

شبیه‌سازی و بررسی نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های کربنی و نانوهلیکال‌های کربنی

انسیه یوسفی (دانشجوی کارشناسی ارشد)

مجید بنی‌اسدی* (استادیار)

مصطفی مهدوی (دانشجوی کارشناسی ارشد)

مصطفی باغانی (استادیار)

قادر فرجی (استادیار)

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران

مهندسی مکانیک شریف، (پاییز ۱۳۹۷)
دوره‌ی ۳-۲، شماره‌ی ۲، ص. ۹۵-۱۰۰

نانولوله‌های کربنی^۱ (CNT) و نانوهلیکال‌های کربنی^۲ (CCNT) خواص استثنایی دارند و باعث بهبود خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی نانوکامپوزیت‌ها می‌شوند و از همین رو، اخیراً مطالعات زیادی روی آن‌ها صورت می‌گیرد. در این مقاله با استفاده از کدنویسی پایتون و مدل‌سازی چند مقیاس در نرم‌افزار آباکوس^۳ نمودار تنش - کرنش نانوکامپوزیت‌های شبیه‌سازی شده، به دست آمده است. تأثیر هندسه‌ی تقویت‌کننده‌ها که به دو صورت نانولوله و نانوهلیکال مدل شده‌اند و نیز درصد حجمی^۴ هریک از آن‌ها بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها با شرط اتصال کامل بررسی شده است. نتایج به دست آمده حاکی از افزایش مدول کشسان با افزایش ضریب حجمی تقویت‌کننده‌هاست. همچنین نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های نشان‌دهنده‌ی کاهش مدول کشسان نانوکامپوزیت تقویت‌شده‌ی نانوهلیکال‌ها نسبت به نانولوله‌هاست. در واقع با افزایش زاویه‌ی پیچ نانوهلیکال‌ها خاصیت تقویت‌کنندگی آن‌ها بهتر می‌شود.

ensieh.yousefi@student.kuleuven.be
m.baniassadi@ut.ac.ir
mostafa.mahdavi@gatech.edu
baghani@ut.ac.ir
ghfaraj@ut.ac.ir

واژگان کلیدی: نانوکامپوزیت، کربن نانولوله، کربن نانوهلیکال، خواص مکانیکی.

۱. مقدمه

ذرات نانوفازی - خاصیت تقویت‌کنندگی بهتری دارند.^[۱۶] خواص نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی به عوامل زیادی از جمله جنس پلیمر پایه، نحوه‌ی توزیع، نسبت طول به قطر^۶، هندسه و ضریب حجمی نانولوله‌ها و نحوه‌ی اتصال آن‌ها به ماتریس بستگی دارد. هگنمولر^۷ و همکارانش^[۱۷] با بررسی مدول کشسان و تنش نهایی نمونه‌هایی از نانوکامپوزیت نشان دادند که با افزایش درصد حجمی ذرات در نمونه‌ها مدول و تنش نهایی آن‌ها افزایش می‌یابد.

روش رسوب بخار شیمیایی^۸ (CVD) مشهورترین روش برای تولید انبوه نانولوله‌های کربنی چنددیواره است.^[۱۸] در یکی از مشاهدات تعدادی نانوکربن به صورت هلیکال در انبوهی از نانولوله‌های کربنی یافت شد و بدین‌گونه این شکل از نانوذرات کشف شد. برای تولید نانوهلیکال‌های کربنی^۹ (CCNT) روش CVD روشی کارآمد است.^[۷] نانوهلیکال‌های کربنی نخستین بار در اوایل دهه‌ی ۱۹۹۰ توسط ایهارا^{۱۰} و همکارانش ارائه شد،^[۱۹] و بعد از تقریباً یک سال ژانگ^{۱۱} و همکارانش توانستند نانوهلیکال‌ها را به صورت منظم تولید کنند.^[۲۰] نانوهلیکال‌ها برای اولین بار در سال ۱۹۹۸، توسط میکروسکوپ تونلی روبشی^{۱۲} (STM) مشاهده شدند.^[۲۱] اخیراً محققین توجه ویژه‌ی به نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوهلیکال‌های کربنی

در تحقیقات اخیر در زمینه‌ی نانوتکنولوژی، ساخت موادی با خواص فوق‌العاده‌ی مکانیکی، حرارتی و الکتریکی مانند نانوصفحات گرافن،^[۲-۱] نانولوله‌های کربنی،^[۵و۳] ذرات نانورس،^[۶] نانوهلیکال‌های کربنی^[۷] و ذرات نانو اکسید فازی انگیزه‌ی مناسبی برای تولید کامپوزیت‌ها بوده است. در سال ۱۹۹۱ دانشمندی به نام ایجیما^[۵و۸] در حین سنتزهای خود ساختار جدیدی از کربن به شکل لوله را مشاهده کرد، که باعث کشف نانولوله‌های کربنی شد. پس از آن محققین توجه ویژه‌ی به نانولوله‌های کربنی داشتند و بررسی‌های زیادی روی این مواد انجام دادند. آنها در حین انجام آزمایش‌ها متوجه خواص فوق‌العاده‌ی مکانیکی از جمله مدول کشسان بسیار بالا،^[۹-۱۱] خواص الکتریکی^[۱۲] و حرارتی فوق‌العاده به همراه چگالی پایین^[۱۳] این مواد شدند. همین خواص باعث شد که این مواد به عنوان تقویت‌کننده‌ی مناسب برای بهبود خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی در نانوکامپوزیت‌ها معرفی شود.^[۱۴و۱۵] آزمایش‌های گوناگون انجام شده نشان می‌دهد نانولوله‌های کربنی نسبت به سایر مواد - نظیر

* نویسنده مسئول

تاریخ: دریافت ۱۳۹۵/۱۲/۲۳، اصلاحیه ۱۳۹۶/۳/۱۳، پذیرش ۱۳۹۶/۴/۱۰.

DOI:10.24200/J40.2018.6418

شده در نرم‌افزار Matlab تقویت‌کننده‌ها به صورت توزیع تصادفی با استفاده از روش مونت کارلو^{۳۰} در RVE قرار گرفتند. برای توزیع تصادفی مرکز هر یک از تقویت‌کننده‌ها به صورت تصادفی در داخل فضای جزء نماینده‌ی حجم به صورتی انتخاب شده که با توجه به طول نانو ذرات هیچ یک از نانو ذرات سطوح جزء نماینده‌ی حجم را قطع نکنند. هریک از نانولوله‌ها با یک بردار عمود بر سطح مقطع دایره‌ی خود مشخص شده است، که جهات این بردار در فضا به وسیله‌ی معادلات تصادفی همگن تعیین شده است:^[۳۴]

$$\begin{cases} \theta = 2\pi v \\ \varphi = \arccos(2u - 1) \end{cases} \quad (1)$$

که در آن u و v مقادیر تصادفی بین $[0, 1]$ هستند، بنابراین $\theta \in [0, 2\pi]$ و $\varphi \in [0, \pi]$ در شکل ۱ این مقادیر در دستگاه مختصات قطبی نشان داده شده است. پس از مشخص شدن نقاط مرکزی و جهات هریک از نانو ذرات به صورت تصادفی، با استفاده از نقاط ابتدا و انتهای هریک از نانو ذرات مشخص شده است. خروجی کد Matlab یک فایل متنی حاوی مختصات نقاط ابتدایی، انتهایی و شعاع هریک از نانوذرات است؛ برای نانوذرات هلیکالی گام پیچ نیز در این فایل متنی وجود دارد.

پس از آن کد پایتون این فایل متنی را به عنوان ورودی دریافت کرده و جزء نماینده‌ی حجم مورد نظر را در نرم‌افزار آباکوس ایجاد می‌کند. در کد پایتون علاوه بر ساخت و مونتاژ قسمت‌های مختلف و اعمال خواص مورد نظر به هر بخش از RVE سطوح موجود در نانوکامپوزیت شناخته شده و به هر دو سطح مناسب قید اتصال کامل^{۳۱} اعمال شده است.

RVE در نرم‌افزار ABAQUS ۶/۱۳ در نسبت‌های حجمی متفاوت در سه نوع تقویت‌کننده با هندسه‌های متفاوت ایجاد شده است. برای تمام نمونه‌ها اتصالات به صورت کامل در نظر گرفته شده و نمودار تنش - کرنش برای هر یک رسم شده است. به عنوان نمونه در شکل ۲ دو نانوکامپوزیت شبیه‌سازی شده دیده می‌شود. اندازه‌ی جزء نماینده‌ی حجم را باید به عنوان پارامتری بسیار مهم در مدل‌سازی در نظر گرفت. اندازه‌ی جزء نماینده‌ی حجم اگر کوچک باشد نمی‌تواند نماینده‌ی مناسبی برای تعیین خواص نانوکامپوزیت باشد. در نتیجه جواب‌های به دست آمده از آن دقیق و درست نیستند. اگر اندازه‌ی جزء نماینده‌ی حجم بزرگ باشد هزینه و زمان محاسبات بسیار بالا می‌رود. در نتیجه باید در انتخاب این اندازه دقت کافی داشت. در تمامی مدل‌ها اندازه جزء نماینده‌ی حجم بین ۳ تا ۵ برابر بزرگ‌ترین طول

به دلیل خواص فوق‌العاده و هندسه منحصر به فرد نانوهلیکال‌ها دارند.^[۲۲-۲۴] لی^{۳۲} و همکارانش^[۲۲] با استفاده از روش CVD نانوهلیکال‌های کربنی تولید کرده و آن‌ها را به رزین اپوکسی اضافه کردند؛ سپس به وسیله‌ی میکروسکوپ نیروی اتمی^{۳۳} و آزمون کشش، خواص مکانیکی نمونه‌ها را به دست آوردند. نتایج حاصله نشان‌دهنده‌ی به ترتیب افزایش ۱۰۳٪، ۴۸٪ و ۴۱٪ مقاومت کششی، سختی و مدول کشسان تنها با اضافه کردن ۵٪ نانوهلیکال‌ها به رزین است. لا^{۳۵} و همکارانش خواص مکانیکی اپوکسی را با اضافه کردن نانوهلیکال کربنی به آن بهبود دادند. نتایج آنها نشان می‌دهد که سختی و یکپارچگی نمونه‌های دارای ۲ درصد نانوهلیکال کربنی به طور متوسط ۵۰٪ افزایش یافته است. شکست خمشی نمونه‌ی تقویت شده با نانوهلیکال کربنی نسبت به اپوکسی کاهش یافته ولی نسبت به نمونه‌ی تقویت شده با نانولوله‌ی کربنی بیشتر است.^[۲۵]

انجام آزمایش‌ها برای درک رفتار نانوکامپوزیت‌ها در مقیاس نانو کار بسیار دشوار و در بعضی موارد غیر ممکن است. یکی از راه‌های درک سازوکار رفتاری آن‌ها استفاده از روش‌های تحلیلی، شبیه‌سازی و عددی است. اشلیبی^{۳۶}، موری تاناکا^{۳۷} و هالپین - تسی^{۳۸} از جمله روش‌های تحلیلی اند. دینامیک مولکولی^{۳۹} (MD)، مکانیک مولکولی^{۴۰} (MM)، مکانیک پیوسته^{۴۱} و مدل‌سازی سلسله‌مراتبی روش‌های مدل‌سازی برای بررسی رفتار نانوکامپوزیت‌ها هستند. دینامیک مولکولی روشی مناسب برای مطالعه‌ی سطح تماس بین ماتریس و تقویت‌کننده‌هاست.^[۲۶-۲۸] در مدل‌سازی سلسله‌مراتبی، فیزیک و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت در نظر گرفته می‌شود که پلی بین مقیاس‌های نانو و ماکروسکوپ است.

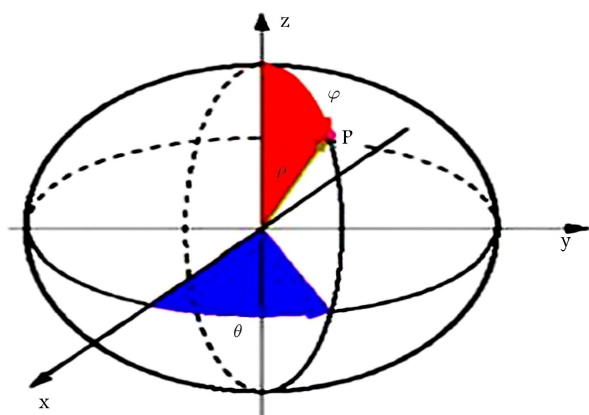
در بسیاری از مدل‌سازی‌های عددی اتصال بین ماتریس و تقویت‌کننده‌ها به صورت اتصال و پیوند کامل در نظر گرفته شده است.

چن^{۴۲} و همکارانش^[۲۹] از دینامیک مولکولی برای مطالعه‌ی انرژی بین نانولوله‌ی تک‌دیواره^{۴۳} (SWNT) و پلی‌فنیل‌استیلن^{۴۴} (PPA) استفاده کردند. در بعضی از مطالعات^[۳۱،۴۵] اتصالات بین نانولوله‌ها و ماتریس به صورت غیر کولانسی در نظر گرفته شده است. فارنکلند^{۴۵} و همکارانش^[۳۲] نشان دادند تنها با افزودن ۱٪ نانولوله‌ها به پلی‌اتیلن مقاومت برشی آن ۱۰ برابر می‌شود. خانی و همکارانش با استفاده از روش اجزای محدود تأثیر هندسه‌ی نانوهلیکال‌های کربنی را روی مدول کشسان نانوکامپوزیت‌ها بررسی کردند. در این مقاله با افزایش زاویه‌ی پیچ نانوهلیکال‌های کربنی مدول کشسان نمونه‌ها افزایش یافته است.^[۲۴] صفایی و همکارانش^[۵] با استفاده از روش سلسله‌مراتبی نانوکامپوزیت اپوکسی را با تقویت‌کننده‌های نانوصفحات گرافیت^{۴۶} (GNP) مدل‌سازی کرده و تأثیر درصد حجمی^{۴۷} (VF) و نسبت قطر به ضخامت^{۴۸} نانوصفحات را بر خواص نانوکامپوزیت بررسی کردند.

در نوشتار حاضر از روش سلسله‌مراتبی برای مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌ها و نانوهلیکال‌های کربنی استفاده شده است. اتصال بین تقویت‌کننده‌ها و ماتریس به صورت اتصال کامل فرض شده است و تأثیر این دو نوع تقویت‌کننده به همراه درصد‌های حجمی متفاوت این دو بررسی شده است. با استفاده از کد پایتون نمودار تنش - کرنش هر یک از نمونه‌ها به دست آمده و نتایج با هم مقایسه شده‌اند.

۲. مدل‌سازی

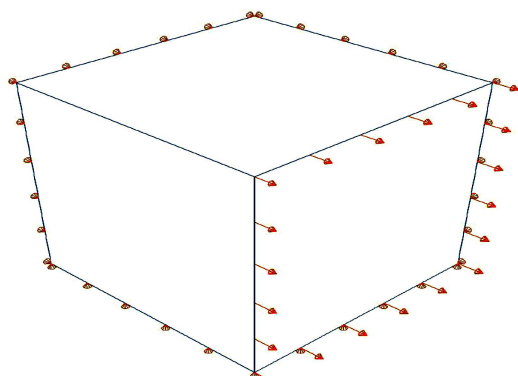
یک جزء نماینده‌ی حجم^{۴۹} (RVE) به صورت سه‌بعدی - شامل پلیمر و تقویت‌کننده‌ها - در نرم‌افزار ABAQUS شبیه‌سازی شده است. با استفاده از کد برنامه‌نویسی



شکل ۱. راستای بردار در مختصات قطبی برای توزیع تصادفی تقویت‌کننده‌ها.^[۳۳]

جدول ۲. شرایط مرزی نمونه‌ها.

| صفحه | EAST | BOTTOM | NORTH | WEST |
|-------|--------------|-----------|-----------|-----------|
| مرزی | | | | |
| شرایط | $U_1 \neq 0$ | $U_2 = 0$ | $U_2 = 0$ | $U_1 = 0$ |
| مرزی | | | | |



شکل ۴. شرایط مرزی و نحوه بارگذاری مدل.

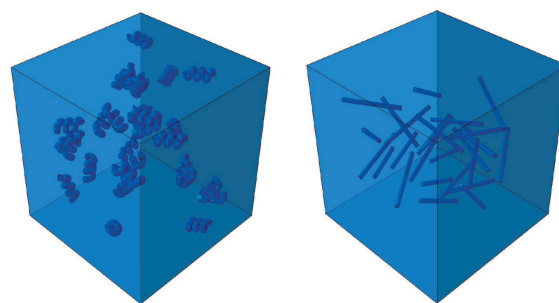
جابه‌جایی به تمام یک صفحه در جهت ۱ اعمال شده است. شرایط مرزی نمونه‌ها در شکل ۴ نشان داده شده است.

۳. مش‌بندی نمونه‌ها

در این تحقیق برای مش‌بندی جزء نماینده حجم به دلیل وجود پیچیدگی زیاد هندسی در آن از روش مش‌بندی آزاد^{۳۲} استفاده شده است؛ همچنین از اجزاء خطی هرمی چهارگوشه‌ای گره‌بی^{۳۳} C3D4 استفاده شده است. برای مش‌بندی تقویت‌کننده‌ها (نانولوله‌های کربنی و نانوهلیکال‌های کربنی) از روش سوئیپ^{۳۴} و از اجزاء شش‌وجهی^{۳۵} C3DAR استفاده شده است. اندازه و تعداد المان‌ها بر دقت جواب‌ها تأثیر زیادی دارند، از طرفی زیاد بودن المان‌ها باعث افزایش زمان حل می‌شود. بنابراین لازم است مقدار مناسبی برای تعداد المان‌ها انتخاب شود. هرچه درصد حجمی المان‌ها بیشتر شود، پیچیدگی مدل بیشتر و برای مش‌بندی به تعداد اجزاء بیشتر نیاز است. در جزء نماینده حجم مش‌ها در نواحی اطراف حفره‌ها ریزند که با رفتن به سمت لبه‌ها درشت‌تر می‌شوند. عدم وابستگی جواب‌ها به تعداد مش‌ها بررسی شده است، طوری که نمودارهای به دست آمده برای اندازه اجزاء متفاوت از یک نمونه، تا زمانی که نمودار ثابت شده و با کوچک‌تر شدن مش‌ها تغییری نکند. مشخص شد که با افزایش تعداد المان‌ها به بیش از یک میلیون تعداد، نمودار ثابت شده، به همین دلیل تمامی نمونه‌ها تعداد جزئی بیش از این مقدار دارند. در شکل ۵ نمونه‌ی مش خورده دیده می‌شود.

۴. مواد

نانولوله‌ی کربنی یک ماده با خواص ایزوتروپیک نیست و در راستاهای مختلف رفتارهای متفاوتی دارد، با این وجود در بسیاری از مطالعات به صورت ایزوتروپیک در نظر گرفته شده و این فرض نتایج قابل قبولی ارائه داده است. بنابراین در این پژوهش

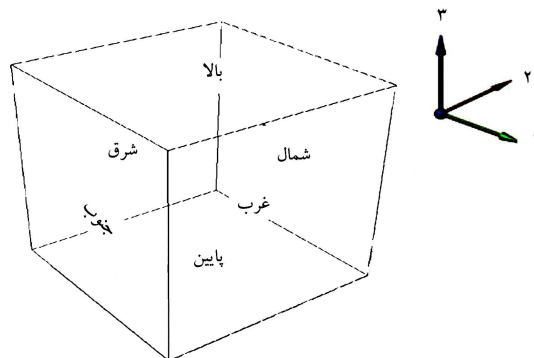


الف) نانولوله‌های کربنی؛ ب) نانوهلیکال‌های کربنی.

شکل ۲. دو نمونه از RVE.

جدول ۱. مشخصات هندسی نانوذرات مورد استفاده.

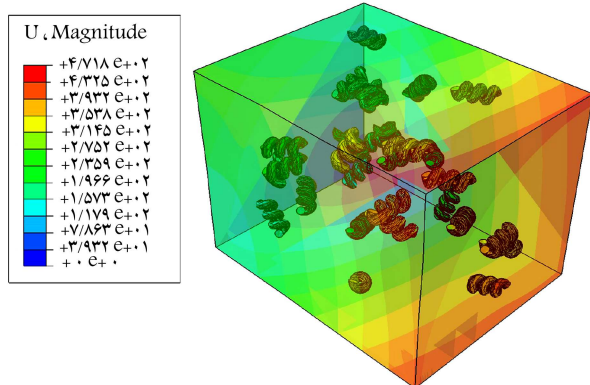
| نوع نانوذره | ۱ | ۲ | ۳ |
|------------------------|-----|--------|--------|
| شماره نانوذره | ۱ | ۲ | ۳ |
| طول نانوذره (nm) | ۵۰۰ | ۳۸۸/۹۷ | ۱۶۷/۱۳ |
| قطر لوله نانوذره (nm) | ۴۰ | ۴۰ | ۴۰ |
| قطر خارجی نانوذره (nm) | - | ۹۰ | ۹۰ |
| زاویه پیچ (°) | ۹۰ | ۵۰ | ۱۵ |



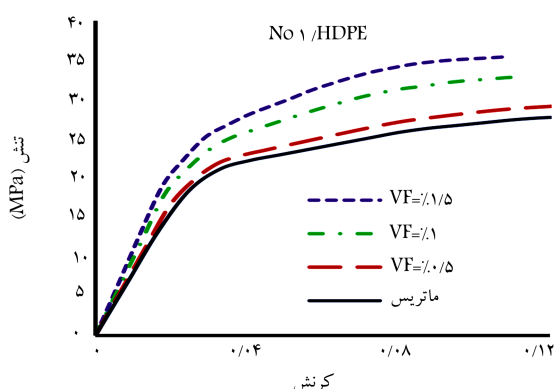
شکل ۳. نشانه‌گذاری سطوح برای مشخص کردن شرایط مرزی و بارگذاری نمونه‌ها.

تقویت‌کننده انتخاب شده است. این اندازه طوری انتخاب شده که با افزایش آن تغییر محسوسی در خواص نانوکامپوزیت ایجاد نشود.^[۳۴] بنابراین تعداد نانوذرات در هر یک از اجزاء نماینده حجم با توجه به طول ماتریس، حجم ذرات و ضریب حجمی آن‌ها در جزء نماینده حجم محاسبه شده که در کمترین مقدار ۲۷ عدد نانوذره تا ۸۱ عدد نانوذره در ماتریس وجود دارد.

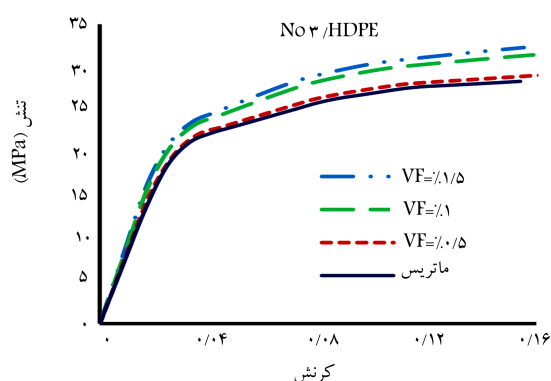
در جدول ۱ تقویت‌کننده‌های مورد استفاده نشان داده شده، که به منظور امکان مقایسه‌ی میزان تقویت‌کنندگی نمونه‌ها با یکدیگر و نیز برای این که تنها پارامتر هندسی تأثیرگذار تفاوت زاویه‌ی پیچ آن‌ها باشد، همگی حجم‌های یکسان دارند. در قسمت‌های بعدی برای راحتی کار نانوذرات استفاده شده در نمونه‌ها با شماره‌ی آن‌ها مشخص می‌شود. شرایط مرزی این مسئله با توجه به جابه‌جایی تنها در یک راستا اعمال شده است. برای مشخص شدن شرایط مرزی سطوح یک جزء نماینده حجم سطوح آن نانوذاری شده (شکل ۳) و شرایط مرزی هر یک از سطوح مشخص شده است. شرایط مرزی در نرم‌افزار آباکوس در جدول ۲ ارائه شده است. چنان که در این جدول مشاهده می‌شود، سه صفحه در جهات مشخص شده ثابت شده‌اند و



شکل ۶. نمونه‌ی RVE پس از بارگذاری.



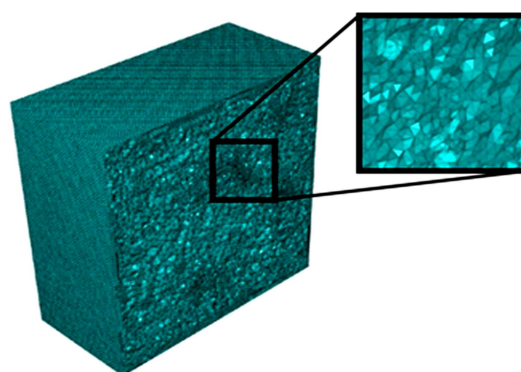
شکل ۷. بررسی اثر ضریب حجمی نانولوله‌های کربنی بر روی نمودار تنش - کرنش.



شکل ۸. بررسی اثر ضریب حجمی نانولوله‌ها بر روی نمودار تنش - کرنش.

که نتایج حاصله در نمودار شکل ۱۲ دیده می‌شود. این نمودار حاکی از افزایش زیاد مقاومت کششی نمونه در صورت یکسان بودن جهت بارگذاری و نانولوله‌هاست. با محاسبه‌ی مدول کشسان به وسیله‌ی شیب نمودار تنش - کرنش در قسمت خطی آن، افزایش مدول کشسان نمونه‌ها با افزایش درصد حجمی تقویت‌کننده‌ی شماره ۱ در شکل ۱۳ نشان داده شده است.

با توجه به شیب قسمت خطی نمودارهای تنش - کرنش، افزایش مدول کشسان با افزایش درصد حجمی تقویت‌کننده‌ی شماره ۳ در شکل ۱۴ نشان داده شده است. می‌توان نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌های نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله‌های کربنی را با روش‌های تحلیلی موری تاناکا و هلیپن تسی مقایسه کرد



شکل ۵. نمونه RVE مش خورده با $VF = 1/5$.

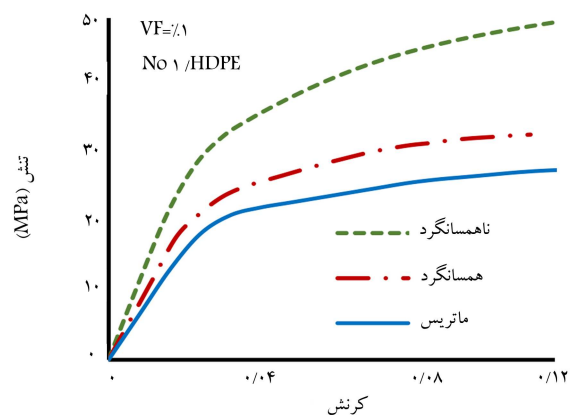
فرض ایزوتروپیک بودن نانولوله^[۱۰] و نانوهلیکال^[۳۶،۳۵] اعمال شده است. نانوذرات به صورت یک جسم معادل^{۳۶} مدل شده‌اند. بنابراین به محاسبه مدول کشسان نیاز است. برای محاسبه‌ی مدول کشسان نانوهلیکال کربنی، آن‌ها به صورت یک نانولوله مستقیم در نظر گرفته شده است.^[۲۴] با استفاده از تحقیقات انجام شده^[۳۷،۳۳] مدول کشسان نانوذرات محاسبه شده‌اند. ماتریس پلی اتیلن با چگالی بالا^{۳۷} (HDPE) با مدول کشسان ۸ GPa در نظر گرفته شده است.^[۳۸]

۵. نتایج

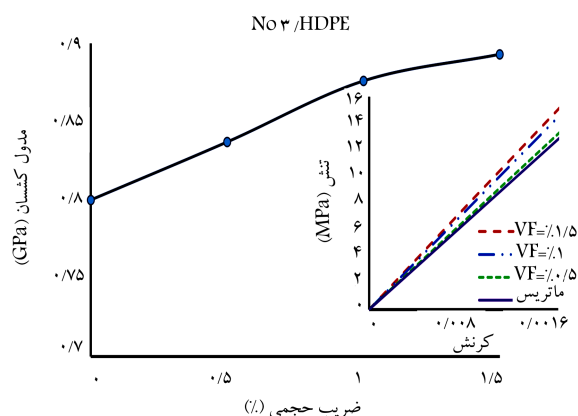
بعد از اعمال بارگذاری به صورت استاتیک،^{۳۸} خروجی با استفاده از یک کد پاتون در نرم‌افزار باز شده و میانگین حجمی مقادیر تنش و کرنش در هر جزء در ۲۰ بازه‌ی زمانی محاسبه شده است، و نمودار تنش - کرنش با این ۲۰ نقطه رسم شده است. در شکل ۶ یک نمونه RVE تحت تنش قرار گرفته شده، دیده می‌شود.

در شکل ۷ تغییرات نمودار تنش - کرنش با درصد حجمی‌های مختلف نانولوله‌ی کربنی دیده می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش مقدار ضریب حجمی مقاومت کششی نانوکامپوزیت افزایش و نمودار تنش کرنش بهبود می‌یابد. این افزایش به دلیل، افزایش فاز سخت در ماتریس است که با نتایج مراجع^[۴۰،۳۹] مطابقت دارد. در شکل ۸ اثر ضریب حجمی نانوهلیکال‌ها بر مقاومت کششی نانوکامپوزیت دیده می‌شود. چنان که مشاهده می‌شود با افزایش ضریب حجمی نانوهلیکال‌ها مقاومت کششی نمونه افزایش می‌یابد. این مشاهدات با نتایج به دست آمده از مطالعات پیشین^[۴۱] مطابقت دارد.

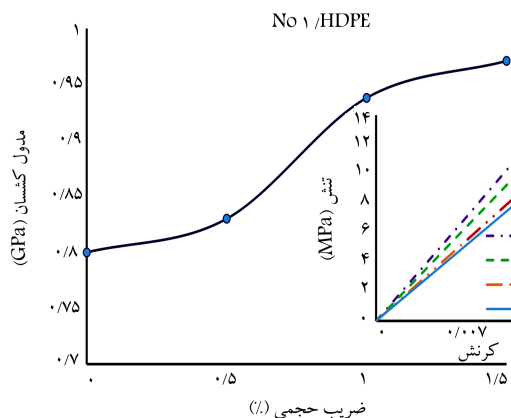
در شکل ۹ نمونه‌های No 3/HDPE و No 1/HDPE مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود نانولوله‌های کربنی خاصیت تقویت‌کنندگی بهتری نسبت به نانوهلیکال‌های کربنی دارند، و مدول نانوکامپوزیت با افزایش زاویه‌ی پیچ نانوذرات بهبود می‌یابند. شکل ۱۰ با مشاهدات خانی و همکارانش^[۴۲] مطابقت دارد. برخی از مطالعات انجام شده با استفاده از فرمول‌های اشلبی نشان داده که خاصیت تقویت‌کنندگی نانولوله‌های کربنی از نانوهلیکال‌های کربنی در راستای محور مرکزی خود بهتر است.^[۴۲] نانوهلیکال‌های کربنی نسبت به نانولوله‌های کربنی خاصیت ارتجاعی بهتر و مدول کشسان کمتری دارند. با پراکندگی تقویت‌کننده‌ها به صورت تصادفی نانوکامپوزیت خاصیت همسانگردی^{۳۹} دارد، یعنی خواص آن در همه‌ی جهات یکسان است. می‌توان تقویت‌کننده‌ها را در راستای بارگذاری قرار داد که در این صورت نانوکامپوزیت در جهات مختلف دارای خاصیت ناهمسانگردی^{۴۰} است. برای بررسی این موضوع دو نانوکامپوزیت در شکل ۱۱ باهم مقایسه شده‌اند



شکل ۱۲. بررسی اثر جهت قرارگیری نانولوله‌ها بر نمودار تنش - کرنش.

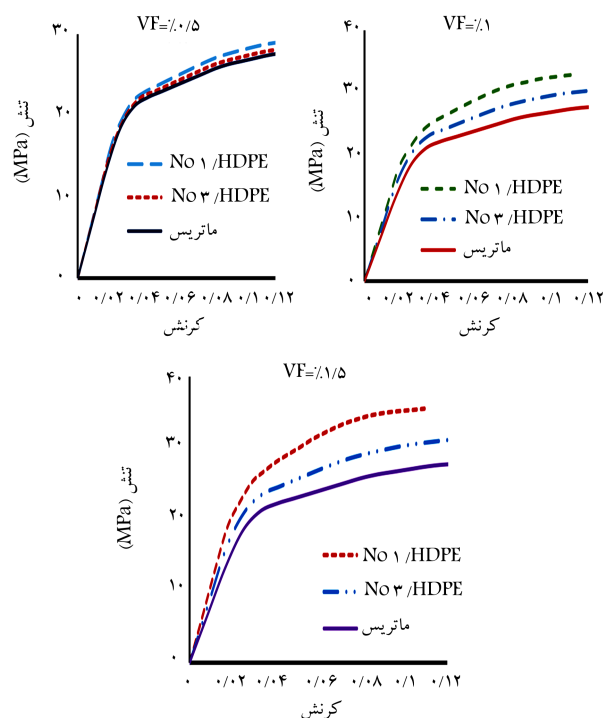


شکل ۱۳. مقدار مدول کشسان نانوکامپوزیت‌های حاوی نانولوله‌های کربنی با درصد حجمی‌های ۱، ۰٫۵ و ۱٫۵.

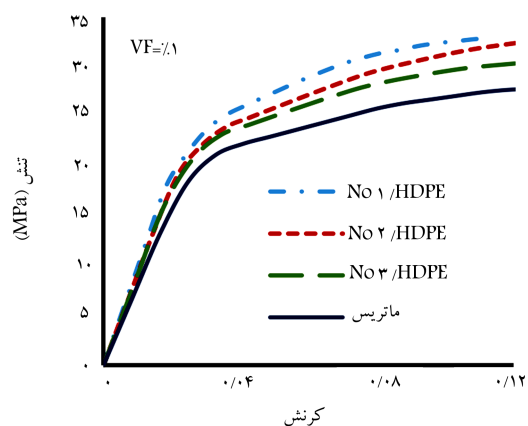


شکل ۱۴. مقدار مدول کشسان نانوکامپوزیت‌های حاوی نانولوله‌های کربنی در ضریب حجمی‌های ۱، ۰٫۵ و ۱٫۵ درصد.

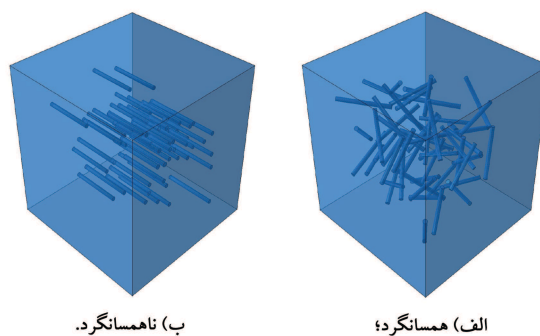
(شکل ۱۵). این مقایسه نشان می‌دهد که روش‌های تحلیلی نسبت به روش اجزاء محدود، قدرت بیشتری در پیش‌بینی مدول کشسان دارند؛ همچنین روش هلیپن نسی نسبت به روش موری تاناکا تخمین بالاتری دارد، در حالی که روند تغییرات در این سه روش در یک راستاست. داده‌های روش موری تاناکا تنها اندکی بالاتر از داده‌های اجزاء محدود قرار دارد. در نمودار زیر E_m مدول کشسان ماتریس و E_c مدول مؤثر جزء نماینده‌ی حجم است.^[۲۴]



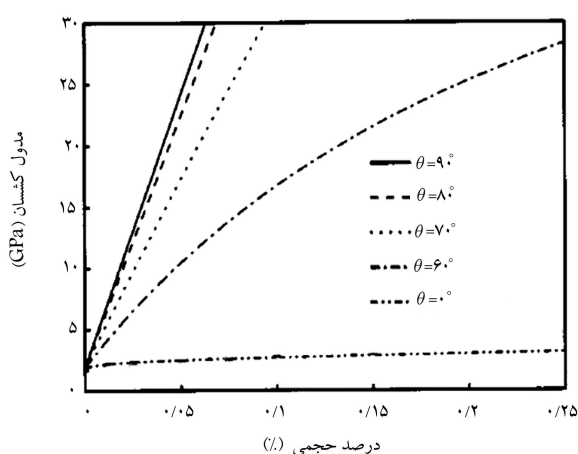
شکل ۹. مقایسه‌ی اثر تقویت‌کنندگی نانولوله‌ها و نانولهیکال‌ها در ضرایب حجمی متفاوت.



شکل ۱۰. تأثیر زاویه‌ی پیچ در نانوذرات در ضریب حجمی ۱٪ بر نمودار تنش - کرنش.



شکل ۱۱. نانوکامپوزیت با خاصیت: (الف) همسانگردی (ب) ناهمسانگردی.



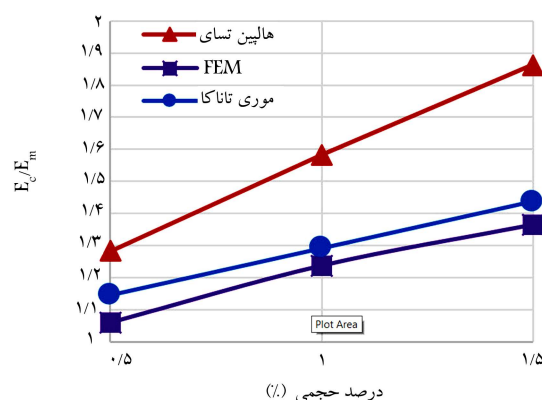
شکل ۱۷. تأثیر زاویه‌ی پیچ نانوذرات بر مدول کشسان کامپوزیت. [۴۲]

جدول ۴. مدول کشسان نمونه‌ها با زاویه پیچ متفاوت و ضریب حجمی ۱٪.

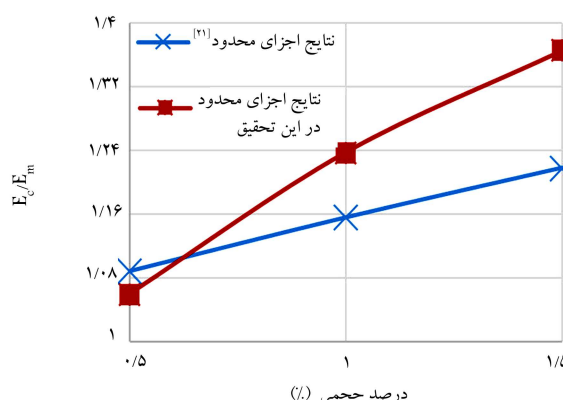
| مدول کشسان (GPa) | نانوکامپوزیت |
|------------------|--------------|
| ۸۰۰ | Matrix |
| ۹۳۸ | No۱/HDPE |
| ۹۱۶ | No۲/HDPE |
| ۸۷۶ | No۳/HDPE |

جدول ۵. مدول کشسان نمونه‌های همسانگرد و ناهمسانگرد.

| مدول کشسان (GPa) | نانوکامپوزیت |
|------------------|----------------------|
| ۸۰۰ | Matrix |
| ۹۳۸ | No۱/HDPE isotropic |
| ۳۵۲ | No۱/HDPE anisotropic |



شکل ۱۵. مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی شده با جزء محدود با داده‌های شبیه‌سازی تحلیلی.



شکل ۱۶. مقایسه‌ی نتایج اجزاء محدود با روش‌های مختلف.

جدول ۳. مدول کشسان نانوکامپوزیت‌ها با نسبت‌های حجمی متفاوت.

| مدول کشسان (GPa) | درصد حجمی (%) | نانوکامپوزیت |
|------------------|---------------|--------------|
| ۸۰۰ | - | Matrix |
| ۹۷۱, ۹۳۸, ۸۳۰ | ۱, ۱, ۰.۵ | No۱/HDPE |
| ۸۹۳, ۸۷۶, ۸۳۷ | ۱, ۱, ۰.۵ | No۳/HDPE |

۶. نتیجه‌گیری

با توجه به نمودارهای تنش - کرنش ارائه شده با افزودن نانولوله‌های کربنی و نانوهلیکال‌های کربنی به ماتریس مقاومت کششی نمونه افزایش می‌یابد، همچنین با توجه به شکل‌های ۷ و ۸ با افزایش ضریب حجمی تقویت‌کننده‌ها مدول کشسان نمونه‌ها افزایش یافته است. خاصیت تقویت‌کنندگی نانولوله‌ها از نانوهلیکال‌ها بیشتر است و نتایج ارائه شده در جدول ۴ نشان‌دهنده‌ی افزایش مدول کشسان نمونه‌ها با افزایش زاویه‌ی پیچ نانوذرات است. در یک نمونه‌ی ۱ درصد حجمی برای یک نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله‌های کربنی، ذرات به صورت موازی با جهت بارگذاری اعمال شده است؛ مشاهده می‌شود که در این صورت مقاومت کششی و مدول کشسان هر دو نسبت به توزیع همسانگرد افزایش زیادی دارد به طوری که مدول در راستای بارگذاری برای نمونه ناهمسانگرد ۱/۴۵ برابر نمونه همسانگرد است.

در شکل ۱۶ زیر داده‌های اجزاء محدود برای نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله‌های کربنی در [۴۴] با داده‌های شبیه‌سازی شده در این تحقیق مقایسه شده‌اند. روند تغییرات نتایج مشابه با هم با اندکی اختلاف دیده می‌شود، که این اختلاف می‌تواند به دلیل شرایط مرزی متفاوت نمونه و ضریب منظری مختلف تقویت‌کننده‌ها باشد. همچنین نسبت مدول کشسان زمینه به مدول کشسان مؤثر برای نانوکامپوزیت تقویت شده با نانوذره‌ی شماره ۲ (با زاویه‌ی پیچ ۵۰ درجه) در ضریب حجمی ۱٪، ۱/۱۴ محاسبه شده است در حالی که در مطالعات قبلی [۴۴] این مقدار ۱/۰۹ است. نتایج به دست آمده در رابطه با تأثیر زاویه پیچ نانوذرات بر خواص نانوکامپوزیت در این تحقیق با مشاهدات شی ۴^۱ و همکارانش مطابقت دارد. همانطور که در شکل ۱۷ دیده می‌شود با کاهش زاویه پیچ (θ) مدول کشسان نمونه افزایش کمتری داشته است. در واقع نانولوله‌های کربنی خاصیت تقویت‌کنندگی بهتری نسبت نانوهلیکال‌های کربنی دارد. [۴۲]

برای مقایسه‌ی بهتر و راحت‌تر، مدول کشسان تمامی نمونه‌ها در جداول ۳ تا ۵ جمع‌آوری شده‌اند.

1. Carbon nanotube
2. Coiled Carbon nanotube
3. ABAQUS
4. volume fraction
5. Ijima
6. aspect ratio
7. Haggemueller
8. chemical vapor deposition
9. coiled carbon nanotube
10. Ihara
11. Zhang
12. scanning electron microscopy
13. Li
14. nano-indentation
15. Lau
16. eshelbi
17. Mori-Tanaka
18. Halpin-Tsi
19. molecular dynamics
20. molecular mechanism
21. continuum mechanism
22. Chen
23. single wall carbon nanotube
24. poly phenylacetylene
25. frankland
26. graphite nanoplate
27. volume fraction
28. aspect ratio
29. reprehensive volume element
30. Monte cCarlo
31. Tie
32. free mesh
33. tetrahedral elements
34. sweep mesh
35. hexahedral
36. equivalent solid element
37. high density polyethylene
38. static, general
39. isotropic
40. anisotropic
41. Shi

منابع (References)

1. Frank, I., Tanenbaum, D.M., Van der Zande, A. and et al. "Mechanical properties of suspended graphene sheets", *Journal of Vacuum Science & Technology B*, **25**, pp. 2558-2561, (2007).
2. Fukushima, H., Drzal, L.T., Rook, B.P. and et al. "Thermal conductivity of exfoliated graphite nanocomposites", *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, **85**, pp. 235-238, (2006).
3. Drzal, L.T. and Fukushima, H. "Exfoliated graphite nanoplatelets (xGnP): a carbon nanotube alternative", *Proceedings of NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show*, (2006).
4. Thostenson, E.T., Ren, Z. and Chou, T.-W. "Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review", *Composites science and technology*, **61**(13), pp. 1899-1912, (2001).
5. Safaei, M., Sheidaei, A., Baniassadi, M. and et al. "An interfacial debonding-induced damage model for graphite nanoplatelet polymer composites", *Computational Materials Science*, **96**, pp. 191-199, (2015).
6. Alexandre, M. and Dubois, P. "Polymer layered silicate nanocomposites: preparation, properties and uses of a new class of materials", *Materials Science and Engineering: R: Reports*, **28**, pp. 1-63, (2000).
7. Lau, K.T., Lu, M. and Hui, D. "Coiled carbon nanotubes: Synthesis and their potential applications in advanced composite structures", *Composites Part B: Engineering*, **37**, pp. 437-448, (2006).
8. Iijima, S. "Helical microtubules of graphitic carbon", *nature*, **354**, pp. 56-58, (1991).
9. Li, C. and Chou, T.-W. "Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and the effect of van der Waals forces", *Composites Science and Technology*, **63**, pp. 1517-1524, (2003).
10. Yu, M.-F., Lourie, O., Dyer, M.J. and et al. "Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load", *Science*, **287**, pp. 637-640, (2000).
11. Yu, M.-F., Files, B.S., Arepalli, S. and et al. "Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties", *Physical review letters*, **84**, p. 5552, (2000).
12. Cherusseri, J., Sharma, R. and Kar, K.K. "Helically coiled carbon nanotube electrodes for flexible supercapacitors", *Carbon*, **105**, pp. 113-125, (8//2016).
13. Thostenson, E.T. and Chou, T.-W. "On the elastic properties of carbon nanotube-based composites: modelling and characterization", *Journal of Physics D: Applied Physics*, **36**, p. 573, (2003).
14. Mahdavi, M., Yousefi, E., Baniassadi, and et al. "Effective thermal and mechanical properties of short carbon fiber/natural rubber composites as a function of mechanical loading", *Applied Thermal Engineering*, **117**, pp. 8-16, (2017).
15. Ma, P.C., Kim, J.-K. and Tang, B.Z. "Effects of silane functionalization on the properties of carbon nanotube/epoxy nanocomposites", *Composites Science and Technology*, **67**, pp. 2965-2972, (2007).
16. Park, H.J., Badakhsh, A., Im, I.T. and et al. "Experimental study on the thermal and mechanical properties of MWCNT/polymer and Cu/polymer composites", *Applied Thermal Engineering*, **107**, pp. 907-917, (2016).
17. Haggemueller, R., Gommans, H., Rinzler, and et al. "Aligned single-wall carbon nanotubes in composites by melt processing methods", *Chemical physics letters*, **330**, pp. 219-225, (2000).
18. Terrones, M. "Science and technology of the twenty-first century: synthesis, properties, and applications of carbon nanotubes", *Annual review of materials research*, **33**, pp. 419-501, (2003).
19. Itoh, S., Ihara, S. and Kitakami, J.-i. "Toroidal form of carbon C 360", *Physical Review B*, **47**, p. 1703, (1993).
20. Zhang, X., Zhang, X., Bernaerts, D., Van Tendeloo, S. and et al. "The texture of catalytically grown coil-shaped carbon nanotubules", *EPL (Europhysics Letters)*, **27**, p. 141, (1994).

21. Biro, L., Gyulai, J., Lambin, P. and et al. "Scanning tunnelling microscopy (STM) imaging of carbon nanotubes", *Carbon*, **36**, pp. 689-696, (1998).
22. Li, X.-F., Lau, K.-T. and Yin, Y.-S. "Mechanical properties of epoxy-based composites using coiled carbon nanotubes", *Composites science and technology*, **68**, pp. 2876-2881, (2008).
23. Wang, J., Kemper, T., Liang, T. and Sinnott, S.B. "Predicted mechanical properties of a coiled carbon nanotube", *Carbon*, **50**, pp. 968-976, (2012).
24. Khani, N., Yildiz, M. and Koc, B. "Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: A finite element study", *Materials & Design*, **109**, pp. 123-132, (2016).
25. Lau, K.-t., Lu, M. and Liao, K. "Improved mechanical properties of coiled carbon nanotubes reinforced epoxy nanocomposites", *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, **37**, pp. 1837-1840, (2006).
26. Gou, J., Liang, Z., Zhang, C. and Wang, B. "Computational analysis of effect of single-walled carbon nanotube rope on molecular interaction and load transfer of nanocomposites", *Composites Part B: Engineering*, **36**, pp. 524-533, (2005).
27. Odegard, G., Clancy, T. and Gates, T. "Modeling of the mechanical properties of nanoparticle/polymer composites", *Polymer*, **46**, pp. 553-562, (2005).
28. Li, Y. and Seidel, G.D. "Multiscale modeling of the effects of nanoscale load transfer on the effective elastic properties of unfunctionalized carbon nanotube-polyethylene nanocomposites", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **22**, p. 025023, (2014).
29. Chen, H., Xue, Q., Zheng, Q. and et al. "Influence of nanotube chirality, temperature, and chemical modification on the interfacial bonding between carbon nanotubes and polyphenylacetylene", *The Journal of Physical Chemistry C*, **112**, pp. 16514-16520, (2008).
30. Liao, k. and Li, S. "Interfacial characteristics of a carbon nanotube-polystyrene composite system", *Applied Physics Letters*, **79**, pp. 4225-4227, (2001).
31. Rahmat, M. and Hubert, P. "Molecular dynamics simulation of single-walled carbon nanotube-PMMA interaction", in *Journal of Nano Research*, pp. 117-128, (2012).
32. Frankland, S., Caglar, A., Brenner, D. and et al. "Molecular simulation of the influence of chemical cross-links on the shear strength of carbon nanotube-polymer interfaces", *The Journal of Physical Chemistry B*, **106**, pp. 3046-3048, (2002).
33. Weisstein. E. and Lorenz Attractor, M.-A. "Sphere Point Piking. MathWorld-A Wolfram web resource", ed, (2002).
34. Yves, R., Ahzi, S., Baniassadi, M. and et al. *Applied RVE Reconstruction and Homogenization of Heterogeneous Materials: John Wiley & Sons*, (2016).
35. Volodin, A., Ahlskog, M., Seynaeve, E. and et al. "Imaging the elastic properties of coiled carbon nanotubes with atomic force microscopy", *Physical review letters*, **84**, p. 3342, (2000).
36. Ju, S.-P., Lin, J.-S., Chen, H.-L. and et al. "A molecular dynamics study of the mechanical properties of a double-walled carbon nanocoil", *Computational Materials Science*, **82**, pp. 92-99, (2014).
37. Lu, J.P. "Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes", *Physical Review Letters*, **79**, p. 1297, (1997).
38. Kwon, H. and Jar, P.-Y. "On the application of FEM to deformation of high-density polyethylene", *International Journal of Solids and Structures*, **45**, pp. 3521-3543, (2008).
39. Golestanian, H. and Gahruei, M. "Effective mechanical properties of nanocomposites reinforced with wavy carbon nanotubes", *Materials Science and Technology*, **29**, pp. 913-920, (2013).
40. Arash, B., Park, H.S. and Rabczuk, T. "Mechanical properties of carbon nanotube reinforced polymer nanocomposites: a coarse-grained model", *Composites Part B: Engineering*, **80**, pp. 92-100, (2015).
41. Mortazavi, B., Baniassadi, M., Bardou, J. and et al. "Modeling of two-phase random composite materials by finite element, Mori-Tanaka and strong contrast methods", *Composites Part B: Engineering*, **45**, pp. 1117-1125, (2/2013).
42. Shi, D.-L., Feng, X.-Q. Huang, Y.Y. and et al. "The effect of nanotube waviness and agglomeration on the elastic property of carbon nanotube-reinforced composites", *Journal of Engineering Materials and Technology*, **126**, pp. 250-257, (2004).