نانولوله، ۴ نمونه آزمون کشش انجام شد که میانگین نتایج در شکل (۵) مشاهده می‌شود. برای راحتی در مقایسه مدول یانگ در جدول (۲) ارائه شده است. با توجه به نمودارها و جدول، با افزایش درصد وزنی نانولوله تا ۰/۳ درصد مدول یانگ افزایش و برای نمونه ۰/۵ درصد به صورت جزئی کاهش می‌یابد.



شکل ۵) نمودار تنش - کرنش نمونه‌ها تحت آزمون کشش

۲) ۲) ۲) المان نماینده

تمامی مراحل شبیه‌سازی و شرایط مرزی همانند قسمت قبل انجام شده است. با این تفاوت که با تعریف المان چسبنده و اعمال تنش‌های بحرانی محاسبه شده مابین دو فاز تقویت‌کننده و ماتریس، مدول یانگ المان نماینده و در نتیجه نانوکامپوزیت محاسبه شده است.

۲) ۲) ۳) شبیه‌سازی با در نظر گرفتن انحنا

در این تحقیق، نانولوله‌ها به شکل استوانه‌هایی با نسبت منطری و قطر ثابت مدل شده‌اند. در صورتی که با توجه به تصاویر SEM موجود در مرجع [۲۷] مشاهده شده که نانولوله‌ها دارای انحنا هستند. در نتیجه برای تطابق دقیق‌تر نتایج شبیه‌سازی با نمونه‌های تجربی، با اعمال شعاع انحنا در نانولوله‌ها و تشکیل مجدد المان نماینده در حالت دو فازی (تقویت‌کننده و ماتریس) شبیه‌سازی انجام و مدول یانگ محاسبه شده است. شکل (۳) یک نمونه المان نماینده با نانولوله‌های دارای شعاع انحنا را نشان می‌دهد.

جدول ۲) مدول یانگ نتایج آزمون کشش

مدول یانگ (Mpa)	درصد وزنی CNT
۲۶۷۴/۰۴	۰
۲۷۶۷/۵۹	۰/۱
۲۸۸۷/۹۲	۰/۳
۲۸۶۹/۲۰	۰/۵



شکل ۶) دستگاه آزمایش کشش

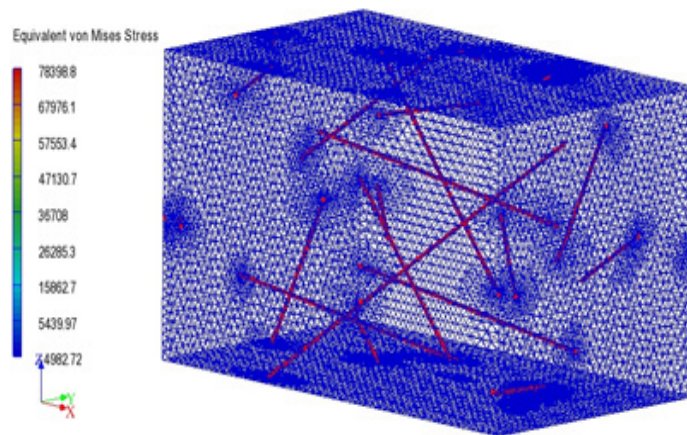
۲(۳) مقایسه نتایج مدل بدون جدایش و نتایج تجربی

با در نظر گرفتن المان مکعبی شکل به طول ۵۰۰ نانومتر، نتایج مقایسه‌ای مدول الاستیسیته به روش عددی و تجربی برای نمونه‌های ۰/۱، ۰/۳ و ۰/۵ درصد وزنی نانولوله در جدول (۳) آورده شده‌است.

همان‌طور که در جدول مشاهده می‌شود، با افزایش درصد وزنی نانولوله، اختلاف میان داده‌های تجربی با داده‌های عددی زیاد می‌شود. علت این اختلاف می‌تواند مرتبط با به هم چسبیدگی ذرات و عدم در نظر گرفتن پدیده جدایش بین نانولوله و ماتریس و وجود حباب‌های ریز در درون نمونه‌ها باشد.

۳(۳) مقایسه نتایج مدل با جدایش و نتایج تجربی

تمامی روابط ارائه شده در بحث جدایش، برای ذرات کروی شکل بوده و روابطی برای جدایش ذرات استوانه‌ای ارائه نگردیده است. در این پژوهش بر اساس سعی و خطا، مشاهده شده که اگر یک‌دهم طول نانولوله به عنوان شعاع معادل در ذرات کروی و روابط موجود مورد استفاده قرار گیرد، نتایج قابل قبولی به دست خواهد آمد. با اعمال این پیش‌فرض و جایگذاری در رابطه (۳)، تنش بحرانی نرمال برای نانوکامپوزیت بررسی شده در این پژوهش برابر با ۱۸۳/۵۱ MPa به دست آمد. با توجه با تنش‌های بحرانی و تعریف المان چسبیده در نرم‌افزار Abaqus و اعمال کرنش به المان نماینده نتایج جدول (۴) به دست آمده است.



شکل (۷) نتیجه عددی کشش المان با فرض عدم جدایش نانولوله و اپوکسی

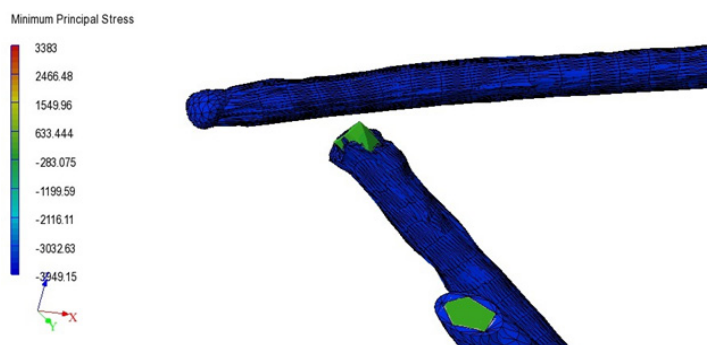
جدول (۳) مدول یانگ نتایج شبیه سازی بدون در نظر گرفتن جدایش

درصد وزنی CNT	۰	۰/۱	۰/۳	۰/۵
مدول یانگ (Mpa)	۲۷۳۵°	۲۹۴۳/۱۰	۳۲۹۸/۳۴	۳۶۰۹/۴۵
خطا نسبت به نتایج تجربی	%+۲/۳	%+۶/۳	%+۱۴/۲	%+۲۵/۸

* مدول یانگ اپوکسی در کاتالوگ محصول

جدول (۴) مدول یانگ نتایج شبیه سازی با در نظر گرفتن جدایش

درصد وزنی CNT	۰/۱	۰/۳	۰/۵
مدول یانگ (Mpa)	۲۸۱۷/۰۵	۲۸۶۹/۵۶	۳۲۴۶/۹۹
خطا نسبت به نتایج تجربی	%+۱/۸	%-۰/۱	%+۱۳/۲



شکل ۸) شبیه سازی با در نظر گرفتن جدایش

۴) نتیجه گیری

در این پژوهش محاسبه تجربی و عددی مدول یانگ نانوکامپوزیت پلیمر/ نانولوله کربنی مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به تحقیقات گذشته، مشاهده شد که اختلاف فاحشی بین نتایج تجربی و شبیه سازی‌های مرسوم (شبیه سازی بدون جدایش و بدون انحنا) وجود دارد. این نشان دهنده آن است که فرضیات ساده کننده نظیر اتصال کامل بین ماتریس و نانوذرات در نانوکامپوزیتها اشتباه است [۱۴]. به همین دلیل، شبیه سازی با در نظر گرفتن جدایش و انحنا برای نانولوله کربنی بررسی شد؛ که نتایج حاصل از این پژوهش را می توان در دو بند ذیل خلاصه کرد:

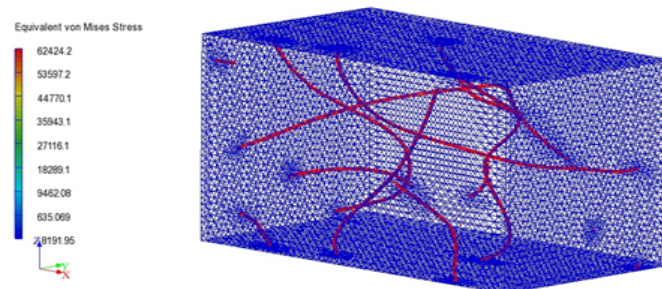
- نتایج تجربی مدول الاستیسیته پلیمر تقویت شده با نانولوله کربنی و همچنین مدول الاستیسیته طولی نانوکامپوزیت (شامل الیاف) تقویت شده با نانولوله کربنی بیانگر آن است که نمونه با ۰/۳ درصد وزنی نانولوله کربنی بیشترین مقدار را داراست.
- نتایج عددی بررسی مدول الاستیسیته پلیمر با نانولوله کربنی در سه حالت وجود و عدم وجود جدایش بین ماتریس و نانولوله کربنی و در نظر گرفتن انحنا برای نانولوله کربنی نشان دهنده این واقعیت است که در نظر گرفتن جدایش سبب تطابق بهتر نتایج عددی با مقادیر تجربی گردیده است.

همان طور که از نتایج مشاهده می شود، در نظر گرفتن جدایش درون ماتریس سبب بهبود پیش بینی مدول الاستیسیته عددی شده است؛ به گونه ای که درصد خطای مدول الاستیسیته عددی از ۶/۳ درصد به ۱/۸ درصد برای نمونه ۰/۱ درصد وزنی نانولوله و از ۱۴/۲ درصد به ۰/۱- درصد برای نمونه ۰/۳ درصد وزنی نانولوله و از ۲۵/۸ درصد به ۱۳/۲ درصد برای نمونه ۰/۵ درصد وزنی نانولوله کاهش یافته است.

۴)۳) مقایسه نتایج مدل با انحنا و نتایج تجربی

با توجه به مطالب ذکر شده در قسمت های قبل، با تشکیل المان با نانولوله دارای انحنا و در حالت دو فازی و بدون در نظر گرفتن جدایشو اعمال جابجایی به المان تشکیل شده و محاسبه مدول یانگ نتایج در جدول (۵) ارائه شده است. همان طور که مشاهده می شود مدول یانگ به محاسبه شده در این حالت از مدول یانگ محاسبه شده در المان با در نظر گرفتن نانولوله استوانه ای و سه فازی، در همه درصدهای وزنی بزرگ تر است که علت آن می تواند در نظر گرفتن دو فاز و عدم جدایش این آن از یکدیگر باشد که حتی با در نظر گرفتن انحنا در نانولوله ها باز هم با نتایج تجربی اختلاف زیادی دارد.

درصد وزنی CNT	۰/۱	۰/۳	۰/۵
مدول یانگ (Mpa)	۲۹۵۸/۶۲	۳۳۲۴/۳۱	۳۶۶۶/۸۴
خطا نسبت به نتایج تجربی	٪+۶/۹	٪+۱۵/۱	٪+۲۷/۸



شکل ۹) شبیه سازی نانوکامپوزیت با در نظر گرفتن دو فاز اپوکسی و نانولوله دارای شعاع انحنا

مراجع

- [۱۲] S. Saber Samandari, A. Afaghi Khatibi, Evaluation of elastic modulus of polymer matrix nanocomposites, *Polymer composites*, (2007) 28 411-405.
- [۱۳] P. Spencer, J. Sweeney, Modeling of polymer clay nanocomposites for a multiscale approach *Nano-and Micro-Mechanics of Polymer Blends and Composites* ed J Karger-Kocsis and S Fakirov, in, Munich: Carl Hanser Verlag, 2009.
- [۱۴] J.N. Dastgerdi, G. Marquis, M. Salimi, Micromechanical modeling of nanocomposites considering debonding and waviness of reinforcements, *Composite Structures*, (2014) 110 6-1.
- [۱۵] J.N. Dastgerdi, G. Marquis, M. Salimi, Micromechanical modeling of nanocomposites considering debonding of reinforcements, *Composites Science and Technology*, 45-38 (2014) 93.
- [۱۶] J.-k. Chen, Z.-p. Huang, J. Zhu, Size effect of particles on the damage dissipation in nanocomposites, *Composites Science and Technology*, (2007) 67 2996-2990.
- [۱۷] B. Lauke, Effect of particle size distribution on debonding energy and crack resistance of polymer composites, *Computational Materials Science*, 77 60-53 (2013).
- [۱۸] A.S.D.o.M. Properties, Standard test method for tensile properties of plastics, in, American Society for Testing and Materials, 1996.
- [۱۹] Y. Dong, D. Bhattacharyya, A simple micromechanical approach to predict mechanical behaviour of polypropylene/organoclay nanocomposites based on representative volume element (RVE), *Computational Materials Science*, 49 8-1 (2010).
- [۲۰] P. Lu, Y. Leong, P. Pallathadka, C. He, Effective moduli of nanoparticle reinforced composites considering interphase effect by extended double-inclusion model—Theory and explicit expressions, *International Journal of Engineering Science*, 73 55-33 (2013).
- [۲۱] J.-P. Salvetat, J.-M. Bonard, N. Thomson, A. Kulik, L. Forro, W. Benoit, L. Zuppiroli, Mechanical properties of carbon nanotubes, *Applied Physics A*, 69 260-255 (1999).
- [۱] I. Taraghi, A. Fereidoon, F. Taheri-Behrooz, Low-velocity impact response of woven Kevlar/epoxy laminated composites reinforced with multi-walled carbon nanotubes at ambient and low temperatures, *Materials & Design*, 158-152 (2014) 53.
- [۲] T. Fornes, D. Paul, Modeling properties of nylon 6/ clay nanocomposites using composite theories, *polymer*, 5013-4993 (2003) 44.
- [۳] J.-J. Luo, I.M. Daniel, Characterization and modeling of mechanical behavior of polymer/clay nanocomposites, *Composites science and technology*, 1616-1607 (2003) 63.
- [۴] K. Hbaieb, Q. Wang, Y. Chia, B. Cotterell, Modelling stiffness of polymer/clay nanocomposites, *Polymer*, 48 909-901 (2007).
- [۵] N. Sheng, M.C. Boyce, D.M. Parks, G. Rutledge, J. Abes, R. Cohen, Multiscale micromechanical modeling of polymer/clay nanocomposites and the effective clay particle, *Polymer*, 506-487 (2004) 45.
- [۶] K. Kalaitzidou, H. Fukushima, H. Miyagawa, L.T. Drzal, Flexural and tensile moduli of polypropylene nanocomposites and comparison of experimental data to Halpin Tsai and Tandon Weng models, *Polymer Engineering & Science*, 1803-1796 (2007) 47.
- [۷] D. Shia, C. Hui, S. Burnside, E. Giannelis, An interface model for the prediction of Young's modulus of layered silicate elastomer nanocomposites, *Polymer Composites*, 617-608 (1998) 19.
- [۸] L. Mishnaevsky, Micromechanical analysis of nanocomposites using 3D voxel based material model, *Composites Science and Technology*, -1167 (2012) 72 1177.
- [۹] G. Dai, L. Mishnaevsky, Damage evolution in nanoclay-reinforced polymers: a three-dimensional computational study, *Composites Science and Technology*, 77-67 (2013) 74.
- [۱۰] J.J. Karippal, H. Narasimha Murthy, K. Rai, M. Sreejith, M. Krishna, Study of mechanical properties of epoxy/glass/nanoclay hybrid composites, *Journal of Composite Materials*, 1899-1893 (2011) 45.
- [۱۱] S. Saber-Samandari, A.A. Khatibi, D. Basic, An experimental study on clay/epoxy nanocomposites produced in a centrifuge, *Composites Part B: Engineering*, 107-102 (2007) 38.

- [۲۲] S. Saber-Samandari, A. Afaghi Khatibi, The effect of interphase on the elastic modulus of polymer based nanocomposites, in: Key Engineering Materials, Trans Tech Publ, 2006, pp. 204-199.
- [۲۳] S. Saber-Samandari, Polymer matrix nanocomposites, University of Melbourne, Department of Mechanical and Manufacturing Engineering, 2005.
- [۲۴] M. Zappalorto, M. Salviato, M. Quaresimin, Influence of the interphase zone on the nanoparticle debonding stress, Composites Science and Technology, 55-49 (2011) 72.
- [۲۵] T. Okamatsu, Y. Yasuda, M. Ochi, Thermodynamic work of adhesion and peel adhesion energy of dimethoxysilyl terminated polypropylene oxide/epoxy resin system jointed with polymeric substrates, Journal of applied polymer science, 80 1930-1920 (2001).
- [۲۶] J. Njuguna, Structural nanocomposites, Springer, 2013.
- [۲۷] M. Paiva, B. Zhou, K. Fernando, Y. Lin, J. Kennedy, Y.-P. Sun, Mechanical and morphological characterization of polymer-carbon nanocomposites from functionalized carbon nanotubes, Carbon, 42 2854-2849 (2004).