

## محاسبه مدول الاستیک نانوکامپوزیت استحکام یافته با نانولوله کربن توسط روش اجزاء محدود، میانگین گیری و روابط میکرومکانیک

محمود مهرداد شکریه<sup>۱</sup>، سعید نیاکان<sup>۲</sup>  
Shokrieh@iust.ac.ir

پذیرش مقاله: ۸۹/۰۶/۱۵

دریافت مقاله: ۸۹/۰۳/۰۱

### چکیده

نانو لوله کربن به دلیل خواص مکانیکی فوق العاده‌اش، استحکام‌دهنده مناسبی برای استفاده به عنوان تقویت‌کننده در رزین برای ساخت نانوکامپوزیت می‌باشد. یکی از این خواص که با استفاده از تقویت‌کننده نانولوله کربن افزایش می‌یابد، مدول الاستیک رزین است. با افزودن مقدار ناچیزی نانولوله کربن، مدول الاستیک رزین به مقدار قابل توجهی افزایش می‌یابد. در این پژوهش مدول الاستیک نانوکامپوزیت از چند روش مدل‌سازی محاسبه شده است. برخی از این مدل‌سازی‌ها توسط روش اجزاء محدود و نرم‌افزار ANSYS انجام شده است. لذا قسمت بسیار کوچکی از نانوکامپوزیت به عنوان المان سطحی معرف انتخاب شده، تا با محاسبه مدول الاستیک آن، بتوان مدول الاستیک نانوکامپوزیت را محاسبه کرد. مدول الاستیک المان سطحی معرف از ۳ روش مختلف مدل‌سازی اجزاء محدود، میانگین‌گیری و میکرومکانیک محاسبه شده و نتایج بدست آمده، با نتایج روش آزمایشگاهی دیگر محققین مقایسه شده و مشاهده شد که نتایج با هم تطابق دارند. از آنجا که در بین ۳ روش ارائه شده، استفاده از روابط میکرومکانیک ساده‌تر می‌باشد، لذا می‌توان از این روش برای محاسبه مدول الاستیک این نانوکامپوزیت‌ها استفاده کرد.

### کلید واژه:

مدول الاستیک - نانوکامپوزیت - نانولوله کربن - روش اجزاء محدود - میکرومکانیک - روش میانگین‌گیری

۱- استاد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران

## ۱- مقدمه

نانولوله کربن به خاطر ساختار ملکولی آن، که به صورت یک استوانه گرافنی کوچک می‌باشد، دارای خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ای است [۱-۳]. لذا برای ساخت نانوکامپوزیت از آن استفاده می‌شود، تا خواص مکانیکی رزین بهبود یابد. عوامل مختلفی مانند مدول الاستیک رزین، قطر نانولوله کربن، توزیع نانولوله کربن و راستای نانولوله کربن در رزین، بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت با استحکام دهنده نانولوله کربن اثر می‌گذارند [۴ و ۵]. مدول الاستیک این نوع نانوکامپوزیت با استفاده از مدل‌سازی دینامیک ملکولی محاسبه شده است [۶]. همچنین از چند روش میکرومکانیک خواص الاستیک نانوکامپوزیت با استحکام دهنده نانولوله کربن مورد بررسی قرار گرفته است [۷]. با استفاده از روش المان مرزی سریع چند قطعه، نانوکامپوزیت با استحکام دهنده نانولوله کربن مدل شده و مدول الاستیک آن تعیین شده است [۸]. همچنین مدول نانوکامپوزیت از چند رابطه میکرومکانیک که برای کامپوزیت‌های با الیاف کوتاه استفاده می‌شود، محاسبه شده است [۹]. خواص مکانیکی نانوکامپوزیت با استحکام‌دهنده نانولوله کربن با استفاده از المان حجمی معرف استوانه‌ای بر اساس مکانیک پیوسته و با کمک مدل‌سازی اجزاء محدود مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰]. مدول الاستیک نانوکامپوزیت با استفاده از المان حجمی معرف مکعبی و روش مکانیک پیوسته و اجزاء محدود محاسبه شده و مشاهده شده که با افزودن  $\frac{3}{6}$  درصد حجمی نانولوله کربن به رزین، مدول الاستیک آن ۳۳ درصد افزایش می‌یابد [۱۱]. با استفاده از المان حجمی معرف که درون آن یک نانولوله کربن انحناء دار قرار دارد، مدول الاستیک المان حجمی معرف برحسب مقدار انحنای نانولوله کربن توسط روابط میکرومکانیک محاسبه شده و مشخص شده که مقدار انحنای نانولوله کربن به شدت بر مدول الاستیک المان حجمی معرف اثر می‌گذارد [۱۲]. توسط مدل اجزاء محدود و روش انرژی کرنش، مدول الاستیک نانوکامپوزیت با استحکام‌دهنده نانولوله کربنی که حول محور طولی آن پیچیده شده، برحسب زاویه پیچش نانولوله کربن محاسبه شده است [۱۳]. اثر درصد حجمی نانولوله کربن برمدول رزین از روش‌های آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۴]. پیوند سطح مشترک نانولوله کربن و رزین اپوکسی توسط روش‌های آزمایشگاهی و محاسباتی بررسی شده و مشخص شده که در صورت توزیع یکنواخت نانولوله کربن در رزین و همچنین پیوند مناسب نانولوله کربن و رزین، با افزودن ۲۰-۳۰ درصد وزنی نانولوله کربن به رزین، مدول الاستیک رزین ۲۵۰-۳۰۰ درصد افزایش می‌یابد [۱۵]. همچنین با استفاده از روش مدل‌سازی پیوسته معادل، نانولوله کربن، سطح مشترک نانولوله کربن و رزین،

رزین اطراف نانولوله کربن مدل شده و اثرات طول و توزیع راستای نانولوله کربن بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت بررسی شده است [۱۶]. اثر توزیع نانولوله کربن بر خواص مکانیکی، الکتریکی و گرمایی رزین از روش آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۷]. همچنین از روش دینامیک ملکولی و مدل‌سازی حداقل انرژی، مدول الاستیک این نوع نانوکامپوزیت محاسبه شده و مشخص شده در حالتی که پیوند سطح مشترک نانولوله کربن و رزین قوی باشد، نمی‌توان از اثرات سطح مشترک بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت صرف نظر کرد و برای حالتی که پیوند قوی بین نانولوله کربن و رزین وجود دارد، نمی‌توان از قانون اختلاط استفاده کرد [۱۸]. تنش انتقال یافته از رزین به نانولوله کربن از روش‌های تحلیلی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۹].

چون برای مدل‌سازی نانوکامپوزیت باید میلیون‌ها نانولوله کربن مدل شود و این کاری بسیار پیچیده و دشوار است، لذا در این پژوهش قسمت بسیار کوچکی از نانوکامپوزیت به عنوان المان سطحی معرف انتخاب شده تا با محاسبه مدول الاستیک آن، بتوان مدول نانوکامپوزیت را محاسبه کرد. مدول المان سطحی معرف از ۳ روش مدل‌سازی اجزاء محدود، میانگین‌گیری و میکرومکانیک محاسبه شده و نتایج بدست آمده با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده است. در روش مدل‌سازی، المان سطحی معرف به تعدادی سلول واحد (که درون هر سلول واحد یک نانولوله کربن زاویه دار قرار دارد) تقسیم شده و مدول الاستیک آن محاسبه شده است. در روش میانگین‌گیری المان سطحی معرف به تعدادی سلول واحد تقسیم شده و برای محاسبه مدول الاستیک المان سطحی معرف از مدول الاستیک سلول واحدها (که از تئوری کلاسیک لایه‌ای بدست آمده) میانگین گرفته شده است. در روش میکرومکانیک از روابطی که بر کامپوزیت‌های با الیاف کوتاه حاکم است استفاده شده و مدول الاستیک المان سطحی معرف محاسبه شده است. پارامترهای مورد نیاز برای این رابطه، از مدل‌سازی اجزاء محدود بدست آمده است.

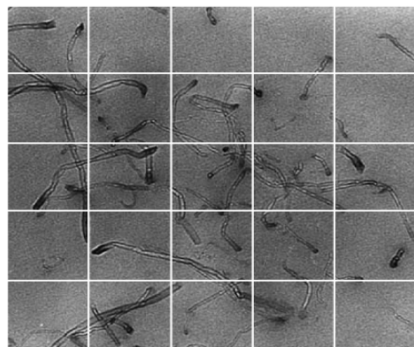
## ۲- بیان مسئله

### ۲-۱- استراتژی مدل‌سازی

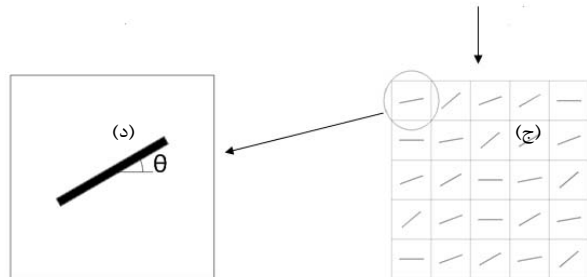
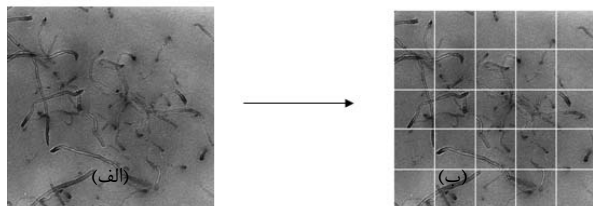
در این پژوهش، هدف توسعه روشی برای محاسبه مدول نانوکامپوزیت‌ها می‌باشد. در شکل (۱) تصویر بزرگنمایی شده از یک نانوکامپوزیت با استحکام دهنده نانولوله کربن نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، نانولوله‌های کربن به شکل منظمی در ماتریس توزیع نشده‌اند. طول نانولوله‌ها یکسان نبوده، برخی از نانولوله‌ها انحنادار هستند و آنهایی که به صورت صاف می‌باشند، با زوایای مختلفی در رزین توزیع شده‌اند. این نوع نانوکامپوزیت



شکل (۱): تصویر بزرگنمایی شده نانوکامپوزیت که به عنوان المان سطحی معرف انتخاب شده است [14]



شکل (۲): المان سطحی معرف تقسیم شده به قسمت‌های برابر



شکل (۳): (الف) المان سطحی معرف (ب) تقسیم‌بندی المان سطحی معرف به ۲۵ قسمت مساوی (ج) المان سطحی معرف با ساده‌سازی‌های گفته شده (د) سلول واحد

برای افزایش دقت در نتایج، ۱۰۰۰ المان سطحی معرف مطابق شکل (۳-ج) مدل شده و مدول الاستیک ۱۰۰۰ مدل محاسبه شده است. تفاوت این مدل‌ها در زاویه نانولوله کربن در سلول‌های واحد می‌باشد. هر یک از مدل‌های ساخته شده، از ۲۵ سلول واحد تشکیل

شباهتی به کامپوزیت‌های با الیاف پیوسته، کامپوزیت‌های با الیاف بافته شده و کامپوزیت‌های با الیاف کوتاه ندارد. لذا این سوال مطرح است که آیا برای محاسبه مدول این نوع نانوکامپوزیت، می‌توان از روابطی که بر کامپوزیت‌های مذکور حاکم است، استفاده کرد؟ به هر حال به علت ناپیوسته بودن و توزیع تصادفی الیاف، شباهت‌هایی بین این نوع نانوکامپوزیت و کامپوزیت‌های با الیاف کوتاه وجود دارد. اما هنوز به طور قطع درستی استفاده از روابطی که بر کامپوزیت‌های با الیاف کوتاه حاکم است، برای این نوع نانوکامپوزیت به اثبات نرسیده است. همانطور که ذکر شد در برای مدل‌سازی نانوکامپوزیت، می‌بایست میلیون‌ها نانولوله کربن مدل شود، که این کاری بسیار دشوار و پیچیده است. در این مقاله قسمت بسیار کوچکی از نانوکامپوزیت به عنوان المان سطحی معرف انتخاب شده تا با مدل‌سازی و محاسبه مدول آن بتوان مدول نانوکامپوزیت را محاسبه کرد. در شکل (۱) تصویر بزرگنمایی شده قسمت کوچکی از نانوکامپوزیت که به عنوان المان سطحی معرف انتخاب شده نشان داده شده است.

## ۲-۲- تقسیم المان سطحی معرف به قسمت‌های مساوی

برای سادگی مدل‌سازی، المان سطحی معرف به قسمت‌های مساوی که سلول واحد نامیده می‌شود تقسیم شده است. شکل (۲) این ساده‌سازی را نشان می‌دهد. در قسمت‌های بعدی به بیان مدل‌سازی‌های انجام شده برای محاسبه مدول الاستیک المان سطحی معرف پرداخته شده است.

## ۳- محاسبه مدول الاستیک المان سطحی معرف با استفاده از روش اجزاء محدود (مدل ۱)

### ۱-۳- ساده‌سازی مدل و نحوه انجام آن

در این مرحله برای ساده‌سازی سه فرض اعمال شده و مدل‌سازی براساس آنها انجام شده است: ۱- از اتحنای نانولوله‌ها صرف نظر شده است. ۲- طول همه نانولوله‌ها یکسان فرض شده است. ۳- هر سلول واحد به صورت یک مربع است که در آن تنها یک نانولوله قرار دارد. با این سه فرض المان سطحی معرف شکل (۳-ب) به المان سطحی معرف شکل (۳-ج) تبدیل می‌شود. شکل (۳-د) یک سلول واحد و نانولوله کربن درون آن را نشان می‌دهد. توسط یک مدل اجزاء محدود مدول الاستیک المان سطحی معرف محاسبه شده است. در این پژوهش طول نانولوله کربن ۱۵۰ نانومتر و عرض (قطر) آن با توجه به درصد سطحی نانولوله کربن در رزین ۰/۲، ۰/۴ و ۱/۲ نانومتر که به ترتیب متناظر با درصد سطحی ۰/۱، ۰/۰۵ و ۰/۳ می‌باشد، در نظر گرفته شده است. هر سلول واحد مربعی به ضلع ۲۵۰ نانومتر می‌باشد.

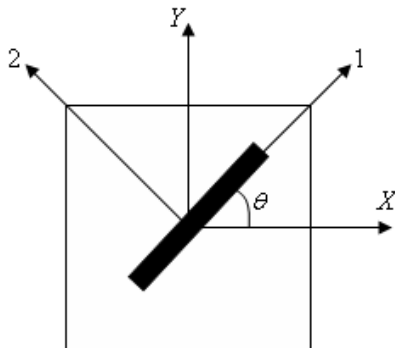
#### ۴- محاسبه مدول الاستیک و ضریب پواسون سلول واحد با روش تئوری کلاسیک لایه‌ای و روش اجزاء محدود

در کامپوزیت‌های با الیاف پیوسته، با داشتن خواص مکانیکی یک لایه تک جهته، می‌توان خواص مکانیکی آن لایه را در جهت‌های دیگر از تئوری کلاسیک لایه‌ای محاسبه کرد. در این قسمت خواص مکانیکی یک سلول واحد که درون آن یک نانولوله کربن قرار دارد، از تئوری کلاسیک لایه‌ای و مدل‌سازی اجزاء محدود محاسبه شده است و نتایج بدست آمده با هم مقایسه شده است.

#### ۴-۱- محاسبه خواص مکانیکی سلول واحد با روش مدل‌سازی اجزاء محدود

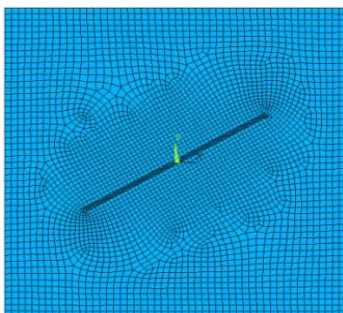
۴-۱-۱- مدل‌سازی

سلول واحدی مطابق شکل (۵) مدل شده است. برای مدل‌سازی از نرم‌افزار ANSYS و المان PLANE 42 در حالت تنش صفحه‌ای استفاده شده است. مدول طولی ( $E_x$ )، مدول عرضی ( $E_y$ ) و ضریب پواسون ( $\nu_y$ ) سلول واحد برای زوایای مختلف نانولوله کربن محاسبه شده است.



شکل (۵): موقعیت نانولوله کربن در مختصات X-Y و مختصات ۱-۲

در شکل (۶) مدل مش‌بندی شده یک سلول واحد با نانولوله کربن درون آن نشان داده شده است.



شکل (۶): مدل مش‌بندی شده سلول واحد با نانولوله کربن درون آن

شده، که در هر سلول واحد یک نانولوله کربن قرار دارد. ۲۵ زاویه نانولوله کربن در هر مدل به طور تصادفی انتخاب شده‌اند. چون در این پژوهش، هدف محاسبه مدول الاستیک هر مدل در راستای افقی می‌باشد و اثر نانوله کربن با زاویه  $\theta + 90$  بر مدول الاستیک، در راستای افقی برابر با اثر نانوله کربن با زاویه  $90 - \theta$  می‌باشد لذا زاویه نانولوله‌های کربن بین ۰ تا ۹۰ درجه می‌باشند. از مدول‌های الاستیک ۱۰۰۰ مدل میانگین گرفته شده تا یک مدول الاستیک برای المان سطحی معرف از این روش بدست آورده شود.

#### ۳-۲- خواص مکانیکی نانولوله کربن و رزین

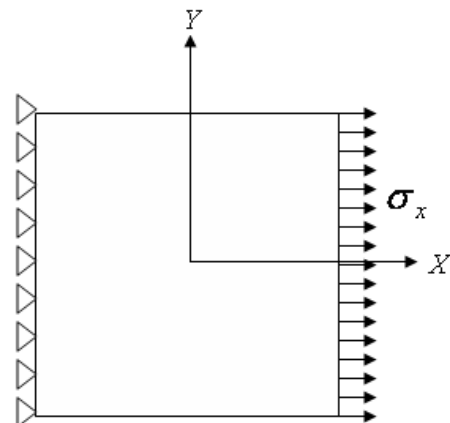
خواص مکانیکی نانولوله کربن از روش‌های مختلفی محاسبه شده و نتایج متفاوتی بدست آمده است. در این مقاله مدول الاستیک نانولوله کربن ۱ TPa [۲۰] و ضریب پواسون آن  $0.28 [20]$  و همچنین مدول الاستیک و ضریب پواسون رزین (اپوکسی) به ترتیب  $2599 \text{ MPa}$  و  $0.3 [14]$  در نظر گرفته شده است.

#### ۳-۳- شرایط مرزی اعمال شده برای محاسبه مدول الاستیک طولی

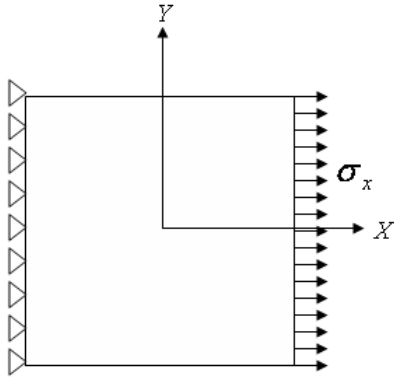
برای بدست آوردن مدول الاستیک طولی، شرایط مرزی اعمال شده مطابق شکل (۴) می‌باشد، که قسمت سمت چپ مدل در راستای  $x$  مقید شده و بر قسمت سمت راست فشاری مثبت در راستای  $x$  اعمال می‌شود. مدول طولی طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$E_x = \frac{\sigma_x}{\bar{\epsilon}_x} \quad (1)$$

که  $\sigma_x$  فشار اعمالی بر قسمت راست مدل می‌باشد و  $\bar{\epsilon}_x$  برابر با  $\frac{\Delta l}{l}$  می‌باشد، که  $l$  طول مدل و  $\Delta l$  جابجایی متوسط قسمت سمت راست در راستای  $x$ ، در اثر فشار اعمالی می‌باشد.



شکل (۴): شرایط مرزی اعمال شده برای محاسبه مدول طولی



شکل (۸): شرایط مرزی اعمال شده برای محاسبه ضریب پواسون

#### ۲-۴- محاسبه خواص مکانیکی سلول واحد از تئوری

##### کلاسیک لایه‌ای

با مشخص بودن کامپلینس‌های درون محوری (on-axis) می‌توان کامپلینس‌های خارج محوری (off-axis) را محاسبه کرد [۲۱]. رابطه‌ای که کامپلینس‌های درون محوری را به کامپلینس‌های خارج محوری تبدیل می‌کند به صورت زیر است:

$$\begin{bmatrix} S_{xx} \\ S_{yy} \\ S_{xy} \\ S_{ss} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m^4 & n^4 & 2m^2n^2 & m^2n^2 \\ n^4 & m^4 & 2m^2n^2 & m^2n^2 \\ m^2n^2 & m^2n^2 & m^4 + n^4 & -m^2n^2 \\ 4m^2n^2 & 4m^2n^2 & -8m^2n^2 & (m^2 - n^2)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{21} \\ S_{66} \end{bmatrix} \quad (۴)$$

$$m = \cos\theta \quad (۵)$$

$$n = \sin\theta$$

$\theta$ ، زاویه نانولوله کربن و راستایی است که خواص مکانیکی سلول واحد محاسبه می‌شود.

کامپلینس‌های درون محوری بر حسب خواص مکانیکی در مختصات X-Y به صورت زیر است:

$$S_{xx} = \frac{1}{E_x}, \quad S_{yy} = \frac{1}{E_y}, \quad S_{ss} = \frac{1}{E_s}, \quad S_{yx} = \frac{-\nu_x}{E_x}, \quad S_{xy} = \frac{-\nu_y}{E_y} \quad (۶)$$

کامپلینس‌های خارج محوری بر حسب خواص مکانیکی در مختصات ۱-۲ به صورت زیر است:

$$S_{11} = \frac{1}{E_{11}}, \quad S_{22} = \frac{1}{E_{22}}, \quad S_{12} = \frac{-\nu_{21}}{E_{11}}, \quad S_{21} = \frac{-\nu_{12}}{E_{22}}, \quad S_{66} = \frac{1}{E_{66}} \quad (۷)$$

با جایگزینی رابطه (۶) و (۷) در رابطه (۴) رابطه (۸) بدست می‌آید:

۲-۱-۴- شرایط مرزی اعمال شده برای محاسبه مدول الاستیک

عرضی و ضریب پواسون سلول واحد

۱-۲-۱-۴- شرایط مرزی اعمالی برای محاسبه مدول طولی همانند

شرایط مرزی اعمالی در قسمت ۳-۳ می باشد.

۲-۲-۱-۴- محاسبه مدول عرضی

برای بدست آوردن مدول عرضی شرایط مرزی اعمال شده مطابق

شکل (۷) است، که قسمت پایین مدل در راستای Y بسته شده و بر

قسمت بالایی مدل فشاری مثبت در راستای Y اعمال می‌شود.

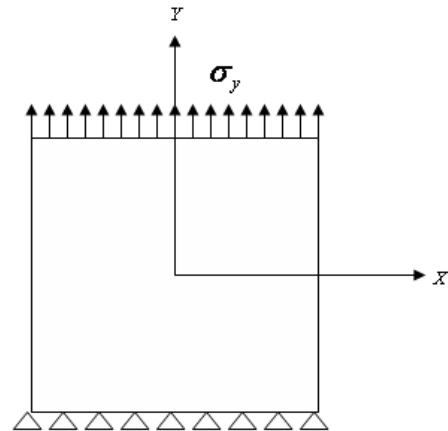
مدول عرضی طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$E_y = \frac{\sigma_y}{\bar{\epsilon}_y} \quad (۲)$$

که  $\sigma_y$  فشار اعمالی بر قسمت بالایی مدل می‌باشد و  $\bar{\epsilon}_y$  برابر با

$\frac{\Delta l}{l}$  می‌باشد، که  $l$  طول مدل و  $\Delta l$ ، جابجایی متوسط قسمت بالایی

مدل در راستای Y، در اثر فشار اعمالی می‌باشد.



شکل (۷): شرایط مرزی اعمال شده برای محاسبه مدول عرضی

۳-۲-۱-۴- محاسبه ضریب پواسون

شرایط مرزی برای محاسبه  $\nu_y$  در شکل (۸) نشان داده شده است.

ضریب پواسون طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$\nu_y = \frac{-\epsilon_x}{\epsilon_y}, \quad \epsilon_x = \frac{\Delta l_x}{l}, \quad \epsilon_y = \frac{\Delta l_y}{l} \quad (۳)$$

که  $\Delta l_x$ ، متوسط افزایش طول سلول واحد در راستای X و  $\Delta l_y$ ،

متوسط افزایش طول سلول واحد در راستای Y و  $l$  طول سلول

واحد می‌باشد.

$$E_x = \frac{1}{25} \sum_{i=1}^{25} (E_x)_i \quad (۹)$$

در این رابطه،  $i$  نشان‌دهنده شماره سلول واحد در المان سطحی معرف و  $(E_x)_i$ ، نشان‌دهنده مدول طولی آن سلول واحد می‌باشد. از مدول‌های الاستیک بدست آمده برای ۱۰۰۰ مدل، میانگین گرفته شده تا بتوان یک مدول الاستیک برای المان سطحی معرف از این روش بدست آورد.

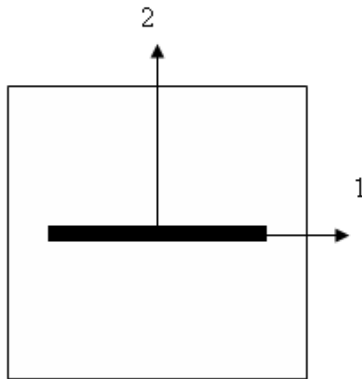
### ۶- محاسبه مدول الاستیک المان سطحی معرف با استفاده از رابطه حاکم بر کامپوزیت‌هایی با الیاف کوتاه (مدل ۳)

در این مرحله برای محاسبه مدول المان سطحی معرف از رابطه‌ای که برای کامپوزیت‌های با الیاف کوتاه در حالت دو بعدی برای توزیع تصادفی الیاف وجود دارد، استفاده شده است. این رابطه به صورت زیر است.

$$E = \frac{3}{8}(E_{11}) + \frac{5}{8}(E_{22}) \quad (۱۰)$$

$E_{11}$  و  $E_{22}$  به ترتیب مدول طولی و عرضی سلول واحدی با نانولوله کربن صفر درجه می‌باشند که از روش اجزاء محدود محاسبه می‌شوند.

برای استفاده از این رابطه کافی است درصد سطحی نانولوله کربن در نانوکامپوزیت مشخص باشد، تا سلول واحدی با زاویه نانولوله کربن صفر درجه و با همان درصد سطحی نانوکامپوزیت مدل شود و مدول طولی ( $E_{11}$ ) و عرضی ( $E_{22}$ ) سلول واحد محاسبه شوند. در شکل (۹) سلول واحد با نانولوله کربن صفر درجه برای محاسبه  $E_{11}$  و  $E_{22}$  نشان داده شده است.



شکل (۹): سلول واحد با نانولوله کربن صفر درجه

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} \\ \frac{1}{E_y} \\ -\nu_y \\ \frac{1}{E_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m^4 & n^4 & 2m^2n^2 & m^2n^2 \\ n^4 & m^4 & 2m^2n^2 & m^2n^2 \\ m^2n^2 & m^2n^2 & m^4 + n^4 & -m^2n^2 \\ 4m^2n^2 & 4m^2n^2 & -8m^2n^2 & (m^2 - n^2)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{11}} \\ \frac{1}{E_{22}} \\ -\nu_{21} \\ \frac{1}{E_{66}} \end{bmatrix} \quad (۸)$$

بنابراین با استفاده از رابطه (۸) می‌توان برای سلول واحدی مطابق شکل (۵)، با مشخص بودن خواص مکانیکی در مختصات ۱-۲، خواص مکانیکی در مختصات x-y را محاسبه کرد. برای محاسبه  $E_x$ ،  $E_y$ ،  $\nu_y$ ، از روش تئوری کلاسیک لایه‌ای،  $E_{11}$ ،  $E_{22}$ ،  $\nu_{21}$  و  $G_{21}$  ( $E_{66}$ ) لازم می‌باشد.  $E_{11}$ ،  $E_{22}$  و  $\nu_{21}$  با استفاده از روش اجزاء محدود و مطابق با شرایط مرزی نشان داده شده در قسمت ۳-۳ و ۴-۲ بدست می‌آید.  $G_{21}$  ( $E_{66}$ )، از رابطه هالپین-تسای [22, 23] محاسبه شده است. به این ترتیب مدول الاستیک طولی برحسب زاویه نانولوله کربن با راستای افقی ( $\theta$ )، با استفاده از تئوری کلاسیک لایه‌ای و روش اجزاء محدود بدست آمده و نتایج آن با هم مقایسه شده است.

### ۵- محاسبه مدول الاستیک طولی المان سطحی معرف با میانگین‌گیری از مدول الاستیک سلول‌های واحد (مدل ۲)

با توجه به مطالب ذکر شده در قسمت ۴ که نتایج آن در قسمت ۷ آورده شده است، خواص مکانیکی سلول واحد را می‌توان برحسب زاویه نانولوله کربن قرار گرفته در آن، از تئوری کلاسیک لایه‌ای محاسبه کرد. در این قسمت مدول الاستیک طولی سلول‌های واحد المان سطحی معرف از تئوری کلاسیک لایه‌ای محاسبه شده و برای محاسبه مدول طولی المان سطحی معرف از مدول سلول‌های واحد میانگین گرفته شده است. لذا برای محاسبه مدول الاستیک طولی المان سطحی معرف که از ۲۵ سلول واحد تشکیل شده، با توجه به زاویه نانولوله کربن در سلول واحدها که بین ۰ تا ۹۰ درجه تغییر می‌کند، مدول الاستیک ۲۵ سلول واحد از تئوری کلاسیک لایه‌ای محاسبه و از مدول الاستیک آنها میانگین گرفته شده است. ۱۰۰۰ مدل (المان سطحی معرف) که هر یک دارای ۲۵ سلول واحد می‌باشد، در نظر گرفته شده و مدول الاستیک آنها از روش میانگین‌گیری محاسبه شده است. تفاوت این مدل‌ها در زاویه نانولوله کربن در سلول‌های واحد آنها می‌باشد. رابطه‌ی (۹) نحوه محاسبه مدول طولی المان سطحی معرف از روش میانگین‌گیری را نشان می‌دهد.

همان طور که در شکل‌های (۱۰ تا ۱۲) مشاهده می‌شود نتایج بدست آمده از روش اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای با هم تطابق دارند. حد اکثر خطای بین دو روش برای مدول طولی و عرضی ۰/۸ درصد و برای ضریب پواسون ۳ درصد می‌باشد. در این مقاله مدول الاستیک المان سطحی معرف از ۳ روش مدل‌سازی محاسبه شده است. در هر روش، مدول الاستیک المان سطحی معرف برحسب درصد سطحی نانولوله کربن در رزین محاسبه شده است. چون مدل‌سازی‌های انجام شده در این مقاله دوبعدی است، مدول بدست آمده برحسب درصد سطحی نانولوله کربن درون رزین می‌باشد، در صورتی که مدول بدست آمده از روش آزمایشگاهی [۱۴] برحسب درصد حجمی نانولوله کربن درون رزین می‌باشد، که این امر سبب ایجاد خطا می‌شود. نتایج بدست آمده با هم مقایسه شده و در جدول (۱) نشان داده شده است. همان‌طور که در جدول (۱) مشاهده می‌شود، مدول الاستیک بدست آمده از روش‌های مدل‌سازی برای هر سه درصد سطحی نانولوله کربن با مدول الاستیک بدست آمده برحسب درصد حجمی از روش آزمایشگاهی تطابق دارند.

## ۸- نتیجه‌گیری

### ۸-۱- محاسبه مدول الاستیک سلول واحد از روش اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای

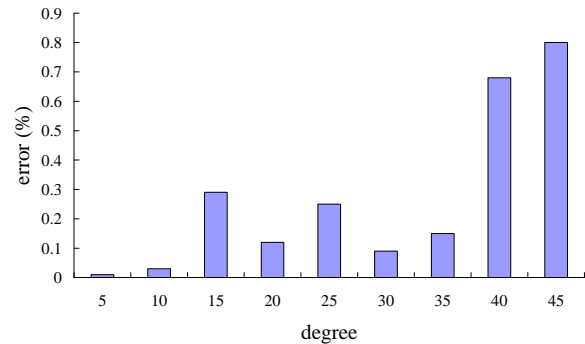
همان‌طور که در قسمت ۷ مشاهده شد، درصد خطای نتایج بدست آمده از روش مدل‌سازی اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای با هم تطابق دارند و از آنجا که استفاده از تئوری کلاسیک لایه‌ای بسیار ساده‌تر از روش مدل‌سازی اجزاء محدود می‌باشد، برای محاسبه خواص مکانیکی سلول واحد با هر زاویه نانولوله کربن، می‌توان از تئوری کلاسیک لایه‌ای استفاده کرد.

### ۸-۲- مقایسه نتایج بدست آمده برای مدول الاستیک المان سطحی معرف از ۳ روش گفته شده

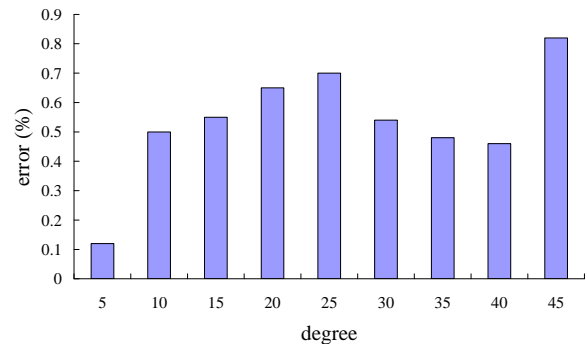
همان‌طور که مشاهده شد، نتایج بدست آمده از ۳ روش مدل‌سازی با نتایج آزمایشگاهی تطابق دارد. از آنجا که انجام روش‌های آزمایشگاهی پر هزینه و زمان‌بر می‌باشد، لذا می‌توان برای محاسبه مدول الاستیک نانوکامپوزیت با استحکام دهنده نانولوله کربن از ۳ روش مدل‌سازی گفته شده استفاده کرد. از آنجا که مدل‌سازی مرحله ۳ (قسمت ۶) از همه راحت‌تر می‌باشد، برای محاسبه مدول نانوکامپوزیت با استحکام دهنده نانولوله کربن می‌توان از مدل‌سازی مرحله ۳ استفاده کرد. برای استفاده از مدل‌سازی مرحله ۳ کافی است که درصد حجمی نانولوله کربن در رزین مشخص باشد، تا یک

## ۷- نتایج

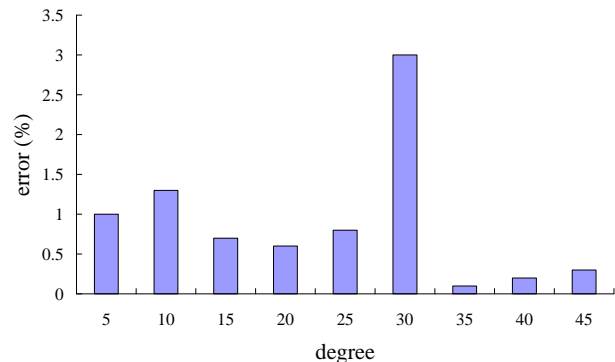
در شکل‌های (۱۰)، (۱۱) و (۱۲) به ترتیب درصد خطای بدست آمده مدول طولی ( $E_x$ )، مدول عرضی ( $E_y$ ) و ضریب پواسون ( $\nu_{21}$ ) برای سلول واحد برحسب زاویه نانولوله کربن با راستای افقی، از روش اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای نشان داده شده است.



شکل (۱۰): درصد خطای مدول طولی بین روش اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای برحسب زاویه نانولوله کربن



شکل (۱۱): درصد خطای مدول عرضی بین روش اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای برحسب زاویه نانولوله کربن



شکل (۱۲): درصد خطای ضریب پواسون بین روش اجزاء محدود و تئوری کلاسیک لایه‌ای برحسب زاویه نانولوله کربن

نانوکامپوزیت اثر می‌گذارد. نانولوله کربن انحنادار را می‌توان با یک نانولوله کربن صاف زاویه دار معادل در نظر گرفت به طوری که اثر نانولوله کربن صاف زاویه‌دار بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت به مانند اثر نانولوله کربن انحنادار بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت باشد. این بدان معناست که اگر یک سلول واحد با نانولوله کربن انحنادار درونش، دارای هر مقدار مدول الاستیک طولی باشد، می‌توان سلول واحد معادلی به صورت نانولوله کربن صاف زاویه دار پیدا کرد، به طوری که مدول الاستیک طولی آن برابر با مدول الاستیک سلول واحد با نانولوله کربن انحنادار باشد. لذا می‌توان یک تناظر یک به یک در نظر گرفت، به طوری که به ازای هر سلول واحد که دارای نانولوله کربن انحنادار است، یک سلول واحد که دارای نانولوله کربن صاف زاویه دار می‌باشد، درون نانوکامپوزیت پیدا کرد، به طوری که مدول الاستیک این دو سلول واحد با هم برابر باشد.

سلول واحد با نانولوله کربن درون آن (که زاویه نانولوله کربن با محور طولی صفر است (مطابق شکل (۹)) از روش اجزاء محدود مدل شود و مقادیر  $E_{11}$  و  $E_{22}$  سلول واحد محاسبه شود و از رابطه  $E = \frac{3}{8}E_{11} + \frac{5}{8}E_{22}$  مدول نانوکامپوزیت بدست آید.

همان‌طور که در مقدمه مقاله ذکر گردید نانولوله‌های کربن به صورت انحنادار و با انحناءها، طول‌ها و قطرهای متفاوتی در نانوکامپوزیت توزیع شده‌اند. در این مقاله جهت ساده‌سازی، این پارامترها در نظر گرفته نشده، اما نتایج بدست آمده با نتایج آزمایشگاهی تطابق مناسبی دارد. یکی از دلایلی که این مسئله را توجیه می‌کند اثر همپوشانی نانولوله‌های کربن می‌باشد. به طور مثال اثر نانولوله‌های کربن کوتاه با اثر نانولوله‌های بلند جبران می‌شود و اثر کلی طول نانولوله‌ها شبیه اثر نانولوله‌هایی با طول متوسط می‌باشد.

یک نانولوله کربن انحنادار به خاطر انحنایش، بر مدول الاستیک

جدول (۱): مدول الاستیک محاسبه شده از ۳ روش مدل سازی و روش آزمایشگاهی

روش آزمایشگاهی [14]	مدل ۳	مدل ۲	مدل ۱	درصد سطحی یا حجمی نانولوله کربن
MPa	MPa	MPa	MPa	
۲۵۹۹	۲۵۹۹	۲۵۹۹	۲۵۹۹	۰
۲۶۸۱(±۸۰)	۲۶۶۶	۲۶۶۰	۲۶۷۰	۰/۰۵
۲۶۹۱(±۳۰)	۲۷۳۰	۲۶۹۸	۲۶۹۸	۰/۱۰
۲۸۱۲(±۹۰)	۲۷۷۶	۲۷۵۰	۲۷۲۶	۰/۳۰

Mechanics and Engineering, Vol. 193, No. 17-20, 2004, pp. 1773-1788.

## ۹- مراجع

- [7] Selmi, A., Friebel, C., Doghri, I., and Hassis, H., "Prediction of the Elastic Properties of Single Walled Carbon Nanotube Reinforced Polymers: A Comparative Study of Several Micromechanical Models," Composites Science and Technology, Vol. 67, No. 10, 2007, pp. 2071-2084.
- [8] Liu, Y.J., Nishimura, N., and Otani, Y., "Large-scale Modeling of Carbon-Nanotube Composites by a Fast Multipole Boundary Element Method," Computational Materials Science, Vol. 34, No. 2, 2005, pp. 173-187.
- [9] Guzman de Villoria, R., and Miravete, A., "Mechanical Model to Evaluate the Effect of the Dispersion in Nanocomposites," Acta Materialia, Vol. 55, No. 9, 2007, pp. 3025-3031.
- [10] Liu, Y. J., and Chen, X. L., "Evaluations of the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites Using a Nanoscale Representative Volume Element," Mechanics of Materials, Vol. 35, No. 1-2, 2003, pp. 69-81.
- [11] Chen, X. L., and Liu, Y. J., "Square Representative Volume Elements for Evaluating the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites," Computational Materials Science, Vol. 29, No. 1, 2004, pp. 1-11.
- [1] Despres, J. F., Daguette E., and Lafdi, K., "Flexibility of Graphene Layers in Carbon Nanotubes," Carbon, Vol. 33, No. 1, 1995, pp. 87-92.
- [2] Falvo, M. R., Clary, G. J., Taylor II, R. M., Chi, V., Brooks Jr, F. P., Washburn, S., and Superfine, R., "Bending and Buckling of Carbon Nanotubes under Large Strain," Nature (London), Vol. 389, No. 6651, 1997, pp. 582-584.
- [3] Loiseau, A., "Les nanotubes matériaux du future," conservatoire des arts et métiers, Université de tous les saviors, Conference. Paris; 12 October 2000.
- [4] Bai, J. B., and Ci, L., "The Reinforcement Role of Carbon Nanotubes in Epoxy Composites with Different Matrix Stiffness," Composites Science and Technology, Vol. 66, No. 3-4, 2006, pp. 599-603.
- [5] Natsuki, T., Tantrakarn, K., and Endo, M., "Prediction of Elastic Properties for Single-Walled Carbon Nanotubes," Carbon, Vol. 42, No. 1, 2004, pp. 39-45.
- [6] Griebel, M., and Hamaekers, J., "Molecular Dynamics Simulations of the Elastic Moduli of Polymer-Carbon Nanotube Composites," Computer Methods in Applied



- Nanocomposites," *Carbon*, Vol. 43, No. 7, 2005, pp. 1378–1385.
- [18] Han, Y., and Elliott, J. A., "Molecular Dynamics Simulations of the Elastic Properties of Polymer/Carbon Nanotube Composites," *Computational Materials Science*, Vol. 39, No. 2, 2007, pp. 315–323
- [19] Haque, A., and Ramasetty, A., "Theoretical Study of Stress Transfer in Carbon Nanotube Reinforced Polymer Matrix Composites," *Composite Structures*, Vol. 71, No. 1, 2005, pp. 68-77.
- [20] Lu, J. P., "Elastic Properties of Single and Multi-Layered Nanotubes," *Journal of the Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 58, No. 11, 1997, pp. 1649–1652.
- [21] Gibson, R. F., "Principle of Composite Material Mechanics," New York, McGraw Hill series in Mechanical Engineering, 1994, pp. 1-4.
- [22] Halpin, J. C., "The Halpin-Tsai Equations: A Review," *Polymer Engineering and Science*, Vol. 16, No. 5, 1976, pp. 344-352.
- [23] Halpin, J. C., "Stiffness and Expansion Estimates for Oriented Short Fiber Composites," *Journal of Composite Materials*, Vol. 3, No. 4, 1969, pp. 732-734.
- [12] Anumandla, V., and Gibson, R. F., "A Comprehensive Closed Form Micromechanics Model for Estimating the Elastic Modulus of Nanotube-Reinforced Composites," *Composites: Part A*, Vol. 37, No. 12, 2006, pp. 2178–2185.
- [13] Ashrafi, B., and Hubert, P., "Modeling the Elastic Properties of Carbon Nanotube Array/Polymer Composites," *Composites Science and Technology*, Vol. 66, No. 3-4, 2006, pp. 387–396.
- [14] Gojny, F. H., Wichmann, M. H. G., Fiedler, B., and Schulte, K., "Influence of Different Carbon Nanotubes on the Mechanical Properties of Epoxy Matrix Composites—A Comparative Study," *Composites Science and Technology*, Vol. 65, No. 15-16, 2005, pp. 2300–2313.
- [15] Gou, J., Minaie, B., Wang, B., Liang, Z., and Zhang, C., "Computational and Experimental Study of Interfacial Bonding of Single-Walled Nanotube Reinforced Composites," *Computational Materials Science*, Vol. 31, No. 3-4, 2004, pp. 225–236.
- [16] Odegard, G. M., Gates, T. S., Wise, K. E., Park, C., and Siochi, E. J., "Constitutive Modeling of Nanotube-Reinforced Polymer Composites," *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, 2003, pp. 1671–1687.
- [17] Song, Y. S., and Youn, J. R., "Influence of Dispersion States of Carbon Nanotubes on Physical Properties of Epoxy