نشریه مهندسی مکانیک
انجمن مهندسان مکانیک ایران
مقاله علمی پژوهشی

DOI: 10.30506/IJMEP.2021.526938.1774
DOR: 20.1001.1.25384775.1401.24.1.3.9

مدل سازی چند مقیاسی نانوکامپوزیت هیبریدی، با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی، میکرومکانیک و المان محدود

علی خدادادی[۱]
دکتری

حسین گلستانیان[۲]
استاد

فرشید آقاداوودی[۳]
استادیار

در این پژوهش، مدل سازی چند مقیاسی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت هیبریدی، با زمینه اپوکسی و تقویت کننده های نانولوله کربنی تک جداره و نانوذره کربن (الماس)، ارایه شده است. در این مدل سازی، در مقیاس نانو، از روش دینامیک مولکولی و در مقیاس میکرو و ماکرو، با در نظر گرفتن تاثیر فاز میانی، از روابط تحلیلی میکرومکانیک و شبیه سازی المان محدود، به صورت جداگانه، استفاده شده است. انطباق خوبی بین نتایج این دو روش مشاهده شد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که استفاده همزمان از نانوتقویت کننده های کربنی نانولوله و نانوذره، نانوکامپوزیت هیبرید، خواص مطلوب تری را به دنبال دارد.

واژه‌های راهنما: مدل سازی چند مقیاسی، نانوکامپوزیت، دینامیک مولکولی، میکرومکانیک، المان محدود

۱- مقدمه

طی سالیان گذشته، راه‌حل‌ها و تکنیک‌های مختلفی برای بهبود نواقص موجود در کامپوزیت‌ها ارائه گردیده است و برخی از آنها مفید واقع شده‌اند. اما کلید حل بیشتر این مشکلات، در دست جدیدترین یافته بشر، نانوفناوری قرار دارد. در واقع دو اثر مهم مقیاس نانو، که همان افزایش نسبت سطح ذره به حجم آن و ورود ذره به قلمرو اثرات کوانتومی است، باعث تغییر بسیاری از خواص فیزیکی و شیمیایی نانوتقویت کننده می شوند. استفاده از نانوتقویت‌کننده‌ها در نانوکامپوزیت‌های پایه پلیمری، تا حدود زیادی، ضعف‌های موجود در کامپوزیت‌ها را برطرف می‌کند. از جمله اینکه به دلیل چگالی پایین خود، موجب سبکتر شدن کامپوزیت‌ها می‌شوند و به علت اندازه بسیار کوچک خود، از ایجاد حفره‌های بزرگ و تمرکز تنش در کامپوزیت جلوگیری می‌کنند. بعلاوه، نانوتقویت‌کننده‌ها، به علت سطح زیاد خود، چسبندگی بهتری با زمینه پلیمری برقرار کرده و در نتیجه نقش تقویت‌کنندگی را به شکل مؤثرتری انجام می‌دهند. این تقویت‌کننده‌ها، با استحکام بالای

[۱] دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران alikhodadadi1387@gmail.com
[۲] نویسنده مسئول، استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران golestanian@eng.sku.ac.ir
[۳] استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد خمینی شهر، اصفهان، ایران farshid_ad@yahoo.com
تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۲/۲۷، تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۲/۱۹

خود، نه تنها باعث افزایش کارایی ساختار شده، بلکه به دلیل استفاده کمتر، هزینه مواد مصرفی را نیز کاهش می‌دهند [۱-۳]. اخیرا پژوهش‌هایی معدودی نیز بروی نانوکامپوزیت‌های چندفازی (هیبرید) تقویت شده با دو نوع نانوتقویت‌کننده، انجام گرفته است، که همچون کامپوزیت‌های چند فازی، نشان از بهبود چشمگیر خواص نانوکامپوزیت دارد. به گونه‌ای که نانوتقویت کننده دوم نقش مکملی را در جهت بهبود خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی نانوکامپوزیت ایجاد می‌کند. به عنوان نمونه، نویدفر و همکاران [۴]، مطالعه‌ای در زمینه‌ی تعیین خواص نانوکامپوزیت هیبریدی پلی‌اورتان، با نانوتقویت‌کننده‌های نانولوله کربنی دو لایه و نانوذره سیلیکا، به صورت تجربی انجام داده‌اند. بر طبق آزمایشات انجام گرفته، افزودن ۰/۲۵ درصد وزنی نانوذره یا نانولوله، باعث افزایش استحکام و مدول الاستیسیته می‌گردد. برای استفاده بیشتر از نانولوله‌کربنی و جلوگیری از پدیده تجمع نانولوله‌ها، می‌توان با افزودن ۰/۲۵ درصد وزنی نانوذره، به نانوکامپوزیت حاوی ۰/۲۵ درصد وزنی نانولوله، میزان درصد وزنی نانولوله را به اندازه ۰/۵ درصد وزنی افزایش داد و به خواص بهتری در نانوکامپوزیت هیبریدی دست یافت. همچنین، آیت اللهی و همکاران [۵]، خواص نانوکامپوزیت هیبریدی اپوکسی، با نانوتقویت‌کننده‌های نانولوله کربنی دولایه و نانو خاک رس را به صورت تجربی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج این محققین حاکی از افزایش چشمگیر ضریب انتقال حرارت، مدول یانگ و همچنین استحکام در نانوکامپوزیت هیبریدی بود.

روش‌های آزمایشگاهی، علاوه بر هزینه‌های بسیار بالا، محدودیت‌هایی نیز به دنبال دارند. به این دلیل، پژوهشگران به دنبال ارایه روابط و روش‌های هر چه دقیق‌تر، برای مدل‌سازی و محاسبه خواص نانوکامپوزیت‌ها، پیش از ساخت هستند. این مدل‌سازی‌ها شامل روابط تحلیلی و عددی برای پیش بینی خواص نانوکامپوزیت‌ها است. به طور معمول، در مدل‌سازی نانو مواد، محقق می‌بایست بین در نظر گرفتن جزییات موثر بر خواص مکانیکی و توانایی برای مدل‌سازی در ابعاد بزرگتر، یکی را انتخاب کند. در شبیه-سازی به روش دینامیک مولکولی، جزییات برهمکنش بین نانوتقویت‌کننده و ماتریس پلیمری به طور دقیق قابل ارزیابی است. با این حال با توجه به هزینه بالای مدل‌سازی عددی این روش، شبیه‌سازی در ابعاد نانو و محدوده زمانی پیکو ثانیه محدود شده است. به عنوان نمونه، خدادادی و همکاران [۶] به بررسی نانوکامپوزیت هیبریدی، با پایه اپوکسی و سه نوع نانوتقویت کننده، به روش دینامیک مولکولی، پرداختند. در این پژوهش، اثر استفاده از نانو تقویت کننده عامل دار و همچنین اثر استفاده هیبریدی از نانو تقویت کننده-ها بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان از بهبود خواص نانوکامپوزیت هیبریدی نسبت به نانوکامپوزیت دو فازی داشت. شارما و همکاران [۷] نیز با روش دینامیک مولکولی، به بررسی خواص مکانیکی و حرارتی دو نانو کامپوزیت با ماتریس فلزی مس و تقویت کننده‌های نانولوله و گرافن پرداختند تا تاثیر هندسه تقویت کننده را روی این خواص بررسی کنند. آنها در این پژوهش، به بررسی تاثیر دما بر مدول یانگ و همچنین، تاثیر کسر حجمی تقویت کننده روی مدول یانگ و ضریب انتقال حرارت، پرداختند. نتایج حاکی از آن بود که مدول یانگ و ضریب انتقال حرارت، با افزایش کسر حجمی، افزایش می‌یابند. این افزایش، در نانوکامپوزیت با تقویت کننده گرافن، بزرگتر از نانوکامپوزیت با تقویت کننده نانولوله کربنی گزارش شده است.

روش‌های میکرومکانیکی و المان محدود نیز از بخش عمده‌ای از جزییات برهمکنش بین نانوتقویت‌کننده با ماتریس پلیمری و توزیع دقیق نانوتقویت کننده صرفنظر می‌کنند. به عنوان نمونه می‌توان به پژوهش علاسوند و گلستانیان در این زمینه اشاره نمود [۸].

بر این اساس، می‌توان نتیجه گرفت که روش چند مقیاسی، بهترین روش برای مدل‌سازی و تعیین خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری می‌باشد. به همین دلیل، اخیرا پژوهشگران زیادی در مطالعات خود در حوزه نانوکامپوزیت، به استفاده از این روش برای پیش بینی خواص نانوکامپوزیت روی آورده‌اند که در ادامه به چند مورد آن اشاره کرده‌ایم.

آقاداوودی و گلستانیان و طادی بنی [۹]، اثرات نسبت منظری و انباشتگی نانولوله‌کربنی را بروی خواص الاستیک نانوکامپوزیت پایه پلیمری، به روش چند مقیاسی، مورد بررسی قرار دادند. در این شبیه سازی، در مقیاس نانو، از دینامیک مولکولی و در مقیاس میکرو، از روش‌های تحلیلی، بر پایه مفهوم فیبر موثر، استفاده شده است. روابط میکرومکانیک بکار رفته در این مدلسازی، شامل مدل کاکس، هالپین تسای و موری تاناکا می‌باشد. بر طبق نتایج بدست آمده، افزایش قطر و انباشتگی نانولوله‌های کربنی، باعث کاهش مدول یانگ طولی نانوکامپوزیت می‌گردد. اثباتی و ایرانی [۱۰]، شکست در نانو کامپوزیت پلیمری تقویت شده با نانو لوله‌های کربنی سالم و عامل‌دار شده را با استفاده از روش چند مقیاسی، مدل‌سازی کردند. این مدل‌سازی در دو فاز نانو و میکرو انجام شده است. در فاز نانو، از روش شبیه سازی اجزا محدود و در مقیاس میکرو، از دو روش اجزا محدود و روش تحلیلی میکرومکانیک موری تاناکا استفاده شده است. اثر نقص‌های ساختاری حفره و پیوندهای کووالانسی ناشی از فرآیند عامل‌دار کردن نانولوله‌ها در فاز نانو و اثرات کسر حجمی، شکل و انحنای نانولوله‌ها در فاز میکرو، مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاکی از آن است که عامل‌دار کردن نانولوله‌های کربنی، باعث بهبود استحکام نانوکامپوزیت پلیمری شده و شکنندگی آنها را کاهش می‌دهد. از سوی دیگر، نقص‌های ساختاری ایجاد شده در پروسه عامل‌دار کردن نانولوله‌های کربنی، باعث کاهش مدول الاستیسیته نانوکامپوزیت می‌گردد. همچنین، چنانچه انحنای نانولوله‌های کربنی افزایش یابد، اثر بهبود دهنده عامل‌دار کردن نانولوله، کاهش چشمگیری می‌یابد و به خواص نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله-های سالم، نزدیک می‌شود. آلیان و همکاران [۱۱]، اثر تموج و جهت‌گیری نانولوله‌های کربنی را بر مدول بالک نانوکامپوزیت اپوکسی، به روش چند مقیاسی، مورد مطالعه قرار دادند. در این مطالعه، برای بدست آوردن خواص المان حجمی نمونه شامل اپوکسی/ یک نانولوله و اپوکسی/ چند نانولوله، از روش دینامیک مولکولی استفاده شده است.

در این تحقیق برای بررسی اثرات شکل نانولوله‌ها، شکل‌های مختلف نانولوله در بازه مستقیم تا کاملا خمیده مورد بررسی قرار گرفت است و برای بدست آوردن خواص نانوکامپوزیت، از مدل میکرومکانیک استفاده شده است. نتایج بدست آمده مطابقت بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی داشته و نشان می‌دهد که با افزایش تموج و منحنی شکل شدن نانولوله‌ها، خواص الاستیک نانوکامپوزیت، کاهش می‌یابد.

کاندالوال و کومار [۱۲]، یک مدل چند مقیاسی برای تعیین خواص مکانیکی و انتقال تنش در کامپوزیت هیبریدی ارایه کردند. در این پژوهش که کامپوزیت هیبریدی شامل تقویت کننده در مقیاس نانو و میکرو می‌باشد، در ابتدا از شبیه سازی دینامیک مولکولی و روش موری تاناکا جهت تعیین خواص نانولوله کربنی و

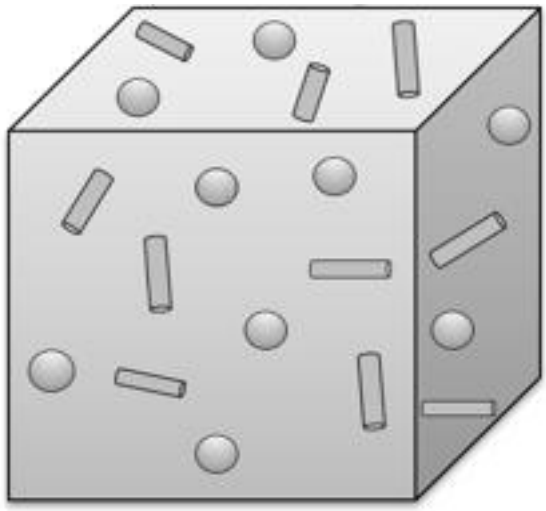
ماتریس استفاده شده و سپس یک مدل میکرومکانیک برای الیاف توسعه داده شده و رفتار انتقال تنش در کامپوزیت، برای جهت گیری‌های مختلف نانولوله‌های کربنی، مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان از آن دارد که جهت گیری نانولوله‌ها در انتقال تنش تاثیر زیادی دارد و نانولوله‌های هم راستا، بیشترین اثر بخشی را دارد.

در این پژوهش، به مدل‌سازی چند مقیاسی نانوکامپوزیت هیبریدی با زمینه اپوکسی پرداخته شده است. در این نانو کامپوزیت از نانولوله کربنی تک جداره و نانوذره کربن (الماس) به عنوان تقویت‌کننده‌ها استفاده شده و رفتار الاستیک نانوکامپوزیت هیبریدی مورد بررسی قرار گرفته است. در این مدلسازی چند مقیاسی، در مقیاس نانو و محدوده زمانی پیکو ثانیه، جهت ارزیابی دقیق جزییات برهمکنش بین نانوتقویت‌کننده‌ها و ماتریس پلیمری، از روش دینامیک مولکولی و در مقیاس بزرگتر، از روابط تحلیلی میکرومکانیک استفاده شده است تا دقیقترین و منطبق‌ترین نتایج برای خواص الاستیک نانوکامپوزیت پیش‌بینی شود. از المان محدود نیز برای بررسی صحت نتایج بدست آمده در مقیاس ماکرو استفاده شده است. ابتدا پلیمر ترموست خالص با ۷۵ درصد پخت، با استفاده از روش دینامیک مولکولی، شبیه سازی و خواص آن تعیین شده است. سپس نانوکامپوزیت با یک نانولوله کربنی تک جداره و نانوکامپوزیت با یک نانوذره کربن (الماس) شبیه سازی شده‌اند و نتایج آن‌ها برای تعیین خواص فیبر موثر، مورد استفاده قرار گرفته است. در ادامه، رابطه میکرومکانیک برای نانوکامپوزیت هیبریدی توسعه داده شده است تا با جایگذاری خواص فیبر موثر و پلیمر ترموست خالص، مدول الاستیک نانوکامپوزیت بدست آید. در پایان، نتایج بدست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، بدون نیاز به تعریف فاز میانی، به عنوان تقویت کننده در شبیه سازی المان محدود جایگذاری شده است، تا نتایج بدست آمده با نتایج چند مقیاسی میکرومکانیک مقایسه گردند.

۲- مدلسازی چند مقیاسی

همانطور که بیان شد، نتایج مطالعاتی که صرفا با ابزار دینامیک مولکولی انجام شده‌اند، بدون استفاده از روش چندمقیاس، قابلیت مقایسه با نتایج عملی را ندارند. از سوی دیگر، مطالعاتی که بر مبنای میکرومکانیک انجام شده‌اند، در نانوکامپوزیت‌ها با شبهه عدم پیوستگی ماده و اثر نانو مواجه هستند. هدف اصلی در مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌ها، ارایه مقادیر دقیق برای خواص فیزیکی و مکانیکی نانوکامپوزیت، در مقیاس‌های عملی میکرو یا ماکرو است. رویکرد چندمقیاسی پلی بین مدل های مقیاس نانو و مدل‌های مقیاس بزرگتر ایجاد می‌کند که در آن، نتایج محاسبات ابعاد زمانی و طولی مقیاس نانو، به استخراج نتایج در مقیاس میلی متر یا بزرگتر منجر می‌شوند.

لذا در این مدل‌سازی، خواص دو نمونه نانولوله و نانوذره در مقیاس نانومتر و پیکو ثانیه، برای نانوتقویت کننده‌ها و ماتریس اطراف آن‌ها، با در نظر گرفتن اثر فاز واسط، محاسبه می شود. سپس ،از خواص محاسبه شده، با استفاده از روش المان حجمی معرف، به عنوان نماینده در روابط میکرومکانیک و المان محدود، به جای خواص نانوتقویت‌کننده، برای استفاده در ابعاد بزرگتر استفاده می گردد، تا خواص دقیق در ابعاد واقعی بدست آید. شکل (۱) مدل نانوکامپوزیت هیبریدی مورد مطالعه در این پژوهش را نمایش می‌دهد که در آن استوانه، نشانگر فیبر موثر نانولوله کربنی و کره نشانگر فیبر موثر نانوذره کربن (الماس) می‌باشند.



شکل ۱- مدلسازی چند مقیاسی نانوکامپوزیت هیبریدی

۲-۱- روش دینامیک مولکولی

روش دینامیک مولکولی، تکنیکی است که به کمک آن می توان حالت تعادل یک سیستم چند ذره‌ای را تعیین کرده و سپس خواص مورد نظر این سیستم را محاسبه نمود. در این پژوهش، از نرم افزار متریالز استدیو[1]استفاده شده است که جعبه شبیه سازی آن شامل نانوتقویت کننده و پلیمر اطراف آن می‌باشد تا اثر فاز واسط نیز در آن در نظر گرفته شود.

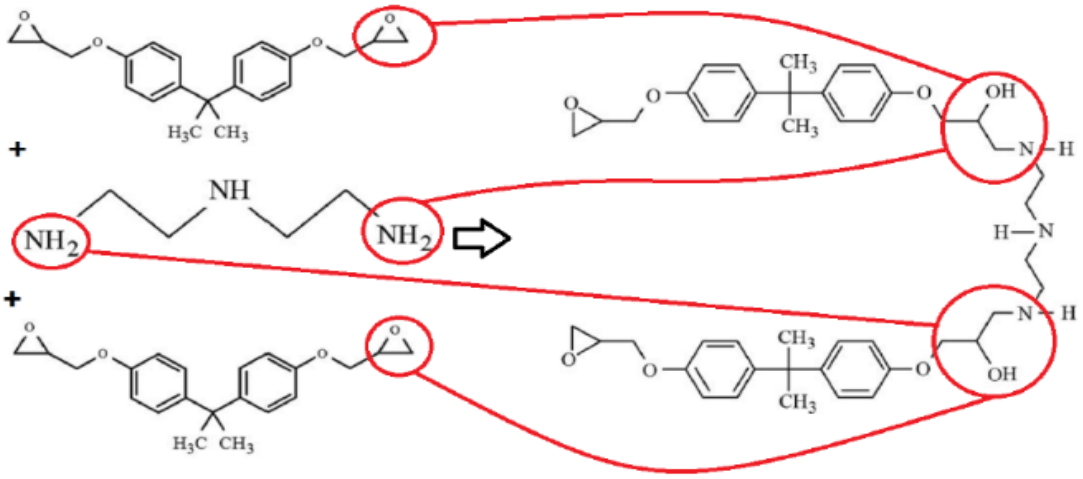
مراحل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به ترتیب به صورت زیر می‌باشند:

۱. اعمال مقادیر اولیه به سیستم
۲. تشکیل جعبه شبیه‌سازی
۳. انتخاب میدان نیرویی مناسب (کامپس)
۴. اعمال شرایط و تنظیمات (هنگرد (مجموعه فرضیات ترمودینامیکی از یک سامانه فیزیکی) هم فشار هم دما، در دمای ۲۹۸ درجه کلوین و فشار ۱ اتمسفر)
۵. محاسبه انرژی سیستم و کمینه کردن آن و تعیین خروجی اطلاعات مورد نظر
۶. شبیه‌سازی
۷. محاسبه خواص متوسط سیستم
۸. اعمال کرنش به جعبه شبیه سازی و مخاسبه نتایج خواص الاستیک

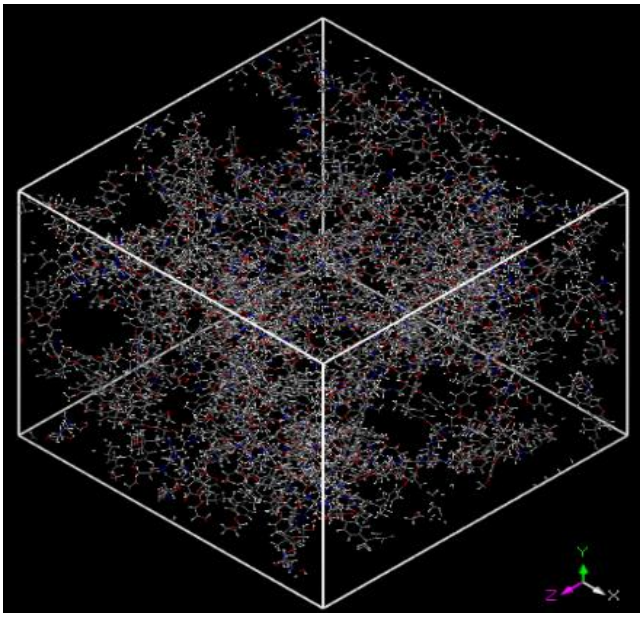
۲-۱-۱- شبیه سازی ماتریس اپوکسی

برای شبیه سازی ماتریس اپوکسی خالص به عنوان ماده زمینه، ابتدا رزین تجاری پایه دی گلیسیدیل اتر بیس فنل A[2] و مولکول دی اتیلن تری آمین[1]به ترتیب با فرمول شیمیایی $C_{21}H_{24}O_4$ و $C_4H_{13}N_3$ در نرم افزار شبیه سازی شد. در ادامه، ماتریس اپوکسی با نسبت ۲ به ۱ و با درصد اتصال عرضی ۷۵ درصد، مطابق

[1] Materials studio
[2] Diglycidyl ether of bisphenol A



شکل ۲- فرآیند اتصال عرضی رزین مورد نظر [۹]



شکل ۳- جعبه شبیه سازی اپوکسی

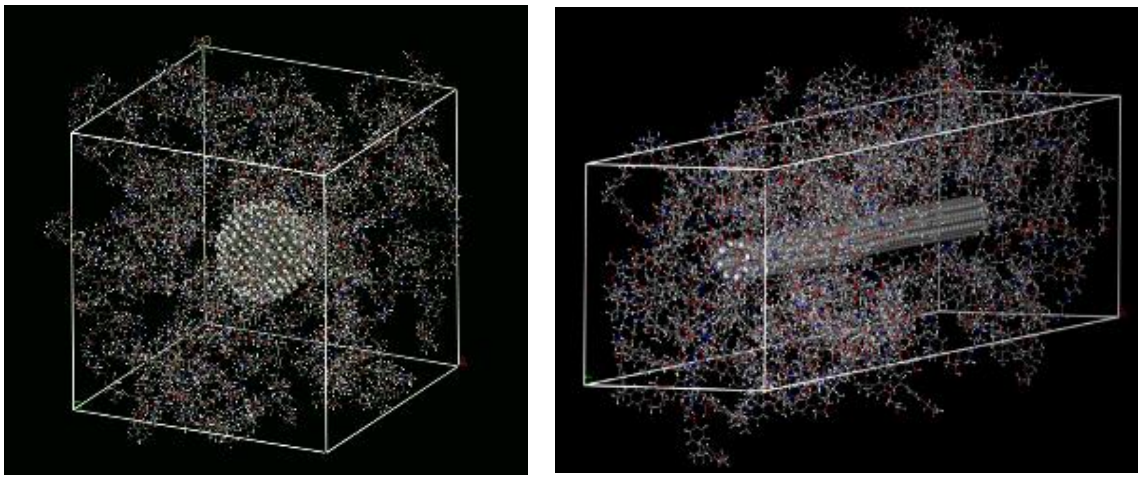
شکل های (۲) و (۳)، شبیه سازی شد. لازم به ذکر است که تعداد ۳۲ عدد، از مولکول ساخته شده، در جعبه شبیه سازی، جهت بدست آوردن خواص مکانیکی رزین قرار داده شد.

۲-۱-۲- شبیه سازی نانوکامپوزیت

همانطور که در روش‌های مدل‌سازی بیان شد، در بخش دینامیک مولکولی، با محدودیت ابعادی مواجه هستیم. لذا در این بخش سعی شده است که یک نانوتقویت کننده با ماتریس زمینه اطرافش مدل‌سازی شود تا اثر فاز میانی، در ادامه با استفاده روش چند مقیاسی، در خواص نانوکامپوزیت با ابعاد واقعی لحاظ گردد. در شکل (۴)، جعبه‌های شبیه سازی اپوکسی/نانولوله و اپوکسی/نانوذره مشاهده می‌شوند.

---

[1] Diethylenetriamine



اپوکسی/ نانولوله کربنی اپوکسی/نانوذره

شکل ۴- جعبه شبیه سازی نانوکامپوزیت

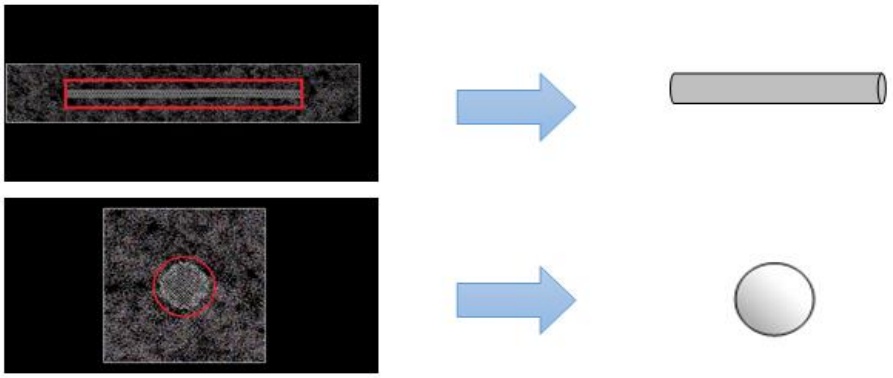
جدول ۱- مشخصات جعبه های شبیه سازی نانوکامپوزیت

نوع نانوتقویت کننده	ابعاد نانوتقویت کننده (Å)	ابعاد جعبه شبیه سازی (Å)	تعداد پلیمر
نانولوله (۴و۴)	قطر: ۵/۴۲ طول: ۱۶۴/۸	۱۸۴×۳۱/۹×۳۱/۹	۷۴
نانوذره کربن (الماس)	قطر: ۲۲	۵۶×۵۶×۵۶	۷۲

مشخصات مربوط به جعبه های شبیه سازی شکل (۴)، در جدول (۱) آورده شده است.

۲-۲- فیبر موثر

رهیافت فیبر موثر، روشی ارایه شده توسط ادگارد است که در مدل سازی چند مقیاسی نانوکامپوزیت‌ها، مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۳]. در این روش، خواص نانوتقویت کننده و ماتریس اطراف آن به عنوان خواص نانوتقویت کننده در روابط میکرومکانیک قرار می‌گیرد تا خواص فاز میانی مابین تقویت کننده و ماتریس زمینه نیز لحاظ گردد. شکل (۵)، فیبر موثرهای نانولوله و نانوذره را نشان می‌دهد.



شکل ۵- فیبر موثر

همانطور که در شکل (۵) مشخص است، فیبر موثر نانولوله به شکل استوانه و فیبر موثر نانوذره به شکل کره است. مهمترین نکته‌ای که در این قسمت می‌بایست به آن توجه نمود، تعیین حجم فیبر موثر می‌باشد. در این پژوهش، برای بدست آوردن حجم فیبر موثر، به گونه‌ای که تمام خواص فاز میانی در روابط پایانی لحاظ گردد، از تابع توزیع شعاعی استفاده شده است. تابع توزیع شعاعی، یک کمیت آماری است که نشانگر توزیع فواصل بین اتمی در ساختار سیستم است. این تابع، برابر با نسبت چگالی اتم‌ها در فاصله موردنظر به چگالی اتم‌ها در کل سیستم است. نمودار این تابع، در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی قابل ترسیم می‌باشد که می-توان از آن برای بدست آوردن مقدار دقیق ضخامت فاز میانی مابین نانوتقویت کننده و ماتریس زمینه استفاده نمود. در ادامه، برای اینکه تمام خواص فاز میانی در فیبر موثر لحاظ گردد، مطابق روابط زیر، جهت مشخص نمودن حجم فیبر موثر، دو برابر ضخامت لایه فاز میانی را به اندازه شعاع نانو تقویت کننده اضافه کرده و حجم فیبر موثر را تعیین می‌کنیم:

$$V_{eff-CNT} = \frac{\pi l_{CNT}(R_{CNT} + 2h_{CNT})^2}{V_{RVE}} \quad (۱)$$

$$V_{eff-CNP} = \frac{4\pi(R_{CNP} + 2h_{CNP})^3}{3V_{RVE}} \quad (۲)$$

که در آن l، R به ترتیب طول و شعاع است. h نیز مقدار ضخامت فاز میانی است. در ادامه، برای تعیین خواص فیبر موثر از المان حجمی نماینده در دینامیک مولکولی، از معکوس رابطه هالپین-تسای استفاده می-شود تا تاثیر شکل نانو تقویت کننده نیز در نظر گرفته شود. این روابط به شرح زیر می‌باشد:

$$E_{L-eff-r} = E_m\left(\frac{\xi_r V_{eff-r} E_m + E_{L-RVE} V_{eff-r} + \xi_r E_{L-RVE} - \xi_r E_m}{\xi_r V_{eff-r} E_m + E_{L-RVE} V_{eff-r} - E_{L-RVE} + E_m}\right) \quad (۳)$$

$$E_{T-eff-r} = E_m\left(\frac{2V_{eff-r} E_m + E_{T-RVE} V_{eff-r} + 2E_{T-RVE} - 2E_m}{2V_{eff-r} E_m + E_{T-RVE} V_{eff-r} - E_{T-RVE} + E_m}\right) \quad (۴)$$

در این روابط E و V به ترتیب مدول الاستیک و حجم است. همچنین L، T، RVE، eff، m و r به ترتیب طولی، عرضی، المان حجمی نماینده، فیبر موثر، ماتریس و نانوتقویت کننده را مشخص می‌کنند. E_{T-}، E_{L-RVE} و E_m $_{RVE}$، نتایج بدست آمده از بخش دینامیک مولکولی هستند. ξ نیز ضریب شکل نانوتقویت کننده می-باشد که برای نانولوله ۲ برابر نسبت طول به قطر نانولوله و برای نانوذره برابر با ۲ است.

۲-۳- مدلسازی چند مقیاسی (میکرومکانیک – دینامیک کولکولی)

سهولت به کارگیری روابط میکرومکانیک، که عمدتاً به صورت تحلیلی هستند، باعث شده است که به رغم کمبود دقت، همچنان مورد توجه پژوهشگران باشند. به ویژه آنکه در زمینه مطالعات چندمقیاسی، این روابط به عنوان ابزارهای اصلی در مقیاس میکرو و ماکرو محسوب می شوند و می‌توان دقت آن‌ها را افزایش داد.

برای بدست آوردن دقیق مدول الاستیک نانوکامپوزیت، از روابط هالپین-تسای تعمیم داده شده و اصلاح گردیده برای نانوکامپوزیت هیبریدی استفاده می‌شود. در این روابط، به جای خواص نانوفیلر، خواص فیبر موثر جایگزین می‌گردد. رابطه نهایی برای استفاده در این پژوهش به شرح زیر می‌باشد:

$$\frac{E_L}{E_m}=\frac{1+(\xi_{CNT}\eta_{L-CNT}\alpha_{CNT}V_{CNT}+\xi_{CNP}\eta_{L-CNP}\alpha_{CNP}V_{CNP})}{1-(\eta_{L-CNT}\alpha_{CNT}V_{CNT}+\eta_{L-CNP}\alpha_{CNP}V_{CNP})} \quad (۵)$$

$$\frac{E_T}{E_m}=\frac{1+2(\eta_{T-CNT}\alpha_{CNT}V_{CNT}+\eta_{T-CNP}\alpha_{CNP}V_{CNP})}{1-(\eta_{T-CNT}\alpha_{CNT}V_{CNT}+\eta_{T-CNP}\alpha_{CNP}V_{CNP})} \quad (۶)$$

که در آن

$$\eta_{L-r}=\frac{(E_{L-eff-r}/E_m)-1}{(E_{L-eff-r}/E_m)+\xi_r} \quad (۷)$$

$$\eta_{T-r}=\frac{(E_{T-eff-r}/E_m)-1}{(E_{T-eff-r}/E_m)+2} \quad (۸)$$

$$\alpha_{CNT}V_{CNT}+\alpha_{CNP}V_{CNP}+V_m=1 \quad (۹)$$

$$\alpha_r=\frac{V_{eff-r}}{V_r} \quad (۱۰)$$

که α پارامتر تاثیر حجم فیبر موثر در رابطه هالپین-تسای اصلاح شده می‌باشد.

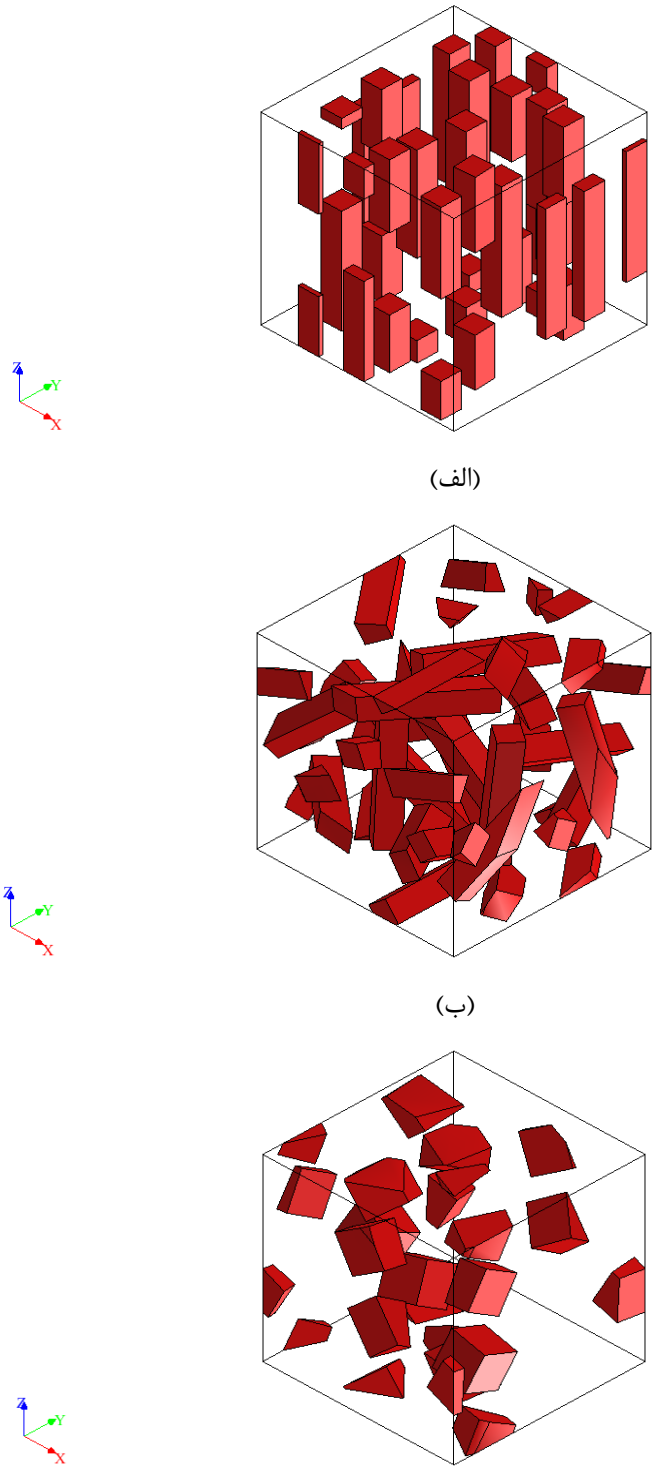
۲-۴- مدلسازی چند مقیاسی (المان محدود – دینامیک کولکولی)

جهت صحت سنجی نتایج در مقیاس بزرگ، از مدل‌سازی چند مقیاسی دینامیک مولکولی و المان محدود استفاده شده است. روش المان محدود، به عنوان روشی جایگزین برای حل معادلات دیفرانسیل در مسایل پیوسته تعریف شده است.

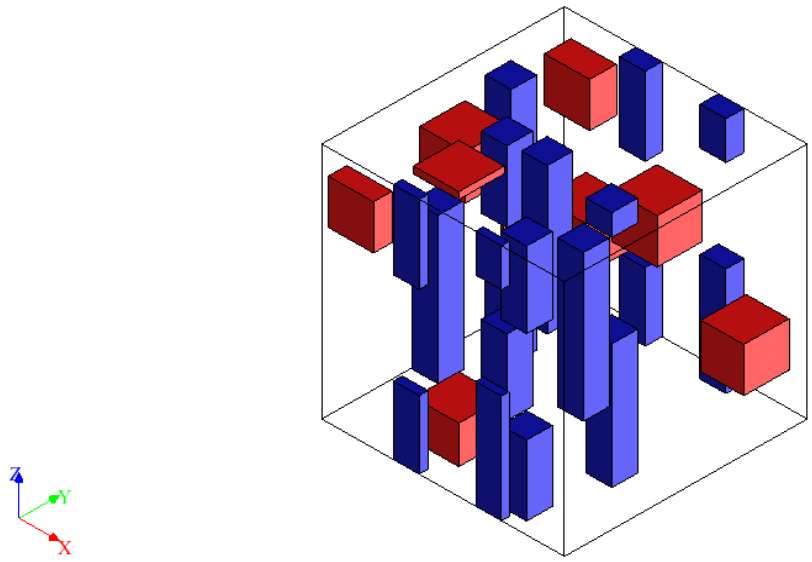
در بخش قبل (بخش ۲-۳)، با توجه به حساس بودن رابطه هالپین-تسای به شکل تقویت کننده، نیاز بود تا برای استفاده از خواص بدست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، از روش فیبر موثر (به شکل استوانه برای نانولوله و کره برای نانوذره) استفاده نمود. اما در این بخش، بدون نیاز به تعریف فیبر موثر، می‌توان به طور مستقیم، کل جعبه شبیه سازی شده در دینامیک مولکولی را به عنوان تقویت کننده به شکل مکعب مستطیل برای نانولوله و مکعب برای نانوذره استفاده نمود. در این صورت، خواص تقویت کننده و فاز میانی، در شبیه سازی المان محدود لحاظ می‌گردد و دیگر نیازی به تعریف فاز میانی نمی‌باشد. لازم به ذکر است که در این بخش، پس از ساختن جعبه شبیه سازی، از مش بندی گاما[1] که دارای کیفیت بالایی می‌باشد،

[1] Gamma

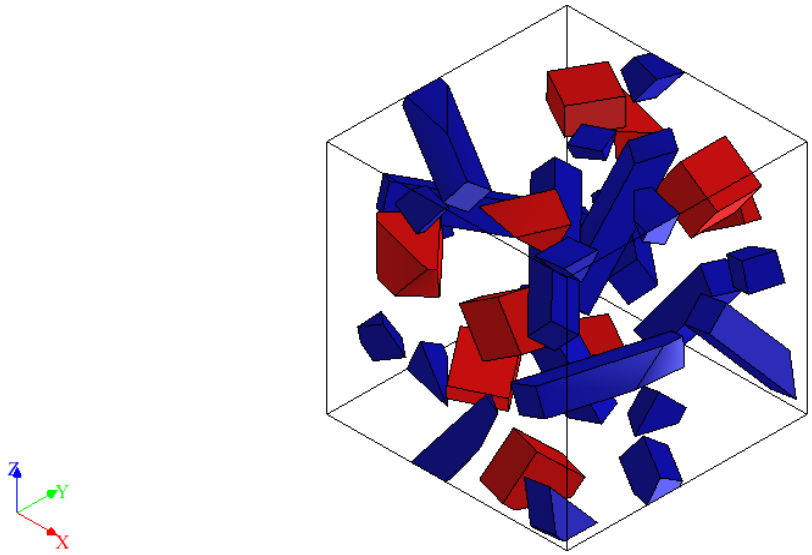
استفاده شده است. توضیحات بیشتر در خصوص روش شبیه سازی کامپوزیت‌ها با استفاده از روش المان محدود در مرجع [۱۴] ارئه شده است.



شکل ۶- جعبه‌های شبیه سازی نانوکامپوزیت‌های دو فازی
(الف) نانوکامپوزیت با نانولوله‌های کربنی هم راستا، (ب) نانوکامپوزیت با نانولوله‌های کربنی با جهت گیری تصادفی و (ج) نانوکامپوزیت با نانوذرات.



(الف)

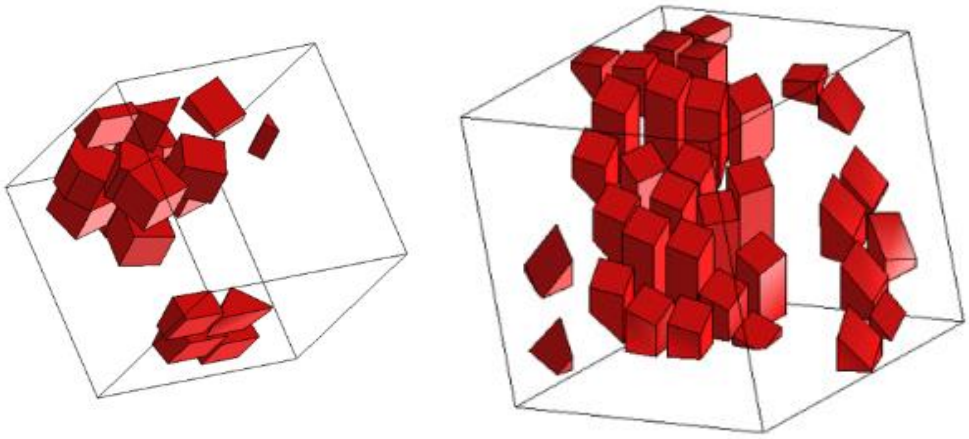


(ب)

شکل ۷– جعبه‌های شبیه سازی نانوکامپوزیت‌های هیبریدی
(الف) نانوکامپوزیت هیبریدی با نانوفیلرهای هم راستا و
(ب) نانوکامپوزیت با توزیع تصادفی نانوفیلرها

شکل (۶)، انواع جعبه‌های شبیه سازی شده برای نانوکامپوزیت دو فازی و شکل (۷) جعبه‌های شبیه سازی شده برای نانوکامپوزیت هیبریدی را نمایش می‌دهند.

در ادامه نیز برای بررسی تاثیر پدیده انباشتگی نانوتقویت کننده‌ها روی خواص الاستیک، به شبیه سازی نانوکامپوزیت حاوی نانوتقویت کننده به شکل زیر پرداخته شده است. در این بخش، تجمع کامل نانوتقویت کننده‌ها در کنار یکدیگر، در آرایش نامنظم، شبیه سازی شده است. شکل (۸) انباشتگی نانولوله‌ها و نانوذرات در جعبه شبیه سازی را به صورت جداگانه نشان می‌دهد.



(ب) (الف)

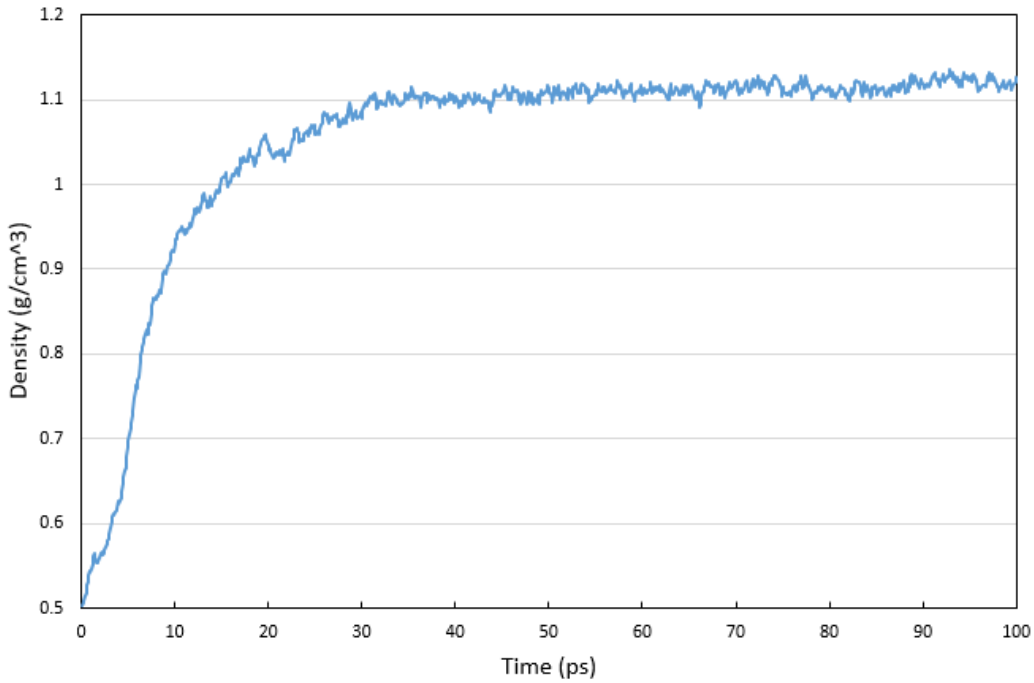
شکل ۸– پدیده انباشتگی نانو تقویت کننده‌ها در جعبه شبیه سازی
(الف) نانولوله‌های انباشته شده و (ب) نانوذرات انباشته شده

۳- نتایج

نتایج این پژوهش به دو بخش نتایج مربوط به شبیه سازی دینامیک مولکولی و نتایج مربوط به روش چند مقیاسی تقسیم می‌شوند که در ادامه به شکل مجزا ارائه می گردند.

۳-۱- نتایج دینامیک مولکولی

ابتدا، نمودار چگالی بدست آمده برای ماتریس با اتصال عرضی ۷۵ درصد را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

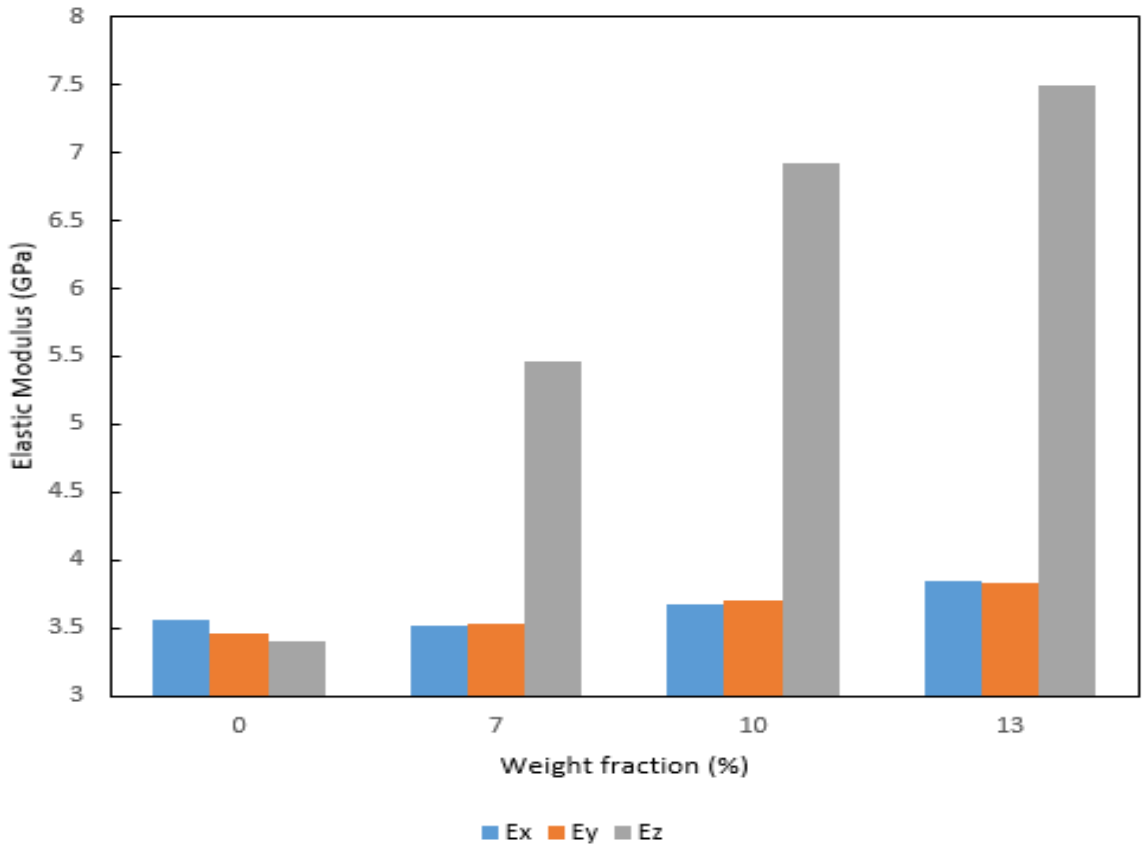


شکل ۹– تغییرات چگالی ماتریس اپوکسی در طول زمان شبیه سازی

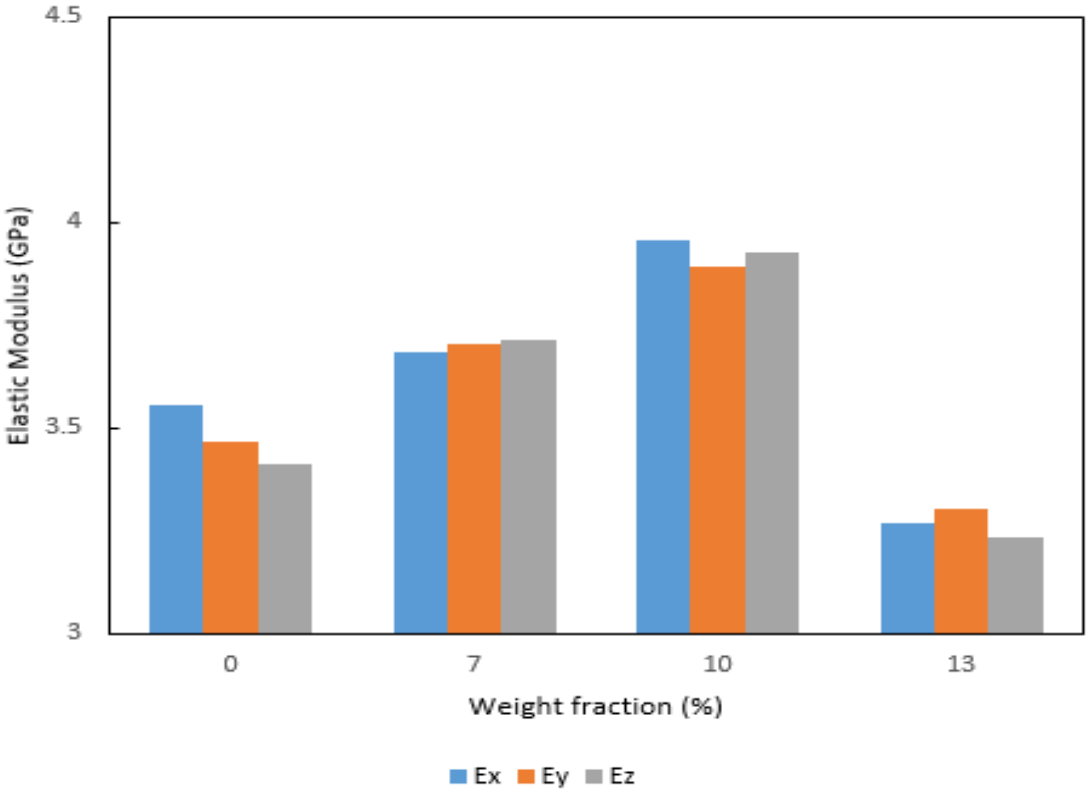
چگالی، یکی از خواص فیزیکی است که در مدل سازی اتمی مورد توجه قرار می‌گیرد. در حقیقت، مقدار چگالی، درست یا نادرست بودن فاصله بین اتم‌ها، در فواصل تعادل را نشان می‌دهد. اگر مسیر شبیه سازی اتمی و زمان شبیه سازی درست باشد، انتظار می‌رود که چگالی سیستم اتمی نزدیک به چگالی واقعی سیستم در مقیاس بزرگ باشد. بنابرین، همگرایی خواص سیستم از جمله چگالی، بیانگر دقت در شبیه سازی اتمی است. شکل (۹)، تغییرات چگالی ماتریس زمینه نسبت به زمان شبیه سازی را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل مشخص است، چگالی ماتریس زمینه پس از حدود ۳۰ پیکو ثانیه همگرا شده و به مقدار واقعی چگالی، ۱/۱ گرم بر سانتیمتر مکعب، رسیده است. در نتیجه، در شبیه سازی‌های این پژوهش، زمان شبیه سازی ۱۰۰ پیکو ثانیه در نظر گرفته شده است.

پس از ایجاد ساختار ماده وکمینه کردن انرژی و به تعادل رسانی، برای استخراج خواص مکانیکی، از روش بهینه سازی کرنش ثابت استفاده شده است. در این روش سه دسته کرنش عمودی و برشی با اندازه ثابت مثبت و منفی بر ساختار مولکولی اعمال می شود و تنش در ساختار جدید محاسبه می‌شود. سپس مقادیر ماتریس تنش و کرنش برای محاسبه ماتریس سختی از طریق حل دستگاه جبری مورد استفاده قرار می گیرند. در این پژوهش، کرنش مثبت و منفی ۰/۰۱ بر جعبه اعمال گردید.

برای بررسی تاثیر درصد وزنی نانوتقویت کننده بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت، نانوکامپوزیت‌های حاوی یک نانوتقویت کننده، با همان ابعاد گفته شده، شبیه سازی و با ایجاد تغییر در میزان ماتریس زمینه، با درصدهای وزنی ۷، ۱۰ و ۱۳ درصد، شبیه سازی شد. نتایج بدست آمده به شرح نمودارهای زیر می‌باشد.



شکل ۱۰– تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله با درصد وزنی



شکل ۱۱– تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانوذره با درصد وزنی

از نتایج بدست آمده در شکل های (۱۰) و (۱۱)، می‌توان دریافت که با افزایش درصد وزنی نانوتقویت کننده، مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله، تا ۱۳ درصد وزنی و نانوکامپوزیت حاوی نانوذره، تا ۱۰ درصد وزنی، افزایش می‌یابد. همچنین بر طبق نتایج بدست آمده مشاهده می‌گردد که تاثیر نانولوله بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت، در یک جهت، بسیار بیشتر از تاثیر نانوذره می‌باشد، در حالیکه نانوذره، مدول الاستیک را در تمام جهت‌ها و به صورت همسانگرد افزایش می‌دهد. به علاوه، میزان افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت با افزایش درصد وزنی نانو تقویت کننده در نانولوله، بسیار بیشتر از نانوذره است. نتایج بدست آمده برای نانوکامپوزیت حاوی ۱۳ درصد وزنی نانوذره، حکایت از کاهش مدول الاستیک نانوکامپوزیت در این درصد وزنی نسبت به نانوکامپوزیت با درصدهای وزنی کمتر و حتی ماتریس خالص دارد. این نتیجه به دلیل حجم زیاد نانوذره در جعبه شبیه سازی است که عدم پوشش درست و کامل سطح نانوذره با پلیمر و عدم ایجاد اتصال کافی مابین پلیمر و نانوذره را به دنبال دارد.

همانطور که در شکل‌های (۱۰) و (۱۱) مشاهده می‌شود، مقدار بدست آمده برای مدول الاستیک اپوکسی خالص با درصد اتصال عرضی ۷۵ درصد، برابر با ۳/۴ گیگاپاسکال می‌باشد. این مقدار از مدول الاستیک پیش بینی شده برای اپوکسی خالص با درصد اتصال عرضی ۵۰ درصد، گزارش شده توسط آقاداوودی و همکاران [۱۵]، بیشتر است. مقدار بدست آمده توسط این محققین ۲/۸ گیگاپاسگال می‌باشد. آلیان و همکاران [۱۶] نیز مقدار بدست آمده برای اپوکسی خالص را ۳/۲ گیگاپاسکال پیش بینی کرده‌اند. روند بهبود خواص در نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی به دست آمده در این بررسی، شکل (۱۰)، به خصوص در راستای طولی نانولوله، در مراجع دیگر نیز گزارش شده‌است [۹].

۳-۲- نتایج رهیافت فیبر موثر

نتایج بدست آمده برای نانوکامپوزیت دوفازی حاوی یک نانوتقویت کننده، با ۱۰ درصد وزنی، به عنوان المان حجمی نماینده مورد استفاده قرار گرفته شده است. لذا برای بدست آوردن مقدار دقیق مقدار فاصله فاز میانی جهت برآورد دقیق مقدار حجم فیبر موثر، ابتدا نمودارهای چگالی توزیع شعاعی مربوط به این دو المان حجمی نماینده از بخش دینامیک مولکولی استخراج گردید. بر طبق نتایج بدست آمده، مقدار فاصله بین پلیمر و نانوتقویت کننده برای نانولوله کربنی، ۲/۲۵ آنگستروم و برای نانوذره، ۲/۳۵ آنگستروم تعیین گردید. برای بدست آوردن حجم فیبر موثر، دو برابر مقدار بدست آمده از فاصله تقویت کننده و پلیمر، جهت لحاظ کردن خواص الاستیک فاز میانی، مورد استفاده قرار می‌گیرد. نتایج بدست آمده برای مدول الاستیک طولی و عرضی فیبر موثر، از معکوس رابطه هالپین تسای، در جدول (۲) ارایه گردیده است. نتایج ارائه شده در این جدول نشان می‌دهد که ۱۰ درصد وزنی نانوذره حجم بیشتری را نسبت به نانولوله دارد اما، به دلیل ضریب حجمی بیشتر نانولوله، فیبر موثر نانولوله دارای حجم موثر بیشتری می‌باشد. بالاتر بودن ضریب حجمی نانولوله نسبت به نانوذره، به دلیل تفاوت در چگالی، تفاوت در اندازه لایه میانی و همچنین شکل این نوع نانو تقویت کننده است. همانطور که در این جدول مشاهده می‌شود، مدول الاستیک طولی فیبر موثر نانولوله کربنی بیشتر از فیبر موثر نانوذره است. در حالیکه مدول عرضی نانوذره، که خواص همسانگرد (ایزوتروپ) دارد، مقداری بیشتر از مدول عرضی فیبر موثر نانولوله است.

۳-۳- نتایج مدل چند مقیاسی

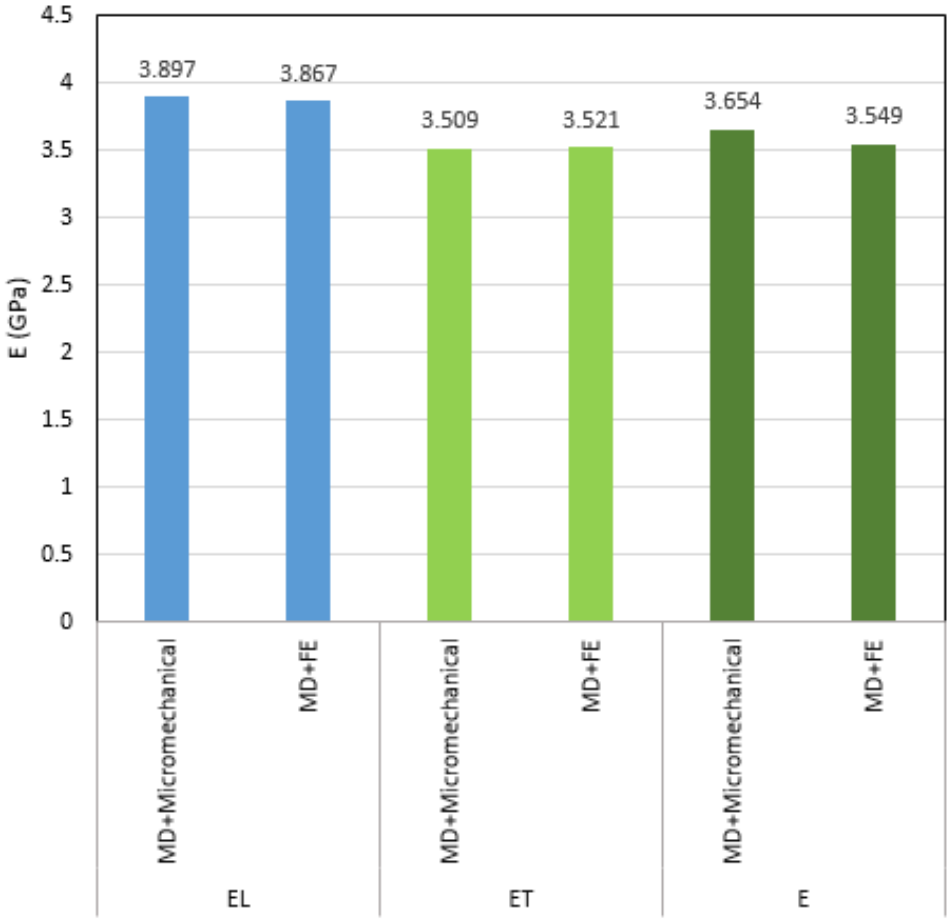
نتایج بدست آمده برای مدول الاستیک نانوکامپوزیت، از دو مدل چند مقیاسی بیان شده در این پژوهش، در نمودارهای زیر، جهت بررسی و مقایسه ارایه شده است. این نتایج، به صورت جداگانه، برای نانوکامپوزیت دو فازی حاوی نانولوله کربنی، نانوکامپوزیت دو فازی حاوی نانوذره و نانوکامپوزیت هیبریدی، ارایه گردیده است. در این نتایج، از ۰/۲۵ درصد حجمی نانو تقویت کننده استفاده شده است. در این نمودارها، نتایج بدست آمده برای مدول الاستیک نانوکامپوزیت در هر دو حالت توزیع هم راستا و تصادفی ارایه گردیده است.

نتایج ارائه شده در شکل‌های (۱۲)، (۱۳) و (۱۴) نشان می‌دهند که اختلاف نتایج پیش بینی شده در هر دو مدل چند مقیاسی (میکرومکانیک و المان محدود) برای مدول الاستیک طولی و عرضی نانوکامپوزیت با نانو تقویت کننده‌های هم راستا و مدول الاستیک نانوکامپوزیت با توزیع تصادفی تقویت کننده‌ها، کم می‌باشد. این مقایسه نشان از دقت خوب مدل سازی دارد. از این نمودارها می‌توان دریافت که نتایج بدست آمده از روش المان محدود، در حالت ایزوتروپ بودن نانو تقویت کننده‌ها (نانوذره‌ها)، دارای دقت بیشتری نسبت به حالت‌های ایزوتروپ عرضی بودن نانوتقویت کننده‌ها (نانولوله‌ها) و ترکیبی بودن اشکال و خواص نانوتقویت کننده‌ها (هیبرید) دارد.

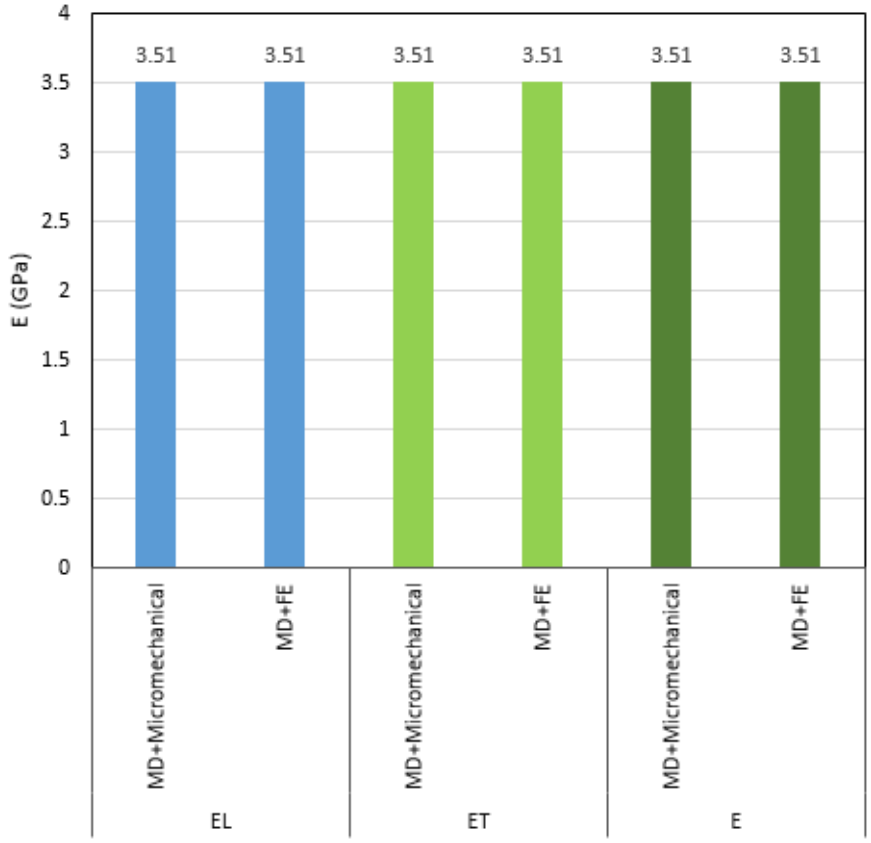
جدول ۲- خواص فیبر موثر

نانوکامپوزیت	V_{eff} (%)	V (%)	α	$E_{L\text{-}eff}$ (GPa)	$E_{T\text{-}eff}$ (GPa)
حاوی نانولوله	۱۴/۳	۲	۷/۱	۳۰/۱	۵/۶۴
حاوی نانوذره	۹/۲	۳/۲	۲/۹	۱۱/۷۷	۱۱/۷۷

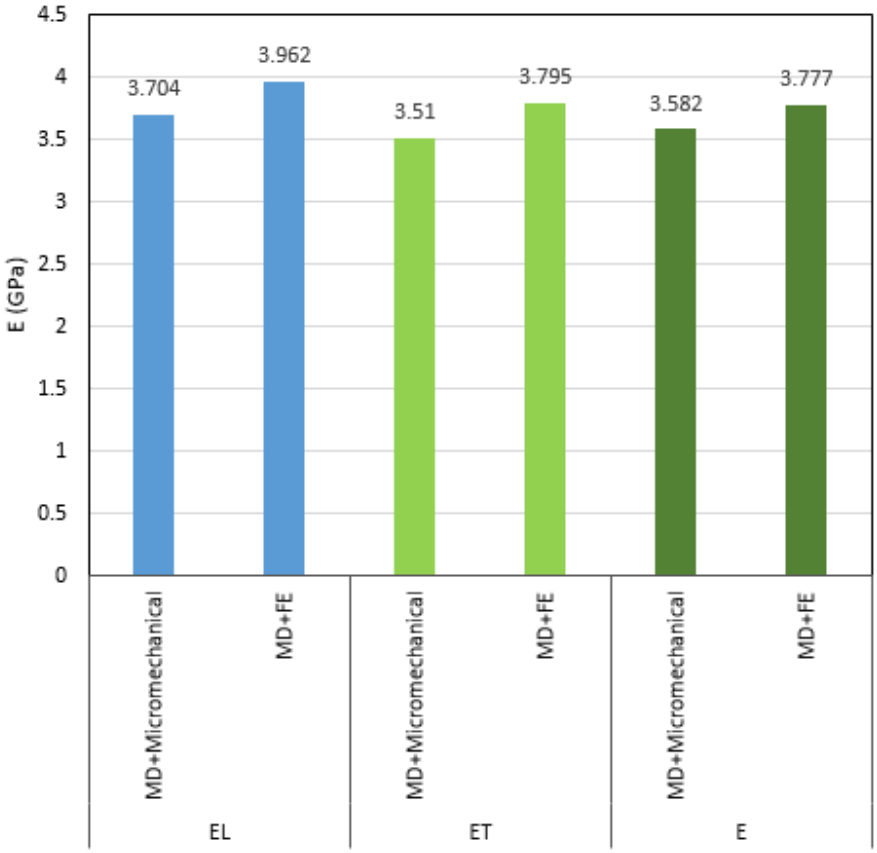
نتایج ارائه شده در شکل‌های (۱۲)، (۱۳) و (۱۴) نشان می‌دهند که اختلاف نتایج پیش بینی شده در هر دو مدل چند مقیاسی (میکرومکانیک و المان محدود) برای مدول الاستیک طولی و عرضی نانوکامپوزیت با نانو تقویت کننده‌های هم راستا و مدول الاستیک نانوکامپوزیت با توزیع تصادفی تقویت کننده‌ها، کم می‌باشد. این مقایسه نشان از دقت خوب مدل سازی دارد. از این نمودارها می‌توان دریافت که نتایج بدست آمده از روش المان محدود، در حالت ایزوتروپ بودن نانو تقویت کننده‌ها (نانوذره‌ها)، دارای دقت بیشتری نسبت به حالت‌های ایزوتروپ عرضی بودن نانوتقویت کننده‌ها (نانولوله‌ها) و ترکیبی بودن اشکال و خواص نانوتقویت کننده‌ها (هیبرید) دارد. در این نمودارها، EL و ET مدول الاستیک طولی و عرضی نانوکامپوزیت را در حالت آرایش یافتگی هم راستا نانوتقویت کننده‌ها و E مدول الاستیک نانوکامپوزیت را در حالت آرایش نامنظم نانوتقویت کننده‌ها نمایش می‌دهند. در ادامه، با کنار هم چیدن نانوتقویت کننده‌ها در نانوکامپوزیت دو فازی، در روش چند مقیاسی المان محدود، تاثیر پدیده انباشتگی، در نتایج مدول الاستیک بررسی شد. نتایج این شبیه سازی در شکل‌های بعدی ارایه شده است. علاسوند و همکاران [۱۷]، بهبود ۳/۶ درصدی را برای نانوکامپوزیت حاوی ۰/۱۵درصد وزنی نانولوله کربنی، به صورت تجربی، بدست آورده بودند، که نتایج بدست آمده در شکل (۱۲) را تصدیق می‌کند. در شکل (۱۲)، به ازای ۰/۲۵ درصد حجمی نانولوله کربنی، افزایش ۵ و ۲ درصدی را به ترتیب در مدل‌های میکرومکانیک و المان محدود نانوکامپوزیت نسبت به اپوکسی خالص (۳/۴۷۷ گیگاپاسکال) می‌توان مشاهده نمود.



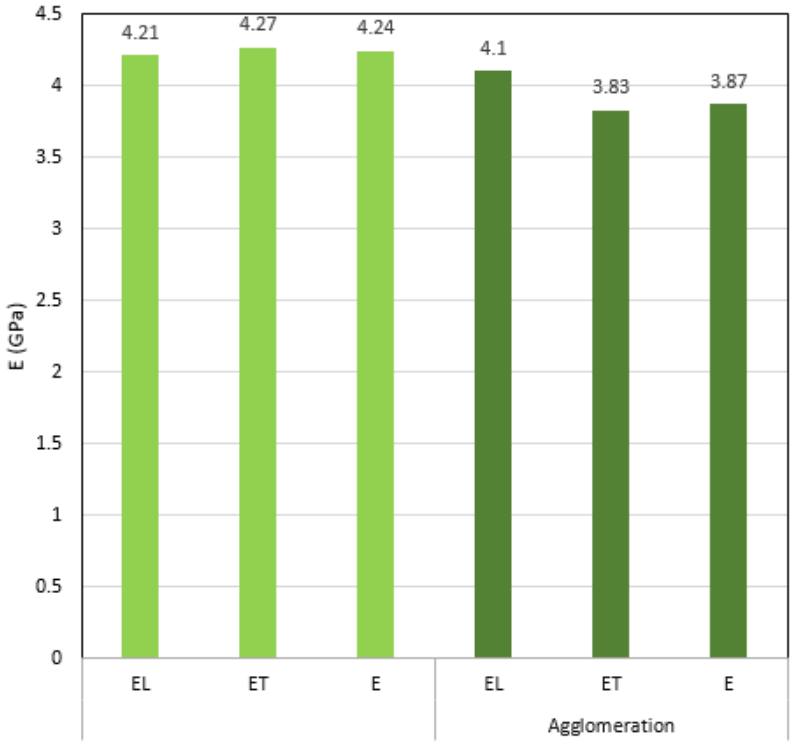
شکل ۱۲– مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی



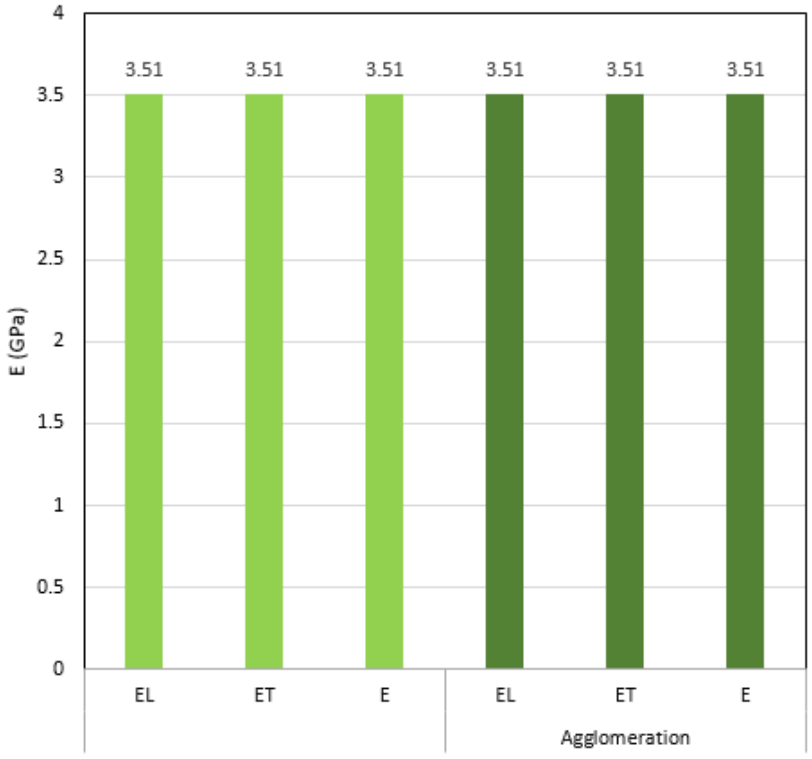
شکل ۱۳– مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانو ذره کربنی



شکل ۱۴– مدول الاستیک نانوکامپوزیت هیبریدی



شکل ۱۵– مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی انباشته شده



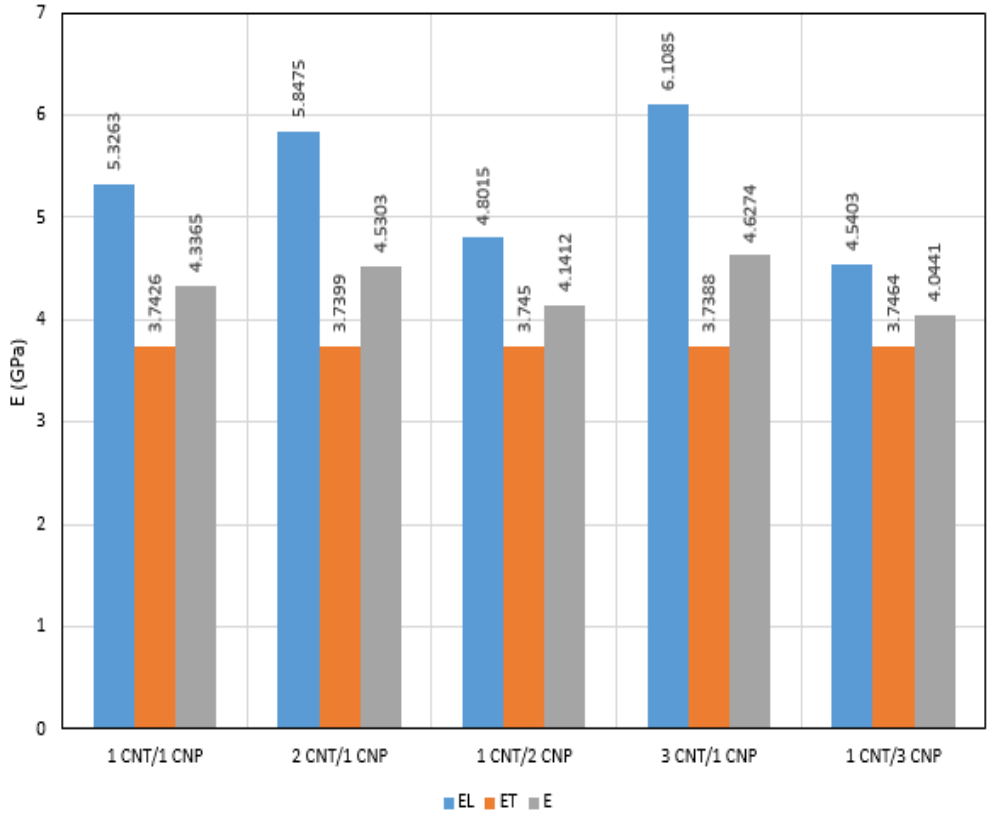
شکل ۱۶– مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانو ذره کربن انباشته شده

همانطور که از نتایج ارائه شده در شکل‌های (۱۵) و (۱۶) مشاهده می‌گردد، پدیده انباشتگی، تاثیر کاهشی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی گذاشته و باعث کاهش مدول الاستیک گردیده است.

همچنین، در این نوع نانوکامپوزیت مشاهده می‌گردد که پس از انباشته شدن نانولوله‌های کربنی، توزیع تصادفی یکنواخت از بین رفته و مدول الاستیک در یک جهت بیشتر از دو جهت اصلی دیگر می‌باشد. در حالیکه در نانوکامپوزیت حاوی نانوذره کربنی، پدیده انباشتگی ذرات، تاثیری بر مدول الاستیک نگذاشته است. روند کاهشی مشاهده شده در مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی بر اثر پدیده انباشتگی تقویت کننده‌ها در شکل (۱۵) را می‌توان در مطالعه حقیقی و همکاران[۱۸]، که به صورت تجربی و مدلسازی انجام گرفته است، مشاهده نمود. همچنین، این روند کاهشی نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی در شکل (۱۵) و روند ثابت در نانوکامپوزیت حاوی نانوذره در شکل (۱۶) بر اثر انباشتگی تقویت کننده‌ها را می-توان در شبیه سازی خدادادی و همکاران [۶] که با استفاده از دینامیک مولکولی انجام گرفته است دید.

با توجه به نتایج نشان داده شده در شکل‌های (۱۲) تا (۱۶) می‌توان برداشت کرد که تاثیر نانولوله کربنی در بهبود مدول الاستیک نانوکامپوزیت بسیار موثرتر از نانوذره کربنی (الماس) است. در حالی که، مشاهدات نشان می‌دهد که استفاده کسر وزنی بالای نانولوله کربنی، منجر به ایجاد پدیده انباشتگی در نانولوله‌های کربنی و به دنبال آن کاهش مدول الاستیک می‌شود. لذا، شبیه سازی نانوکامپوزیت هیبریدی حاوی ۲ درصد حجمی نانو تقویت کننده، با نسبت‌های مختلف نانوذره کربنی و نانولوله کربنی ، انجام شد. نتایج این بررسی در شکل (۱۷) ارائه شده است.

از نتایج ارائه شده در شکل (۱۷) می‌توان دریافت که بهترین ترکیب برای نانو تقویت کننده‌ها، نسبت ۳ به ۱ نانولوله کربنی نسبت به نانوذره کربنی می‌باشد. با افزایش درصد نانو تقویت کننده، می‌توان از نسبت ۲ به ۱ نانولوله کربنی به نانوذره کربنی جهت جلوگیری از پدیده انباشتگی نانولوله‌های کربنی، استفاده کرد.



شکل ۱۷– مدول الاستیک نانوکامپوزیت هیبریدی با درصدهای حجمی مختلف نانوتقویت کننده

جهت بررسی تاثیر خواص فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت از روش چند مقیاسی استفاده و نانوکامپوزیت‌های حاوی کسر حجمی‌های مختلف نانولوله کربنی با استفاده از دو روش مختلف تحلیل شد. در روش اول خواص فاز میانی، با استفاده از روش فیبر موثر، در خواص نهایی نانوکامپوزیت در نظر گرفته شد. در روش دوم، خواص نانولوله کربنی بدون در نظر گرفتن فاز میانی، در رابطه هالپین تسای استفاده شد. نتایج این بررسی در جدول (۳) ارائه شده است.

همانطور که از جدول (۳) مشخص می‌باشد، عدم در نظر گرفتن خواص فاز میانی می‌تواند در پیش بینی دقیق مدول الاستیک نانوکامپوزیت خطا ایجاد کند. به طوریکه، با افزایش درصد حجمی نانوتقویت کننده میزان خطا افزایش می‌یابد.

در ادامه به بررسی تاثیر درصد حجمی نانو تقویت کننده بر مدول الاستیک پرداخته شده است. نتایج برای دو مدول الاستیک طولی و عرضی، در حالت آرایش هم راستا نانو تقویت کننده‌ها و آرایش تصادفی ارایه شده است. مدول الاستیک نانوکامپوزیت دو فازی و هیبرید تقویت شده با صفر تا ۳ درصد حجمی نانو تقویت کننده تعیین شده‌است. لازم به ذکر است که در نانوکامپوزیت هیبرید درصد حجمی نانولوله کربنی و نانوذره برابر در نظر گرفته شده‌است.

نتایج بدست آمده برای مدول الاستیک نانوکامپوزیت دو فازی و هیبریدی در شکل‌های (۱۸)، (۱۹) و (۲۰)، ارائه شده‌است. این نتایج نشان از بهبود مدول الاستیک نانوکامپوزیت با افزایش کسر حجمی نانو تقویت کننده دارند. بعلاوه، نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهند که مدول الاستیک عرضی دو نوع نانوکامپوزیت دوفازی و نانوکامپوزیت هیبریدی، با آرایش هم راستا نانوتقویت کننده‌ها، نزدیک به هم می‌باشد.

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش به مدل‌سازی چند مقیاسی نانوکامپوزیت هیبریدی با زمینه پلیمری پرداخته شد. در این نانو کامپوزیت، تقویت‌کننده‌های نانولوله کربنی تک جداره و نانوذره کربن (الماس) استفاده شد و رفتار الاستیک نانوکامپوزیت های دوفازی و هیبریدی مورد بررسی قرار گرفت. در این مدل‌سازی چند مقیاسی، در مقیاس نانو و محدوده زمانی پیکو ثانیه، جهت ارزیابی دقیق جزییات برهمکنش بین نانوتقویت‌کننده‌ها و ماتریس پلیمری، از روش دینامیک مولکولی و در مقیاس بزرگتر، از روابط تحلیلی میکرومکانیک نانوکامپوزیت استفاده شد تا دقیقترین و منطبق‌ترین نتایج برای خواص الاستیک نانوکامپوزیت پیش‌بینی شود. از المان محدود نیز برای بررسی صحت نتایج بدست آمده در مقیاس ماکرو استفاده شده است.

به طور کلی، جمع بندی نتایج بدست آمده برای نانوکامپوزیت دوفازی و هیبرید، از دو بخش دینامیک مولکولی در ابعاد نانو و میکرومکانیک در فاز میکرو و ماکرو، با بررسی تاثیر پارامترهای مختلف و همچنین، نتایج مربوط به المان محدود جهت اعتبار سنجی به شرح زیر می‌باشد:

۱. نتایج بدست آمده از دو روش چندمقیاسی میکرومکانیک و المان محدود، در مقیاس ماکرو، انطباق خوبی را با یکدیگر نشان می‌دهند.
۲. استفاده از مدل هالپین-تسای، در روش چند مقیاسی، دقت بیشتری را در پیش بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت با آرایش یافتگی هم راستا یا تصادفی داشت.

۳. عدم در نظر گرفتن خواص فاز میانی می‌تواند در پیش بینی دقیق مدول الاستیک نانوکامپوزیت، خطا ایجاد کند. به طوریکه، با افزایش کسر حجمی نانوتقویت کننده میزان خطا افزایش می‌یابد.

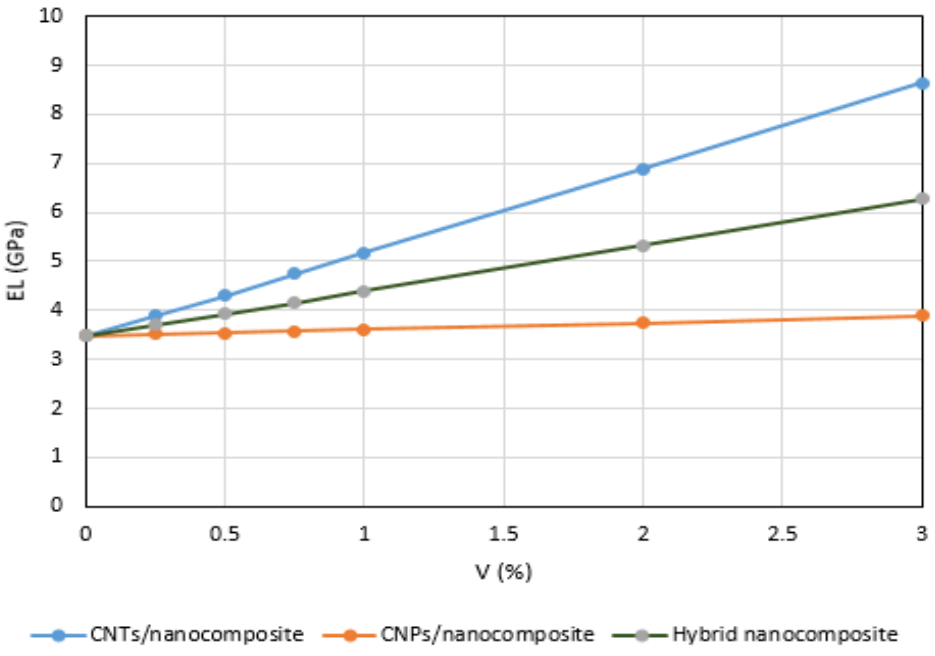
۴. مدول الاستیک نانوکامپوزیت دو فازی و هیبریدی، با افزایش کسر حجمی نانو تقویت کننده افزایش یافت.

۵. مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی، در اثر انباشتگی نانولوله‌های کربنی، کاهش می‌یابد. در حالیکه، انباشتگی نانو ذرات در نانوکامپوزیت حاوی نانوذره کربنی، هیچ تاثیری بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت نداشت.

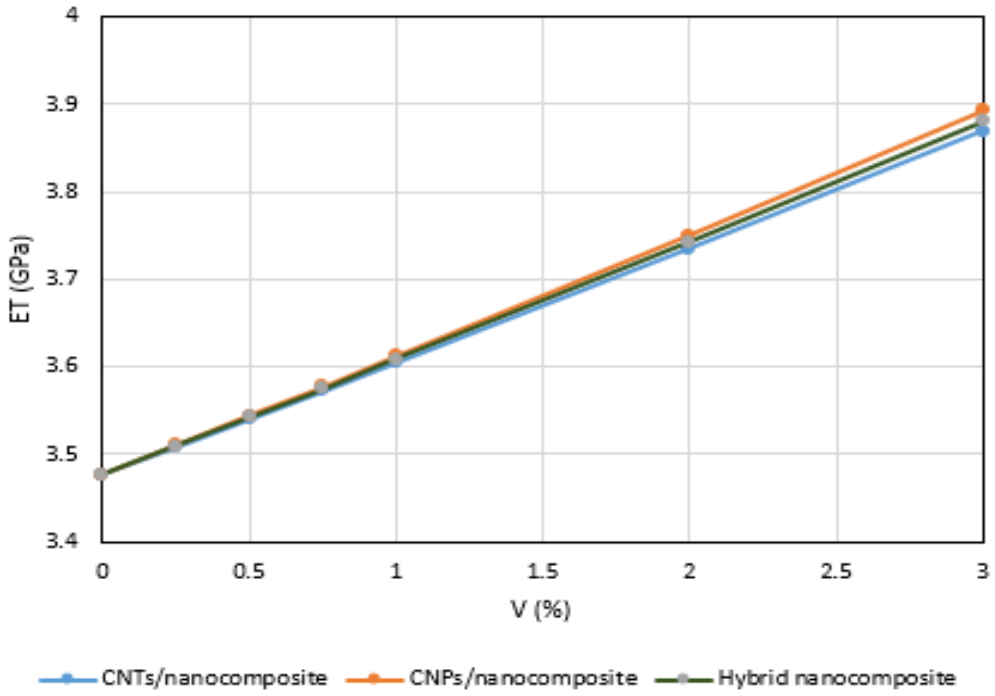
۶. استفاده از نانوکامپوزیت هیبریدی حاوی تقویت کننده‌های نانولوله کربنی همراه با نانوذره کربن، بهبود خواص الاستیک را به دنبال دارد.

جدول ۳- تاثیر خواص فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربنی

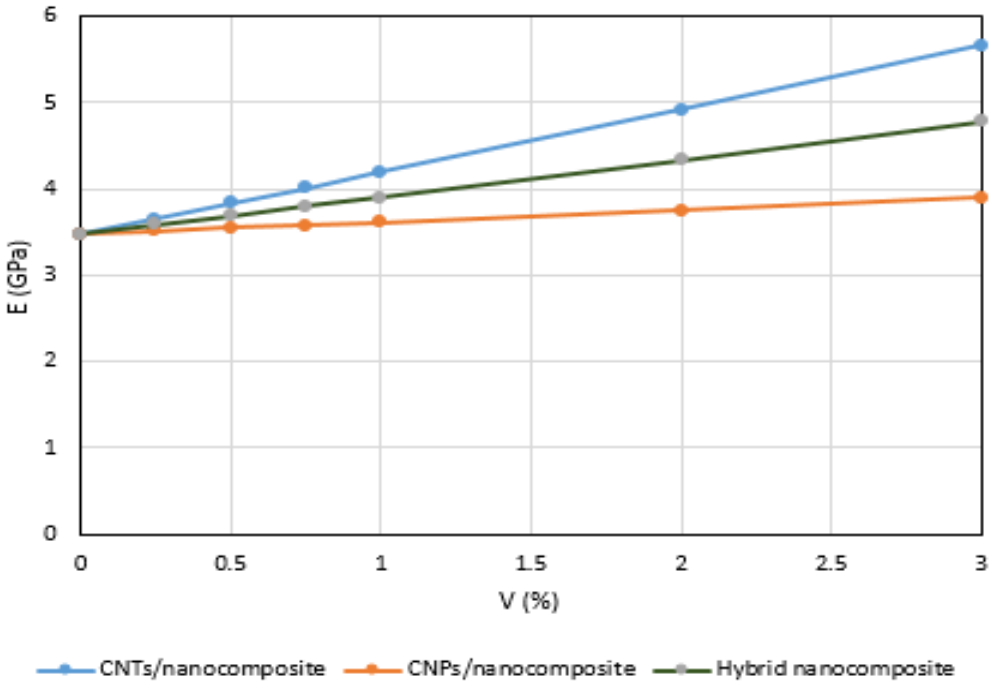
کسر حجمی نانولوله کربنی	نانولوله/فاز میانی/اپوکسی	نانولوله/اپوکسی	اختلاف ٪
۰	۳/۴۷۷	۳/۴۷۷	۰
۰/۲۵	۳/۹۰۴۵	۳/۸۹۷۴	۰/۱۸
۰/۵	۴/۳۳۳۸	۴/۳۱۹۴	۰/۳۳
۱	۵/۱۹۷۷	۵/۱۶۸۴	۰/۵۶
۲	۶/۹۴۶۶	۶/۸۸۶۷	۰/۸۷
۳	۸/۷۲۴۷	۸/۶۳۲۴	۱/۰۷
۴	۱۰/۵۳۲۵	۱۰/۴۰۶۳	۱/۲۱
۵	۱۲/۳۷۰۸	۱۲/۲۰۹۰	۱/۳۳



شکل ۱۸- تغییرات مدول الاستیک طولی نانوکامپوزیت هیبریدی با درصدهای حجمی مختلف نانوتقویت کننده



شکل ۱۹- تغییرات مدول الاستیک عرضی نانوکامپوزیت هیبریدی با درصدهای حجمی مختلف نانوتقویت کننده



شکل ۲۰- تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت هیبریدی با درصدهای حجمی مختلف نانوتقویت کننده

مراجع

[1] Sallal, H.A., Abdul-Hamead, A.A., and Othman, F.M., "Effect of Nano Powder (Al2o3-Cao) Addition on the Mechanical Properties of the Polymer Blend Matrix Composite", Defence Technology, Vol. 16, No. 2, pp. 425-431, (2020).

[2] Kiliç, H., and Yilmaz, D,. "Various Properties of Recycled Pet (rPET)/Organoclay Nanocomposite Fibres", Plastics, Rubber and Composites, Vol. 49(4), pp. 164-178, (2020).

[3] Kapoor, S., Goyal, M., and Jindal, P., "Effect of Functionalized Multi-walled Carbon Nanotubes on Thermal and Mechanical Properties of Acrylonitrile Butadiene Styrene Nanocomposite", Journal of Polymer Research, Vol. 27, No. 2, pp. 1-13, (2020).

[4] Navidfar, A., Sancak, A., Yildirim, K. B., and Trabzon, L., "A Study on Polyurethane Hybrid Nanocomposite Foams Reinforced with Multiwalled Carbon Nanotubes and Silica Nanoparticles", Polymer-Plastics Technology and Engineering, Vol. 57, No. 14, pp. 1463-1473, (2018).

[5] Ayatollahi, M.R., Shokrieh, M.M., Shadlou, S., Kefayati, A.R., and Chitsazzadeh, M., "Mechanical and Electrical Properties of Epoxy/Multi-walled Carbon Nanotube/Nanoclay Nanocomposites", Iranian Polymer Journal, Vol. 20, No. 10(136), pp. 835-843, (2011).

[6] Khodadadi, A., Haghighi, M., Golestanian, H., and Aghadavoudi, F., "Molecular Dynamics Simulation of Functional and Hybrid Epoxy Based Nanocomposites", Mechanics of Advanced Composite Structures, Vol. 7, No. 2, pp. 233-243, (2020).

[7] Sharma, S., Kumar, P., and Chandra, R., "Mechanical and Thermal Properties of Graphene-carbon Nanotube-reinforced Metal Matrix Composites: A Molecular Dynamics Study", Journal of Composite Materials, Vol. 51(23), pp. 3299-3313, (2016).

[8] Alasvand Zarasvand, K., and Golestanian, H., "Effects of Nanotube/Matrix Interface on Multi-walled Carbon Nanotube Reinforced Polymer Mechanical Properties", Mechanics of Advanced Composite Structures, Vol. 4, No. 3, pp. 211-223, (2017).

[9] Aghadavoudi, F., Golestanian, H., and Tadi Beni, Y., "Investigating the Effects of Cnt Aspect Ratio and Agglomeration on Elastic Constants of Crosslinked Polymer Nanocomposite using Multiscale Modeling", Polymer Composites, Vol. 39(12), pp. 4513-4523, (2017).

[10] Esbati, A.H., and Irani, S., "Multiscale Modeling of Fracture in Polymer Nanocomposite Reinforced by Intact and Functionalized Cnts", Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 4(1), pp. 35-46, (2017).

[11] Alian, A., El-Borgi, S., and Meguid, S., "Multiscale Modeling of the Effect of Waviness and Agglomeration of Cnts on the Elastic Properties of Nanocomposites", Computational Materials Science, Vol. 117, pp. 195-204, (2016).

[12] Kundalwal, S., and Kumar, S., "Multiscale Modeling of Stress Transfer in Continuous Microscale Fiber Reinforced Composites with Nano-engineered Interphase", Mechanics of Materials, Vol. 102, pp. 117-131, (2016).

[13] Odegard, G.M., Pipes, R.B., and Hubert, P., "Comparison of Two Models of Swcn Polymer Composites", Composites Science and Technology, Vol. 64, No. 7-8, pp. 1011-1020, (2004).

[14] Al Kassem, G., and Weichert, D., "Micromechanical Material Models for Polymer Composites through Advanced Numerical Simulation Techniques", Wiley Online Library, Vol. 9(1), pp. 413-414, (2010).

[15] Aghadavoudi, F., Golestanian, H., and Tadi Beni, Y., "Investigating the Effects of Resin Cross-linking Ratio on Mechanical Properties of Epoxy-based Nanocomposites using Molecular Dynamics", Polymer Composites, Vol. 38(S1), Special Issue: Nanocomposites, pp. E433-E442, (2016).

[16] Alian, A.R., Kundalwal, S.I., and Meguid, S.A., "Multiscale Modeling of Carbon Nanotube Epoxy Composites", Polymer, Vol. 70, pp. 149-160, (2015).

[17] Alasvand Zarasvand, K., and Golestanian, H., "Experimental and Numerical Determination of Compressive Mechanical Properties of Multi-walled Carbon Nanotube Reinforced Polymer", Journal of Polymer Engineering, Vol. 37, No. 4, (2017).

[18] Haghighi, M., Golestanian, H., and Aghadavoudi, F., "Determination of Mechanical Properties of Two-phase and Hybrid Nanocomposites: Experimental Determination and Multiscale Modeling", Journal of Polymer Engineering, Vol. 236(1), pp. 496-510, (2021).

فهرست نمادهای انگلیسی

CNT	نانولوله کربنی
CNP	نانوذره کربن
d	قطر
E	مدول الاستیک
eff	فیبر موثر
h	ضخامت فاز میانی
L	طولی
m	ماتریس
l	طول نانولوله
R	شعاع
RVE	المان حجمی نماینده
r	نانوتقویت کننده

T عرضی

V حجم

نمادهای یونانی

α ضریب تاثیر حجم موثر

ζ ضریب شکل نانوتقویت کننده

Abstract

In this paper, multiscale modeling of Epoxy-based hybrid nanocomposites was performed. Single-walled carbon nanotube and carbon nanoparticle (diamond) were used as reinforcements and the elastic behavior of hybrid nanocomposite was investigated. In the multiscale modeling, at the nanoscale and pico-second time range, molecular dynamics method was used to make an accurate model of the interaction between the nano-scale reinforcements and the polymer matrix to predict the interface behavior more realistically. At the micro and macro scales, micromechanical models were used to predict the elastic properties of the nanocomposites, incorporating the effects of interface behavior. Finite element method was also used to check the accuracy of the results obtained at the macro scale. First, pure thermoset polymer with 75% crosslinking ratio was simulated using molecular dynamics method. Then two nanocomposites, one consisting of a single-walled carbon nanotube and another one containing a carbon nanoparticle (diamond) were simulated to obtain equivalent fiber mechanical properties. Next, a micromechanical model was developed for hybrid nanocomposite using the equivalent fiber and pure thermoset polymer mechanical properties. In addition, the results obtained from the molecular dynamics simulations, along with a correction coefficient were employed in the micromechanical models and finite element simulations. Finally, micromechanical multiscale modeling results were compared with finite element multiscale modeling results and a good agreement was observed. Results suggest that the use of two types of nano-reinforcement together, hybrid nanocomposite, improves nanocomposite mechanical properties.