

## بررسی عددی اثر نانولوله های کربنی بر خواص مکانیکی و رفتار شکست نانوکامپوزیت پلیمری با استفاده از مدل الیاف ناپیوسته

**چکیده:** استفاده از مدل های تجربی و شبه تجربی برای مدل کردن خواص نانوکامپوزیت ها به منظور پیش بینی خواص مکانیکی و شکست آن ها می تواند به کاهش هزینه و زمان و طراحی بهینه آن ها منجر شود. در این پژوهش به منظور مدل کردن خواص مکانیکی و رفتار شکست نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانولوله های کربنی در درصدهای حجمی ۰/۵ درصد، ۰/۷۵ درصد و ۱ درصد از مدل الیاف ناپیوسته (کوتاه) استفاده شده است. مدل الیاف ناپیوسته در پژوهش های پیشین برای مدل کردن خواص کامپوزیت ها با الیاف تقویت کننده ناپیوسته در مقیاس ماکرو مورد استفاده قرار گرفته است که با توجه به هندسه استوانه ای شکل نانولوله ها، از این روش در کار حاضر استفاده شده است، همچنین با استفاده از این مدل و نیز مدل توزیع تصادفی نانولوله ها در ماتریس اپوکسی شبیه سازی اجزای محدود خواص مکانیکی و رفتار شکست در مقیاس نانو و مزو با بهره گیری از برنامه نویسی زبان پایتون انجام گرفته است.

**واژه های راهنما:** مدل الیاف ناپیوسته، رفتار شکست، نانوکامپوزیت پلیمری، نانولوله های کربنی، روش اجزای محدود

### حامد بازوندی\*

استادیار،  
گروه مهندسی مکانیک،  
واحد خرم آباد، دانشگاه آزاد  
اسلامی، خرم آباد

### هومن فراشزاده

کارشناسی ارشد،  
گروه مهندسی مکانیک،  
واحد خرم آباد، دانشگاه آزاد  
اسلامی، خرم آباد

مقاله علمی پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۲/۰۶/۱۴

بازنگری: ۱۴۰۲/۰۷/۲۵

پذیرش: ۱۴۰۲/۱۰/۲۳

### Hamed Bazvandi\*

Assistant Professor,  
Department of  
Mechanical Engineering,  
Khorramabad Branch,  
Islamic Azad University,  
Khorram Abad

### Hooman Farashzade

MSc., Department of  
Mechanical Engineering,  
Khorramabad Branch,  
Islamic Azad University,  
Khorram Abad

## Numerical investigation of the effect of carbon nanotubes on mechanical properties and fracture behavior of polymeric nanocomposite using discontinuous fiber model

**Abstract:** The use of empirical and semi-empirical models to model the properties of nano composites to predict mechanical properties and failure leads to cost and time reduction and optimal design. In this study, discontinuous (short) fiber models were used to model the mechanical properties and fracture behavior of carbon nanotube reinforced polymer nanocomposites with volume fractions of 0.5%, 0.75%, and 1%. In previous studies, the discontinuous fiber model was used to determine the macro scale properties of composites reinforced with discontinuous fibers. In this study, a model that considers the geometric similarity between short fibers and nanotubes was used. Using this model and the model of random distribution of nanotubes in the epoxy matrix, simulations were performed using the Python programming language and the mechanical properties and fracture behavior were investigated at the Nano and mesoscales.

**Keywords:** Discontinuous fiber model, Fracture behavior, Polymeric nanocomposite, Carbon nanotube, FEM

## ۱- مقدمه

کشیدگی و تنش بحرانی سطح میانی نسبت به تغییرات پارامترهای طول و قطر تا حدودی موثر است. زابری و است [۹] با استفاده از روش اجزای محدود با مدل کردن المان حجمی نماینده به تخمین مدول یانگ موثر نانوکامپوزیت پلیمری برای انواع نانولوله شامل مدل دسته صندلی، کایرال و زیگزاگی پرداختند، نتایج نشان داد مدل دسته صندلی برای کاربردهای استحکام بالا مناسب می باشد در حالی که مدل زیگزاگی در جاهای که استحکام نسبتاً کمتر است مناسب می باشد و همچنین نشان دادند بین نتایج عددی و تئوری مطابقت خوبی وجود دارد. آلیان، کاندوول و مگوبد خواص الاستیک موثر با تاثیر انباشتگی نانولوله های کربنی در کامپوزیت با زمینه اپوکسی را با توسعه مدل دینامیک مولکولی و مدل چند مقیاس محاسبه کردند. آنها نشان دادند که درجه بالاتری از ارتوتروپی فیبر در مقیاس نانو به طور قابل توجهی بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت تأثیر می گذارد [۱۰]. اورا و پاتاک مدلی محاسباتی برای محاسبه خواص الاستیک در بارگذاری های مختلف (محوری و برشی) با استفاده از روش اجزای محدود ارائه کردند، از نتایج عددی مشاهده شد که رابطه ماتریس و پرکننده به طور قابل توجهی بر استحکام الاستیک کامپوزیت های پلیمری تأثیر می گذارد [۱۱]. نگی و همکاران [۱۲] ابتدا با استفاده از مدل هالپین-تسای اصلاح شده مدول الاستیک در نانوکامپوزیت با ماتریس اپوکسی تقویت شده با نانولوله های کربنی تک و چند دیواره پرداختند و سپس با استفاده از روش اجزای محدود توسعه یافته رشد ترک را مورد بررسی قرار دادند و نتیجه گرفتند نانولوله های کربنی تک دیوار در مقایسه با نانولوله های کربنی چند دیواره اثر قابل توجه تری روی طول ترک و ماندگی دارد. اسماعیلی [۱۳] انرژی شکست و استحکام کششی پایه اپوکسی تقویت شده با نانولوله های کربنی چند دیواره را به روش تجربی بررسی و نتایج را با روش عددی اجزای محدود اعتبار سنجی کردند، نتایج نشان داد انرژی شکست و استحکام کششی با افزودن نانولوله های کربنی چند دیواره به اپوکسی، افزایش می یابد. ترونک و چوی [۱۴] اثر افزودن نانولوله های کربنی چند دیواره کوتاه در درصد های وزنی ۰/۵، ۱ و ۱/۵ را بر چقرمگی شکست در حالت بازشدگی کامپوزیت پلیمری تقویت شده با الیاف کربن را با سه روش تئوری تیر اصلاح شده، روش کالیبراسیون منطبق و روش کالیبراسیون منطبق اصلاح شده و همچنین به روش تجربی مورد مطالعه قرار دادند، که نتایج بدست آمده بیانگر افزایش چقرمگی شکست با افزایش درصد وزنی نانولوله های کربنی و قرابت نتایج بدست آمده از روش های یادشده بود. آن ها همچنین یک مدل تئوری را بر مبنای قانون پل برای تخمین چقرمگی شکست نانوکامپوزیت پلیمری با نانولوله های کربنی ارائه دادند که انطباق خوبی را با نتایج تجربی نشان داد. احمدی و همکاران [۱۵] با استفاده از روش اجزای محدود چند مقیاس به تحلیل کماتش در میله ساخته شده از پلی آمید و هیبرید الیاف کربن و نانولوله

پلیمرها با پرکننده های گوناگون در اندازه و شکل های مختلف به منظور دستیابی به خواص بهتر فیزیکی، مکانیکی، حرارتی، الکتریکی، مغناطیسی و اپتیکی تقویت می شوند که در سه دهه اخیر پرکننده های در مقیاس نانو مورد توجه بیشتری قرار گرفته اند. پرکننده های مقیاس نانو به سه دسته اصلی صفر بعدی (مانند نانوذرات سیلیکا)، یک بعدی (مانند نانولوله های کربنی) و دو بعدی (مانند نانو صفحات گرافن) تقسیم بندی می شوند [۱]. نانوکامپوزیت های پلیمری مواد با دو مؤلفه ماتریس پلیمری و پرکننده های در مقیاس نانو هستند که می توان آنها را بر اساس ریخت شناسی، ابعاد نانوذرات، نوع پلیمر و پاسخ حرارتی دسته بندی کرد [۲].

نانوکامپوزیت های پلیمری با روش های بسیاری تهیه می شوند که سه روش مهم آن شامل مخلوط سازی مکانیکی، پلیمریزاسیون و اختلاط ذوبی است [۳].

نانوکامپوزیت های پلیمری با بهبود خواص مکانیکی، حرارتی، الکتریکی، مغناطیسی و اپتیکی در طیف گسترده ای از صنایع هوافضا، خودروسازی، پزشکی، حسگرها، تصفیه آب بسته بندی و محافظ الکترومغناطیسی کاربرد دارند [۱، ۴].

مقصودلو و همکاران [۵] تاثیرات فاز میانی، انحنا و انباشتگی نانولوله های کربنی تک دیواره را بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری با روش تجربی و شبیه سازی اجزای محدود با تعریف شش مورد المان حجمی نماینده با درصد های وزنی ۰/۱، ۰/۳ و ۰/۵ درصد از نانولوله کربنی مورد ارزیابی قرار دادند، که بهترین انطباق میان نتایج تجربی و عددی با لحاظ کردن هم زمان پارمترهای انحنا و انباشتگی در نمونه ۰/۱ درصد از نانولوله با درصد خطای ۴/۱ مشاهده شد.

محسن زاده و همکاران [۶] با بهره گیری از روش اجزای محدود و دینامیک مولکولی تأثیر پارامترهایی چون طول، قطر و کایرالتی برمدول یانگ و مدول برشی نانولوله های معیوب را بررسی و نشان دادند که پارامتر قطر نسبت به طول تأثیر بیشتری بر مدول یانگ نانولوله ها دارد، و عیب جای خالی برای نانولوله های کایرال اثرگذاری بیشتری بر مدول یانگ، نسبت به انواع زیگزاگی و آرچیپر دارد.

دستگرد، انصاری و روحی با شبیه سازی نانولوله های کربنی، سیلیکونی، ژرمانیومی و قلعی با مقید کردن با قید محبوس سازی در مقیاس نانو به روش اجزای محدود، به تخمین مدول یانگ پرداخته و برتری نانولوله کربنی بر افزایش سختی نانوکامپوزیت را نسبت به سایر نانولوله ها نشان دادند [۷].

یزدان پرست و رفیعی [۸] تاثیر سرعت بیرون کشی نانولوله های کربنی در ماتریس پلیمری بر تنش برشی بحرانی سطح میانی نانولوله های کربنی و ماتریس پلیمری را با روش دینامیک مولکولی شبیه سازی کرده و نشان دادند که تغییرات انرژی بیرون

پلیمری اپوکسی را از منظر روش اجزای محدود و دینامیک مولوکولی مورد بررسی قرار دادند و نتیجه گرفتند فاز میانی بازده انتقال بار از زمینه به نانولوله کربنی را کاهش می دهد. موریا، جاوید و چاکریرتی با بهره گیری از روش اجزای محدود رفتار خمشی صفحات نانوکامپوزیتی تقویت شده با نانولوله کربنی با اثر انباشتگی در توزیع یکنواخت و تابعی مورد مطالعه قرار دادند، نتایج نشان داد نانولوله های کربنی تمایل دارند در کسرهای حجمی بسیار کم تجمع پیدا کنند و عدم در نظر گرفتن اثر تجمع نانولوله های کربنی ممکن است منجر به تخمین بیش از حد خواص الاستیک نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله های کربنی شود که منجر به پیش بینی غیر دقیق رفتار ساختاری می شود. [۲۳]. در کنار روش هایی مانند روش عددی اجزای محدود، دینامیک مولوکولی و روش های تجربی می توان به مدل هایی مانند مدل هالپین-تسای، مدل راس، مدل الیاف ناپیوسته، مدل لویس و نیلسون، مدل انیشتن، مدل جی، مدل ویت، مدل گات و گلد اشاره کرد که برای تخمین خواص نانوکامپوزیت ها به خصوص در محدوده الاستیک قابل استفاده می باشند [۲۴].

در نگاهی کلی به پیشینه های بیان شده بررسی نانوکامپوزیت های پلیمری و اثر نانو تقویت کننده ها از منظرهای گوناگون نانومقیاس، میکرو مقیاس، مزو مقیاس و ماکرو مقیاس قابل بررسی بوده و روش تجربی و عددی (عمدتاً اجزای محدود) و نیز دینامیک مولوکولی چارچوب پژوهش های انجام شده بوده و روش عددی اجزای محدود در مقیاس های گوناگون جهت پیش بینی در اعتبارسنجی نتایج مورد استفاده بوده است.

در مقاله حاضر خواص الاستیک و انرژی شکست و همچنین تمرکز تنش در نانولوله کربنی و نانوکامپوزیت پلیمری با ماتریس اپوکسی و اثر نانولوله های کربنی در درصدهای وزنی متفاوت با استفاده از مدل چند مقیاس و روش اجزای محدود توسعه یافته مورد بررسی قرار گرفته است.

## ۲- معادلات و روابط

### ۲-۱- مدل الیاف ناپیوسته

به منظور تخمین استحکام و انرژی شکست در کامپوزیت تقویت شده با نانولوله های کربنی، می توان نانولوله های کربنی را با الیاف ناپیوسته که به طور تصادفی در ماتریس توزیع شده است معادل دانست که مطابق این مدل استحکام شکست به صورت زیر نشان داده شده است [۲۵].

$$\sigma_c = C\sigma_f V_f \left(1 - \frac{L_e}{2L}\right) + \sigma_m(1 - V_f) \quad (1)$$

که در اینجا  $\sigma_c$  استحکام کامپوزیت،  $\sigma_f$  و  $\sigma_m$  به ترتیب استحکام الیاف و استحکام ماتریس،  $V_f$  کسر حجمی الیاف،  $L_e$  و  $L$  به ترتیب طول مؤثر و طول میانگین الیاف و  $C$  ضریب اصلاحی اثر

های کربنی به عنوان تقویت کننده پرداختند، نشان داده شد وقتی که پلی آمید با هیبرید الیاف کربن و نانولوله های کربنی تقویت می شود مدول یانگ و مقاومت به کمانش به طور قابل ملاحظه ای افزایش می یابد. چاری توزا و همکاران [۱۶] به ارائه مدلی در مقیاس میکرو به منظور پیش بینی مدول الاستیک موثر نانوله های کربنی در ماتریس پلیمری از جنس پلی اتیلن کم دانسیته خطی پرداختند یافته های این تحقیق نشان داد که مدل تحلیلی ارائه شده دارای دقت مناسب جهت پیش بینی مدول الاستیک نانو کامپوزیت های پلیمری است. شین [۱۷] سازوکارهای سفت شوندگی نانوکامپوزیت های پلیمری که با نانولوله ها تقویت شده را از سه منظر جدایش سطحی، تسلیم پلاستیک ناشی از فضای خالی در مقیاس نانو و بیرون زدگی نانولوله کربنی رابه منظور دستیابی به اصول کلی چقرمگی شکست در نانوکامپوزیت های پلیمری با بهره گیری از مدل چندمقیاس مورد بررسی قرار داد، این مطالعه نشان داد تسلیم پلاستیک ناشی از فضای خالی و بیرون زدگی نانولوله کربنی در تقویت چقرمگی شکست نانوکامپوزیت های پلیمری / نانولوله های کربنی بسیار مهم است. شیروودکار، چنگ و سیدل [۱۸] در یک مطالعه تجربی تاثیر نانولوله های کربنی و نانوصفات گرافن بر رفتار شکست اپوکسی مورد بررسی قرار دادند و نشان دادند انرژی شکست بحرانی و ضریب شدت تنش بحرانی در تمامی نمونه های حاوی نانولوله های کربنی و نانوصفات گرافن نسبت به نمونه اپوکسی خالص افزایش می یابد و نمونه پلیمری / نانولوله کربنی با درصد وزنی ۰/۵ درصد بالاترین افزایش در انرژی شکست بحرانی و ضریب شدت تنش بحرانی را نشان داد. شو و همکاران [۱۹] با استفاده از روش تجربی به بررسی تاثیر قطر نانولوله کربنی چند دیواره بر رفتار مکانیکی و سفتی شکست نانوکامپوزیت پایه اپوکسی در درصد های وزنی مختلف پرداختند، آنها نتیجه گرفتند قطر بهینه نانولوله کربنی چند دیواره ۲۵ نانومتر است که در درصد وزنی ۰/۷ بهترین چقرمگی را نشان می دهد. بوهمیک [۲۰] اثر نانولوله های کربنی چند دیواره را بر روی رفتار مکانیکی و رفتار آسیب کامپوزیت پلیمری با ماتریس اپوکسی تقویت شده با الیاف کربن با اثر کلوخه شدن نانولوله ها مورد بررسی قرار داد و همچنین با استفاده از مدل آسیب هاشین و روش اجزای محدود توسعه یافته رفتار آسیب را مدل سازی و شبیه سازی کردند آنها نتیجه گرفتند استحکام کششی به علت استحکام بالاتر نانو لوله های کربنی افزایش می یابد اما ازدیاد طول در هنگام شکست به دلیل ماهیت ترد نانولوله های کربنی کاهش می یابد. وگاس و همکاران [۲۱] با استفاده از روش عددی به بررسی اثر انباشتگی نانولوله های کربنی چند دیواره با درصد پلیمری پرداختند و مشخص شد انباشتگی نانولوله های کربنی چند دیواره تاثیرات منفی بر عملکرد مکانیکی نمونه های حاوی درصد بالای نانولوله های کربنی دارد. سونگ و همکاران [۲۲] خواص الاستیک فاز میانی ما بین نانولوله کربنی و ماتریس

انرژی جذب شده توسط الیاف از رابطه زیر قابل محاسبه شده است [۲۶]:

$$G_s = \frac{\pi}{2} d_f \tau l^2 e^{f\varphi} \quad (5)$$

که در اینجا  $\tau$  استحکام چسبندگی مابین الیاف و ماتریس است و  $U(g)$  تابع پله واحد به شکل زیر است:

$$U(g) = \begin{cases} 1 & g > 0 \\ 0 & g \leq 0 \end{cases} \quad (6)$$

و  $l$  طول جاسازی یا نفوذ نانولوله در ناحیه ترک است:

$$l = \left( \frac{L_f}{2} \right) - (z / \cos \varphi) \quad (7)$$

و همچنین مقدار  $g$  از رابطه زیر به دست می‌آید [۲۶]:

$$g = z - \left( \frac{L_f}{2} - L_c e^{f\varphi} \right) \quad (8)$$

در رابطه بالا  $L_c$  طول بحرانی الیاف است و از رابطه زیر به دست می‌آید [۲۶]:

$$L_c = \frac{d_f \sigma_f}{4\tau} \quad (9)$$

در رابطه بالا  $d_f$  قطر الیاف ناپیوسته را می‌دهد.

## ۲-۲- مدل هالپین-تسای

مدل هالپین-تسای یک مدل شبه تجربی است که به منظور تخمین مدول الاستیک کامپوزیت های تقویت شده با الیاف در جهت های طولی و عرضی توسعه داده شده است و برای نانوکامپوزیت های پلیمری به خصوص با تقویت نانولوله های کربنی قابل استفاده است [۲۷]، [۲۴]. معادله هالپین - تسای برای تخمین مدول الاستیک به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۷]:

$$E_C = E_m \left[ \frac{1 + \zeta \eta \phi_f}{1 - \eta \phi_f} \right] \quad (10)$$

که در اینجا  $E_C$  مدول الاستیک کامپوزیت،  $E_m$  مدول الاستیک ماتریس،  $\phi_f$  کسر حجمی تقویت کننده و  $\eta$  نیز به صورت زیر ارائه شده است [۲۷]:

$$\eta = \frac{E_f / E_m - 1}{E_f / E_m + \zeta} \quad (11)$$

و همچنین پارامتر  $\zeta$  که به هندسه تقویت کننده ها وابسته است عبارت است از [۲۷]:

جهت گیری الیاف است. باتوجه به رابطه (۱) مدول الاستیک کامپوزیت به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۵]:

$$E_C = C E_f V_f + E_m (1 - V_f) \quad (2)$$

در رابطه بالا  $E_C$ ،  $E_m$  و  $E_f$  به ترتیب مدول الاستیک کامپوزیت، ماتریس و الیاف هستند. همچنین انرژی شکست با استفاده از این مدل به شکل زیر ارائه شده است [۲۶]:

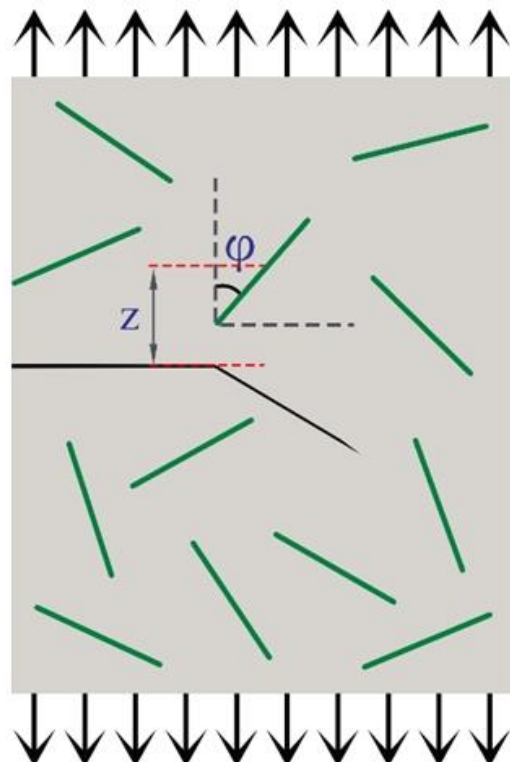
$$G = \frac{V_f}{A_f} \int_0^{L_f/2} \left[ \int_{\varphi} G_s(L_f, d_f, \varphi) U(g) \rho(\varphi) d\varphi \right] \rho(z) dz \quad (3)$$

$$\rho(z) = \frac{2}{L_f} \cdot \rho(\varphi) = \sin \varphi$$

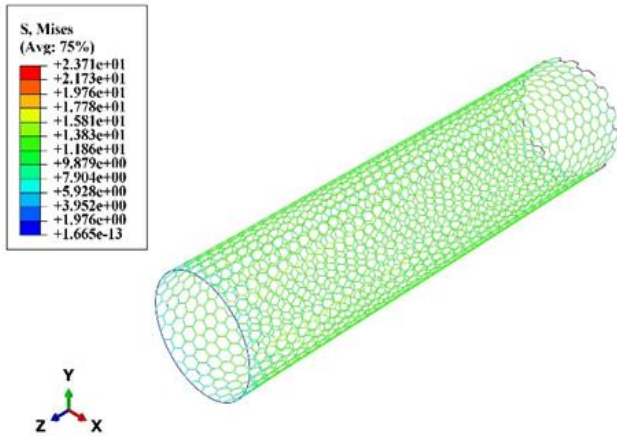
در اینجا  $A_f$  سطح مقطع الیاف،  $L_f$  طول الیاف،  $\varphi$  زاویه الیاف نسبت به راستای نیروی کشش،  $\rho(\varphi)$  و  $\rho(z)$  توابع چگالی احتمال هستند و  $z$  فاصله مرکز الیاف نسبت به ترک است و مقادیر زیر را اختیار می‌کنند (شکل ۱) [۲۶]:

$$0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \quad (4)$$

$$0 \leq z \leq \frac{L_f}{2}$$



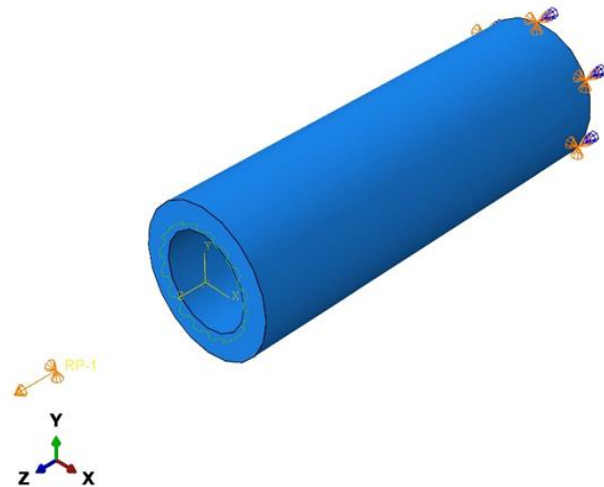
شکل ۱ جهت گیری الیاف ناپیوسته



شکل ۲ مقادیر تنش فون میسز در نانولوله های کربنی

در آخر برای مش بندی کامل نمونه با توجه به هندسه استوانه ای نمونه از الگوی جاروبی استفاده شده است و از المان شش وجهی هشت گره ای با انتگرال گیری کاهش یافته برای ماتریس و المان خرپا دو گره ای برای نانولوله کربنی استفاده شده است (شکل ۴).

در شکل (۵) موقعیت ترک داخل المان حجمی نماینده نشان داده شده است و در ادامه توزیع تنش در ماتریس و نانوکامپوزیت در مقیاس نانو بررسی شده است (شکل ۶، ۷)، مشاهده می شود تنش به میزان قابل توجهی در نانوکامپوزیت نسبت به حالت ماتریس تغییر می کند. برای دستیابی به دقت و صحت نتایج به دست آمده از روش اجزای محدود، تعداد المان ها را تا زمانی که پاسخ به مقدار معینی همگرا شود و پس از آن افزایش تعداد المان ها نتایج به دست آمده را تغییر ندهد ادامه پیدا کرده است. بدین منظور دو نقطه متمایز در نانولوله کربنی و ماتریس انتخاب شده است.



شکل ۳ شرایط مرزی اعمال شده در مقیاس نانو

$$\zeta = \frac{2L}{D} \quad (12)$$

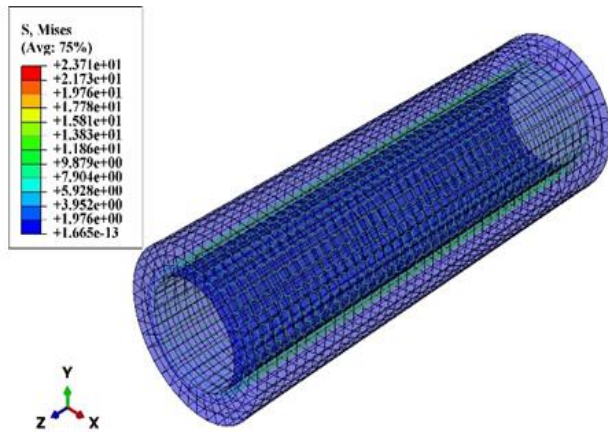
که در اینجا  $D$  و  $L$  به ترتیب قطر و طول تقویت کننده است و برای مقدار  $\zeta=2$  نتایج قابل قبولی گزارش شده است [۲۷].

### ۳- نتایج عددی

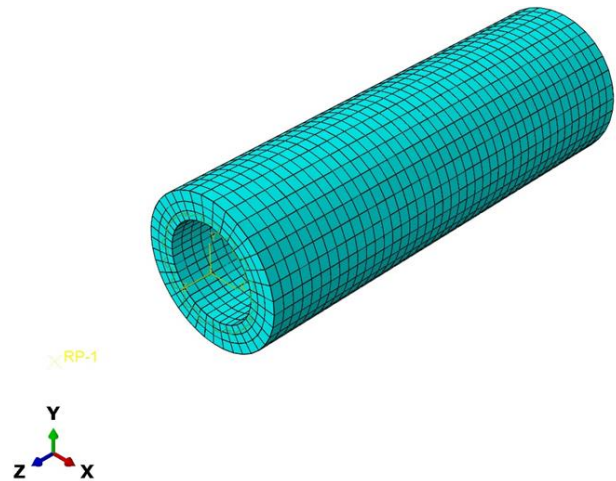
به منظور تخمین خواص مکانیکی و شکست نانوکامپوزیت های پلیمری با زمینه اپوکسی از مدل الیاف گسسته استفاده شده است. این مدل به همراه نحوه توزیع تصادفی نانولوله ها در ماتریس با استفاده از برنامه نویسی با نرم افزار پایتون نسخه ۲،۷،۳ [۲۸] و در نرم افزار اجزای محدود آباکوس [۲۹] نسخه ۲۰۱۶ اجرا شده است. در این پژوهش شبیه سازی در مقیاس های نانو و میکرو انجام گرفته است. در مقیاس نانو، نانولوله کربنی با ساختار شش ضلعی منتظم که طول هر ضلع  $0.14$  نانومتر است حول محور گذرنده از مرکز نانولوله کربنی (شکل ۲) طراحی شده است. همچنین ماتریس اپوکسی به صورت یک استوانه با قطر درونی و بیرونی به ترتیب  $2$  و  $3$  نانومتر و طول  $20$  نانومتر (شکل ۳) برای محیط کردن نانولوله مدل شده است پس از تعریف خواص نانولوله های کربنی و ماتریس اپوکسی (جدول ۱) هر قسمت به طور جداگانه، نانولوله با استفاده از قید جاسازی ابر همکنش میان ماتریس و نانولوله، درون ماتریس قرار داده شده است به طوری که مماس به سطح درونی ماتریس باشد و سختی بالای نانولوله در المان های مشترک با ماتریس اعمال شده است. سطح پشتی در تمامی جهات مقید شده است و برای اعمال بارکششی به سطح جلویی استوانه، یک نقطه مرجع در آباکوس تعریف شد و این نقطه با سطح جلویی استوانه جفت شد و سپس در نقطه مدنظر جابه جایی  $0.1$  نانومتری در راستا محوری لحاظ شد و در جهت های دیگر مقید شده است (شکل ۳).

جدول ۱ خواص نانولوله ها و ماتریس اپوکسی

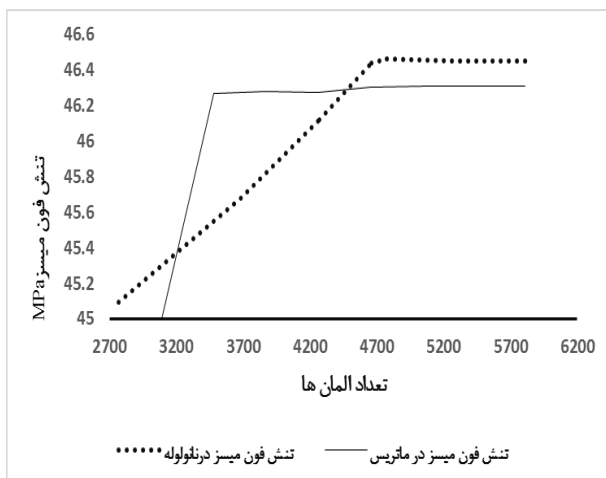
خواص ماده	اپوکسی [۳۰]	نانو لوله کربنی [۳۱]
چگالی	۱۲۰۰ کیلوگرم بر متر مکعب	۷۰۰ کیلوگرم بر متر مکعب
مدول یانگ	۲/۸ گیگاپاسکال	۱۰۰۰ گیگاپاسکال
نسبت پواسن	۰/۳	-
استحکام نهایی	۳۵ مگاپاسکال	۱۰۰۰ مگاپاسکال
کشیدگی در نقطه شکست	٪ ۱	-



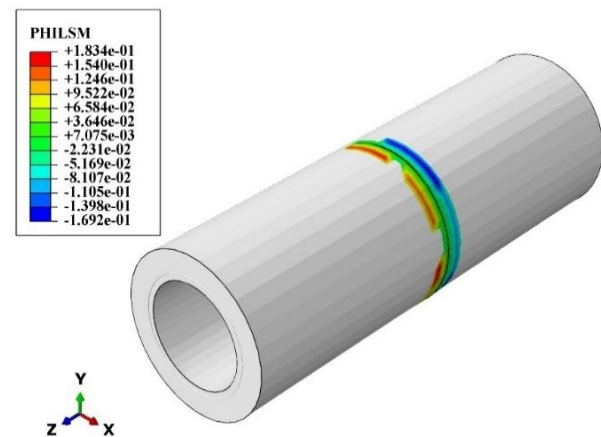
شکل ۷ مقادیر تنش فون میسز در نانوکامپوزیت پلیمری



شکل ۴ شبکه بندی نمونه

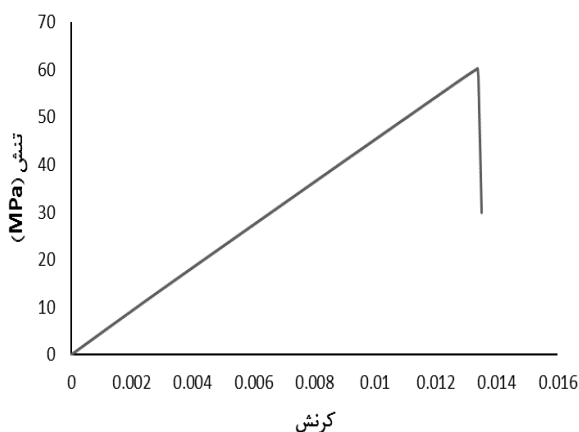


شکل ۸ مقادیر تغییر تنش فون میسز در نانولوله و ماتریس با تغییر تعداد المان‌ها

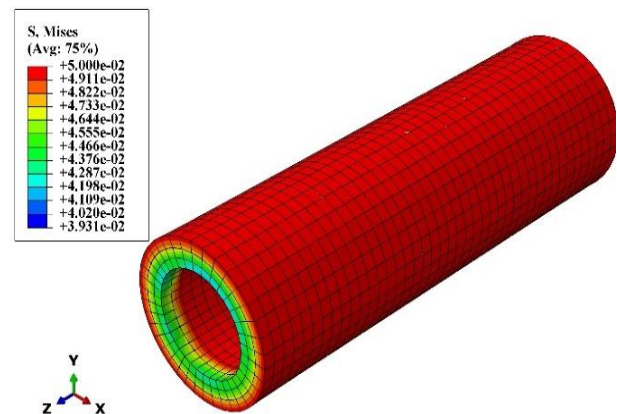


شکل ۵ رشد ترک در نانوکامپوزیت پلیمری در مقیاس نانو

همچنین با استفاده از نتایج به دست آمده از شبیه سازی در مقیاس نانو که در (شکل ۹) نشان داده شده است، مدول الاستیک و استحکام کششی ماتریس اپوکسی به ترتیب ۵۸/۹۳ درصد و ۲۰/۷۲ درصد افزایش پیدا کرده است.



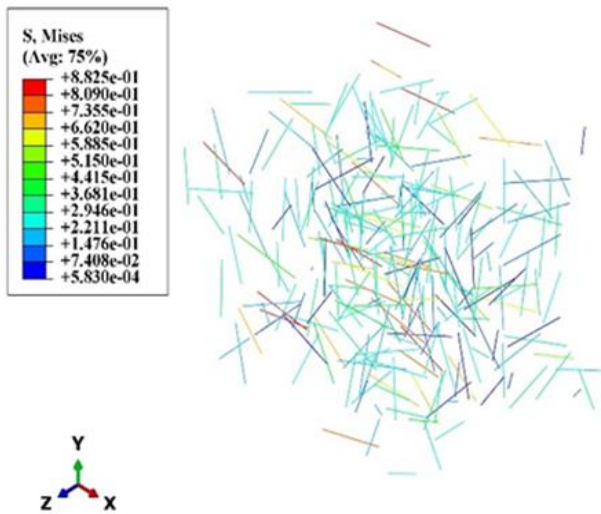
شکل ۹- تنش-کرنش



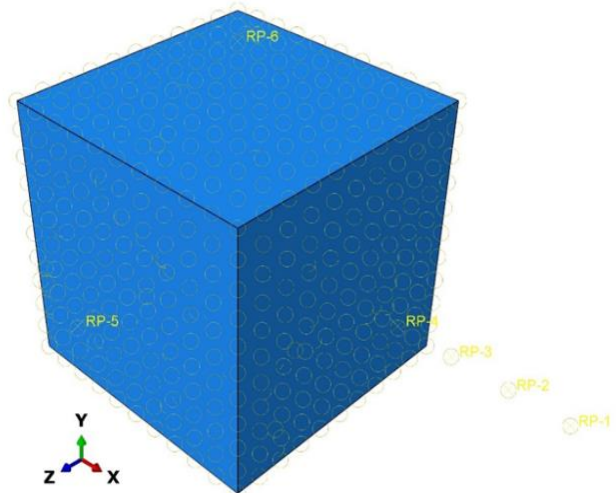
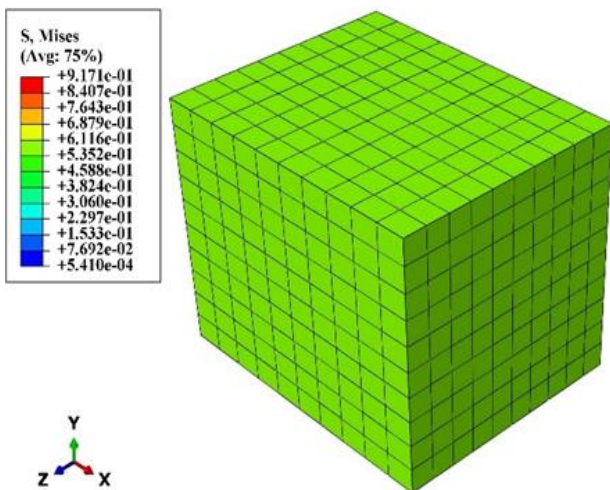
شکل ۶ مقادیر تنش فون میسز در ماتریس

مشاهده شد مقادیر تنش فون میسز در آن نقاط با افزایش تعداد المان ها تا ۴۷۷۷ عدد برای نانولوله کربنی و ۴۶۶۲ عدد برای ماتریس تغییر می یابد و پس از آن نتایج نسبت از تعداد المان‌ها مستقل شده و افزایش تعداد المان‌ها تغییری در نتایج ایجاد نمی کنند (شکل ۸).

نانولوله های کربنی کاهش می یابد و متعاقبا کاهش بار بر تمامی حجم نماینده نانوکامپوزیت مشاهده می شود (شکل ۱۲).

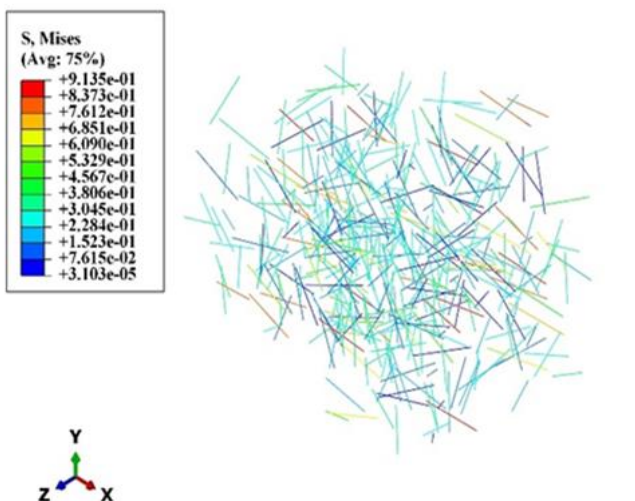


در ادامه برای شبیه سازی در مقیاس مزو یک مکعب با ابعاد  $100 \times 100 \times 100$  نانومتر به عنوان حجم نماینده تعریف شده است و نانولوله کربنی با قطر و طول متوسط به ترتیب ۲ نانومتر و ۲۰ نانومتر در نظر گرفته شده است، همچنین مشبندی در مقیاس مزو نیز با استفاده از المان شش وجهی با ۸ گره برای ماتریس و المان خرپا برای نانولوله انجام گرفته است، و باتوجه به اینکه حجم نماینده برای محاسبه خواص الاستیک بارگذاری باید به گونه ای باشد که در جهت های مختلف به دیگر المان های حجم نماینده متصل شود و باید جابه جایی گره ها را کنترل نماید (شکل ۱۰)، لذا ضروری است که هر کدام از گره ها در صفحات متوازی در هنگام اعمال بار دارای مقدار جابه جایی ثابت باشند؛ بنابراین برای ایجاد برهمکنش بین نقاط متناظر از قید معادله استفاده شده است. باتوجه به تعداد بالای گره ها در حجم نماینده اعمال شرایط مرزی متناوب بر هر گره به کمک برنامه نویسی پایتون در نرم افزار آباکوس انجام شده است.

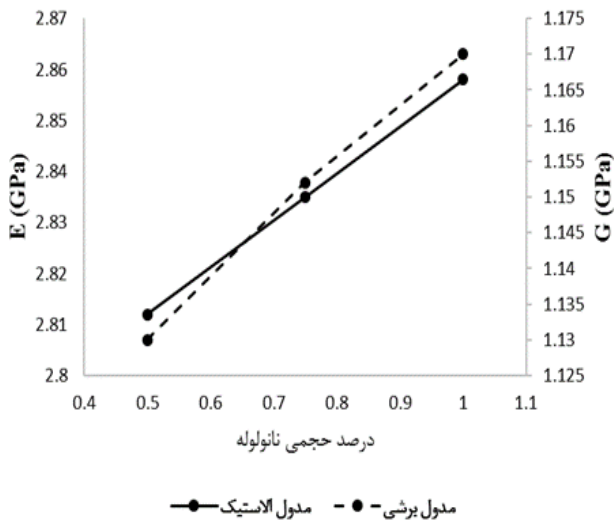


شکل ۱۱ تنش فون میسز در ۰/۵ درصد حجمی نانولوله ها و حجم نماینده

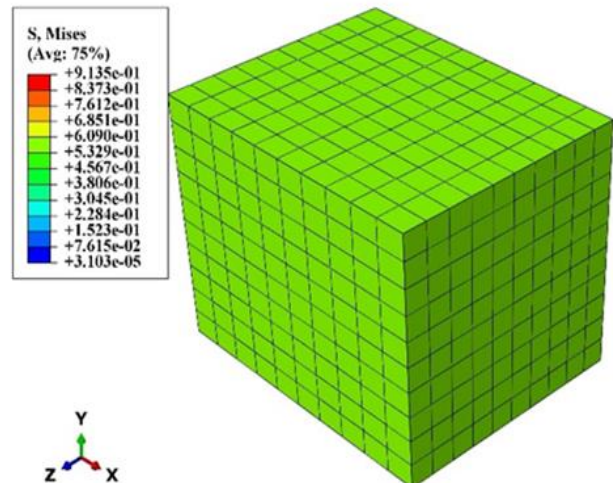
شکل ۱۰ شرایط مرزی متناوب به حجم نماینده



در ادامه کانتورهای تنش فون میسز در مقیاس مزو برای درصد های حجمی ۰/۵، ۰/۷۵ و ۱ درصد برای نانولوله های کربنی و ماتریس در المان حجم نماینده نشان داده شده است (شکل ۱۱، ۱۲، ۱۳). در شکل (۱۱) مشاهده می شود بیشترین تنش به نانولوله های کربنی وارد می شود که نشان می دهد باریکتر بر سطح نانولوله های کربنی نسبت به ماتریس اعمال شده است، و در میان نانولوله ها کربنی، بار بیشینه به نانولوله کربنی اعمال می شود که کمترین زاویه را نسبت به راستای بارکشی دارد و تنش با افزایش زاویه جهت گیری نانولوله کربنی نسبت به راستای بارکشی کاهش می یابد. با افزایش تعداد نانولوله های کربنی به درصد حجمی ۰/۷۵ تنش اعمال شده بر



شکل ۱۴ مقادیر مدول الاستیک و برشی در درصد های حجمی مختلف نانولوله ها



شکل ۱۲ تنش فون میسز در ۰/۷۵ درصد حجمی نانولوله ها و حجم نماینده

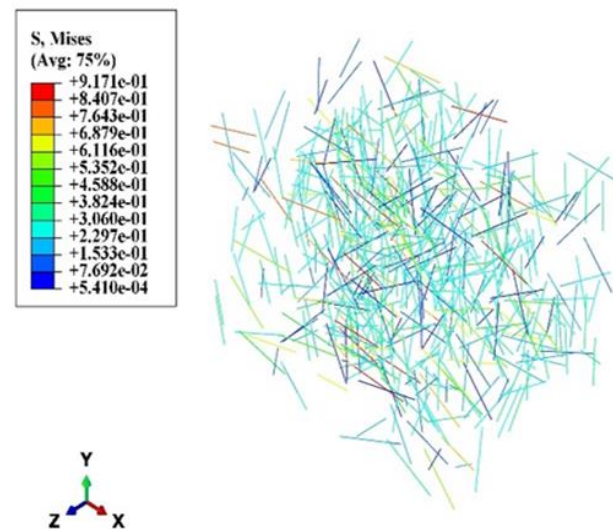
در آخر باتوجه به افزایش حجم نانولوله های کربنی به ۱ درصد مشاهده می شود تعداد نانولوله های کربنی که کمترین بار بر آنها اعمال می شود افزایش می یابد که حاکی از افزایش استحکام کششی حجم نماینده است (شکل ۱۳).

باتوجه به توزیع تصادفی نانولوله های کربنی در ماتریس، نانوکامپوزیت را می توان همسانگرد فرض کرد و مقادیر مدول الاستیک و مدول برشی را از نتایج به دست آمده استخراج کرد، نتایج در شکل (۱۴) نشان داده شده است می توان مشاهده کرد مقادیر مدول الاستیک و مدول برشی با افزایش درصد حجمی نانولوله های کربنی افزایش می یابد.

در تحقیقات گسترده ای با روش های مختلف تجربی و عددی و از منظرهای گوناگون اثر نانولوله های کربنی بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت های پلیمری با درصد های وزنی مختلف مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است.

جدول ۲ تاثیر نانولوله های کربنی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت پایه اپوکسی

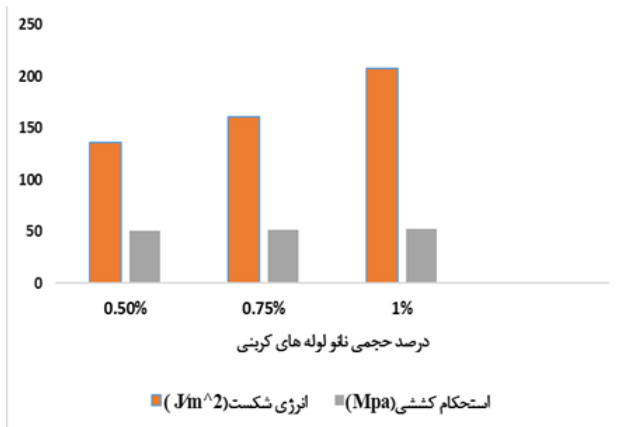
درصد حجمی نانولوله	نتایج تجربی کوان و همکاران [۳۲]	نتایج تجربی کوان و همکاران [۳۲]	نتایج پژوهش حاضر	تفاوت با نتایج تجربی
۰/۵	۳/۴۲	۲/۸۴۲	۲/۸۱۲	۱۷/۷۷
۰/۷۵	-	۲/۸۶۲	۲/۸۳۵	-
۱	۳/۳۷	۲/۸۸۴	۲/۸۵۸	۱۵/۱۹



شکل ۱۳ تنش فون میسز در ۱درصد حجمی نانولوله ها و حجم نماینده



- با افزودن نانولوله‌های کربنی در درصدهای حجمی ۰/۵ درصد، ۰/۷۵ درصد و ۱ درصد مقادیر استحکام کششی به ترتیب ۵۰/۵۴، ۵۱/۳۶ و ۵۲/۲۴ مگاپاسکال است که نشان‌دهنده افزایش استحکام کششی با افزایش درصد حجمی نانولوله‌های کربنی است.

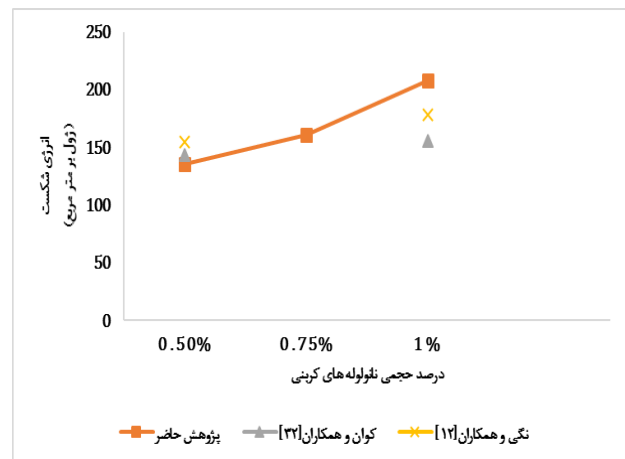


شکل ۱۶ مقادیر استحکام و انرژی شکست در درصد‌های حجمی مختلف نانولوله‌ها

#### ۵- مراجع

- [1] S. Fu, Z. Sun, P. Huang, Y. Li, and N. Hu, "Some basic aspects of polymer nanocomposites: A critical review," *Nano Materials Science*, vol. 1, no. 1, pp. 2-30, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanoms.2019.02.006>.
- [2] Z. U. Haq Khan *et al.*, "Brief review: Applications of nanocomposite in electrochemical sensor and drugs delivery," *Frontiers in Chemistry*, vol. 11, p. 1152217, 2023. DOI: 10.3389/fchem.2023.1152217.
- [3] D. Venkatesan, J. Aravind Kumar, and R. Mohana Prakash, "Synthesis, Properties, and Applications of Polymer Nanocomposite Matrices," *Handbook of Polymer and Ceramic Nanotechnology*, pp. 465-485, 2021. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-10614-0\\_65-1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-10614-0_65-1).
- [4] M. S. Darwish, M. H. Mostafa, and L. M. Al-Harbi, "Polymeric nanocomposites for environmental and industrial applications," *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 23, no. 3, p. 1023, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms23031023>.
- [5] M. A. Maghsoudlou, R. B. Isfahani, S. Saber-Samandari, and M. Sadighi, "Effect of interphase, curvature and agglomeration of SWCNTs on mechanical properties of polymer-based nanocomposites: Experimental and numerical investigations," *Composites Part B: Engineering*,

با توجه به درصدهای حجمی موردنظر در این پژوهش به‌منظور صحت‌سنجی نتایج عددی به‌دست‌آمده از روش اجزای محدود نتایج به‌دست‌آمده برای مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری در درصد‌های وزنی مختلف با نتایج تجربی مقاله کوان [۳۲] و نیز مدل هالپین-تسای [۳۲] مقایسه شده است که نشان‌دهنده هم‌خوانی قابل‌قبول میان نتایج است (جدول ۲). در ادامه (شکل ۱۵) نتایج بدست آمده برای انرژی شکست در این پژوهش با نتایج تجربی مراجع [۳۲] و [۱۲] مورد مقایسه قرار گرفته است.



شکل ۱۵ اثر نانولوله‌های کربنی بر انرژی شکست

#### ۴- بحث و نتیجه‌گیری

نانولوله‌های کربنی با توزیع تصادفی و همچنین با مقادیر بالای سختی و استحکام به نسبت ماتریس پلیمری و همچنین استحکام ناشی از چسبندگی به هنگام اعمال بار خارجی، سختی و استحکام ماتریس را افزایش می‌دهند و منجر به بهبود خواص مکانیکی و شکست ماتریس می‌شوند، همچنین مقادیر استحکام کششی و انرژی شکست برای درصد‌های وزنی مختلف (شکل ۱۶) با استفاده از روش الیاف ناپیوسته با کدنویسی پایتون در نرم افزار اجزای محدود آباکوس با توجه به نتایج به‌دست‌آمده می‌توان بیان کرد:

- مدل الیاف ناپیوسته با درصدهای خطای زیر ۲۰ درصد نسبت به نتایج تجربی دقت قابل‌قبولی برای تخمین مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری دارد.
- با استفاده از مدل الیاف ناپیوسته با در نظر گرفتن قطر، طول و فاصله مرکز نانولوله از ترک و جهت‌گیری آن‌ها انرژی شکست برای درصدهای حجمی ۰/۵، ۰/۷۵ و ۱ درصد به ترتیب ۱۳۶، ۱۶۱ و ۲۰۸ ژول بر مترمربع است که بیشترین مقدار مربوط به نمونه ۱ درصد است.

- [14] G. T. Truong and K.-K. Choi, "Effect of short multi-walled carbon nanotubes on the mode I fracture toughness of woven carbon fiber reinforced polymer composites," *Construction and Building Materials*, vol. 259, p. 119696, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.119696>.
- [15] M. Ahmadi, R. Ansari, and H. Rouhi, "Studying buckling of composite rods made of hybrid carbon fiber/carbon nanotube reinforced polyimide using multiscale FEM," *Scientia Iranica*, vol. 0, no. 0, pp. 0-0, 2018. DOI: 10.24200/sci.2018.5722.1444.
- [16] I. Charitos, A. Drougkas, and E. Kontou, "Prediction of the elastic modulus of LLDPE/CNT nanocomposites by analytical modeling and finite element analysis," *Materials Today Communications*, vol. 24, p. 101070, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101070>.
- [17] H. Shin, "Multiscale model to predict fracture toughness of CNT/epoxy nanocomposites," *Composite Structures*, vol. 272, p. 114236, 2021. DOI:10.1016/j.mtcomm.2020.101070.
- [18] N. Shirodkar, S. Cheng, and G. D. Seidel, "Enhancement of Mode I fracture toughness properties of epoxy reinforced with graphene nanoplatelets and carbon nanotubes," *Composites Part B: Engineering*, vol. 224, p. 109177, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2021.109177>.
- [19] T. Xu, Z. Qi, Y. Tan, J. Tian, and X. Li, "Effect of multiwalled carbon nanotube diameter on mechanical behavior and fracture toughness of epoxy nanocomposites," *Materials Research Express*, vol. 8, no. 1, p. 015014, 2021. DOI: 10.1088/2053-1591/abd864.
- [20] K. Bhowmik *et al.*, "Influence of multiwalled carbon nanotube on progressive damage of epoxy/carbon fiber reinforced structural composite," *Polymer Composites*, vol. 43, no. 11, pp. 7751-7772, 2022. DOI: 10.1002/pc.26877.
- [21] S. Tamayo-Vegas, A. Muhsan, C. Liu, M. Tarfaoui, and K. Lafdi, "The effect of agglomeration on the electrical and mechanical properties of polymer matrix nanocomposites reinforced with carbon nanotubes," *Polymers*, vol. 14, no. 9, p. 1842, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym14091842>.
- [22] Z. Song, Y. Li, A. Carpinteri, S. Wang, and B. Yang, "Interphase elastic properties of carbon nanotube-epoxy composites and their application in multiscale analysis," *Materials & Design*, vol. 221, p. 110996, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2022.110996>.
- vol. 175, p. 107119, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107119>.
- [6]p. Mohsenzadeh mobarakeh, H. Golestanian, and Y. tadi beni, "Investigating the effects of length, diameter and chirality on the mechanical properties of defective carbon nanotubes," *Iranian Journal of Mechanical Engineering Transactions of ISME*, vol. 21, no. 1, pp. 188-217, 2019. DOI: 10.30506/IJMEP.2021.526938.1774.
- [7] M. Dastmard, R. Ansari, and S. Rouhi, "Prediction of axial Young's modulus of epoxy matrix reinforced by group-IV nanotube: A finite element investigation," *Mechanics of Materials*, vol. 157, p. 103819, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2021.103819>.
- [8] R. Yazdanparast and R. Rafiee, "Investigating the influence of pull-out speed on the interfacial properties and the pull-out behavior of CNT/polymer nanocomposites," *Composite Structures*, vol. 316, p. 117049, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2023.117049>.
- [9] M. J. S. Zuberi and V. Esat, "Investigating the mechanical properties of single walled carbon nanotube reinforced epoxy composite through finite element modelling," *Composites Part B: Engineering*, vol. 71, pp. 1-9, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2014.11.020>.
- [10] A. Alian, S. Kundalwal, and S. Meguid, "Multiscale modeling of carbon nanotube epoxy composites," *Polymer*, vol. 70, pp. 149-160, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2015.06.014>.
- [11] G. Arora and H. Pathak, "Modeling of transversely isotropic properties of CNT-polymer composites using meso-scale FEM approach," *Composites Part B: Engineering*, vol. 166, pp. 588-597, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.02.061>.
- [12] A. Negi, G. Bhardwaj, J. Saini, and N. Grover, "Crack growth analysis of carbon nanotube reinforced polymer nanocomposite using extended finite element method," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, vol. 233, no. 5, pp. 1750-1770, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1177/0954406218776034>.
- [13] A. Esmaili *et al.*, "An experimental and numerical investigation of highly strong and tough epoxy based nanocomposite by addition of MWCNTs: Tensile and mode I fracture tests," *Composite Structures*, vol. 252, p. 112692, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112692>.

- [29] ""Abaqus Analysis User's Manual,Version 2016", 2016 ed, 2016.
- [30] H. Van Quy and S. T. T. Nguyen, "Experimental analysis of coir fiber sheet reinforced epoxy resin composite," in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2019, vol. 642, no. 1, p. 012007: IOP Publishing.
- [31] S. Abdalla, F. Al-Marzouki, A. A. Al-Ghamdi, and A. Abdel-Daiem, "Different technical applications of carbon nanotubes," *Nanoscale research letters*, vol. 10, pp. 1-10, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1186/s11671-015-1056-3>.
- [32] D. Quan, J. L. Urdániz, and A. Ivanković, "Enhancing mode-I and mode-II fracture toughness of epoxy and carbon fibre reinforced epoxy composites using multi-walled carbon nanotubes," *Materials & Design*, vol. 143, pp. 81-92, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.01.051>.
- [23] M. C. Maurya, S. Jawaid, and A. Chakrabarti, "Flexural Behaviour of Nanocomposite Plate with CNT Distribution and Agglomeration Effect," *Mechanics Of Advanced Composite Structures*, vol. 10, no. 1, pp. 123-136, 2023. DOI: 10.22075/MACS.2022.28078.1426.
- [24] R. H. Alasfar, S. Ahzi, N. Barth, V. Kochkodan, M. Khraisheh, and M. Koç, "A review on the modeling of the elastic modulus and yield stress of polymers and polymer nanocomposites: effect of temperature, loading rate and porosity," *Polymers*, vol. 14, no. 3, p. 360, 2022. DOI: 10.3390/polym14030360.
- [25] P. Curtis, M. Bader, and J. Bailey, "The stiffness and strength of a polyamide thermoplastic reinforced with glass and carbon fibres," *Journal of Materials Science*, vol. 13, pp. 377-390, 1978. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2020.101070.
- [26] M. Maalej, V. C. Li, and T. Hashida, "Effect of fiber rupture on tensile properties of short fiber composites," *Journal of engineering mechanics*, vol. 121, no. 8, pp. 903-913, 1995. DOI: [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(1995\)121:8\(903\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(1995)121:8(903)).
- [27] S. Kareem, L. S. Al-Ansari, and L. A. Gömze, "Modeling of Modulus of elasticity of Nano-Composite Materials: Review and Evaluation," in *Journal of Physics: Conference Series*, 2022, vol. 2315, no. 1, p. 012038: IOP Publishing.
- [28] ""Python 2.7.3. Python Software Foundation", ed, 2012.