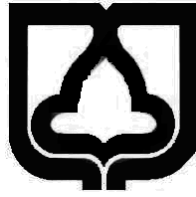


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه سمنان
دانشکده مهندسی مکانیک

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی

عنوان:

بررسی رشد ترک در نانوکامپوزیت ها، مدل سازی و تحلیل آن

توسط:

حسین همتیان

استاد راهنما:

دکتر عبدالحسین فریدون

استاد مشاور:

دکتر محمد رضا آشوری

بهمن ۱۳۹۰

اینجانب حسین همتیان متعهد می شوم که محتوای علمی این نوشتار با عنوان:

بررسی ترک در نانوکامپوزیت ها، مدلسازی و تحلیل آن

که به عنوان پایان نامه کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک، گرایش طراحی کاربردی به دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه سمنان ارائه شده، دارای اصالت پژوهشی بوده و حاصل فعالیت های علمی اینجانب می باشد.

در صورتی که خلاف ادعای فوق در هر زمانی محرز شود، کلیه حقوق معنوی متعلق به این پایان نامه از اینجانب سلب شده و موارد قانونی مترتب به نیز از مراجع ذیربط قابل پیگیری است.

نام و نام خانوادگی: حسین همتیان

امضاء

شماره دانشجویی: ۸۸۱۱۱۶۹۰۱۰

تقدیم به:

پدر و مادر عزیزم

به خاطر زحمات بی‌شائبه شما

که همواره در تمام مراحل زندگی یار و پشتیبان من هستید

پاسکزارم.

تشکر و قدردانی:

شکر خدای را که توان انجام این پایان نامه را عطایم کرد و موانع بسیار سخت این مسیر را برایم آسان و حل نمود.
باشکر فراوان از زحمات استاد گرامی، جناب آقای دکتر عبدالحسین فریدون، که بنده را در انجام این پایان نامه راهنمایی کردند. از خداوند متعال، توفیق و بهروزی روز افزون ایشان را خواستارم.
و با سپاس فراوان از دوست و همراه عزیزم آقای مهندس مرتضی رجب پور که در این مسیر مرا یاری نمود.

چکیده

در این پایان نامه به بررسی اثر نانولوله کربن بر رشد ترک در نانوکامپوزیت پرداخته شده است. ابتدا روشی جدید برای مدلسازی نانولوله در انسیس ارائه، و خواص آن برای المان تیر براساس مدل لی و چو بیان گردید. نتایج مدول یانگ و برشی نانولوله کربنی تطابق خوبی با کارهای گذشته داشت. همچنین بررسی شد که هرگونه تغییر شکل نانولوله، موجب کاهش مدول الاستیک آن می گردد. المان حجمی معرف (*RVE*) نانوکامپوزیت با استفاده از تعریف المان فتر غیر خطی برای پیوندهای واندروالس بین نانو و ماتریس مدل گردید. روش چندمقیاسه کلی- محلی برای تحلیل ترک در مواد نانوکامپوزیت ارائه شد، که پس از طی چند مرحله از ابعاد ماکرو به ابعاد نانو می رسیم. جهت بررسی پارمترهای موثر بر افزایش مقاومت ترک متغیرهای مختلفی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که درصد وزنی بالاتر نانولوله باعث افزایش چقرمگی شکست می گردد. بررسی ها با استفاده از روش چندمقیاسه در مدل *RVE* نشان داد زمانیکه نانولوله عمود بر ترک قرار می گیرد، کمترین ضریب شدت تنش و بیشترین کارایی را در کنترل ترک خواهد داشت. در مدل *RVE* با ثابت نگه داشتن طول و شعاع و تغییر کارالیتی ضریب شدت تنش دستخوش تغییر می شود. در یک درصد وزنی با افزایش طول و شعاع، ضریب شدت تنش نانوکامپوزیت کاهش می یابد. همچنین در مسئله دیگر مشخص شد که با اعمال بار مساوی، ضریب شدت تنش اپوکسی/ نانولوله کمتر از اپوکسی/هالوی سایت می باشد.

علاوه بر این بررسی ضریب شدت تنش در مودهای شکست مختلف *RVE* به طور مستقل نشان داد که با افزودن نانو به ماتریس در تمامی حالت ها ضریب شدت تنش کاهش یافته است. بنابراین با افزودن نانو، مقاومت ترک افزایش یافته و این افزایش در حالت های بازشدگی و پارگی قابل ملاحظه تر می باشد.

کلمات کلیدی: ترک، حالت بازشدگی، چقرمگی شکست، ضریب شدت تنش، روش چندمقیاسه کلی-محلی، المان حجمی نمایشی، نانولوله کربنی، نانوکامپوزیت های پلیمری، جهت گیری نانولوله

فهرست

مقدمه.....	۱
فصل اول- نانولوله های کربنی، کامپوزیت ها و نانوکامپوزیت ها.....	۷
۱-۱- گرافیت.....	۸
۲-۱- نانولوله های کربنی.....	۱۰
۱-۲-۱- انواع نانولوله های کربن و ساختار آنها.....	۱۰
۲-۲-۱- پارامتر هندسی نانولوله کربنی.....	۱۱
۳-۲-۱- خصوصیات نانولوله های کربنی.....	۱۴
۱-۳-۲-۱- خصوصیات مکانیکی نانولوله های کربنی.....	۱۴
۲-۳-۲-۱- خصوصیات حرارتی نانولوله های کربنی.....	۱۵
۳-۳-۲-۱- خصوصیات الکترونیکی نانولوله های کربنی.....	۱۶
۳-۱- کامپوزیت ها.....	۱۶
۱-۳-۱- الیاف.....	۱۸
۲-۳-۱- رزین.....	۱۸
۳-۳-۱- طراحی مواد برای بدست آوردن خواص مکانیکی مورد نظر با بکارگیری کامپوزیت ها.....	۱۹
۴-۱- نانو کامپوزیت ها.....	۲۰
۱-۴-۱- انواع نانوکامپوزیت ها.....	۲۱
۱-۴-۱-۱- نانوکامپوزیت های سرامیکی.....	۲۲
۲-۴-۱-۱- نانوکامپوزیت های کربن با زمینه پلیمری.....	۲۳
۳-۴-۱-۱- نانوکامپوزیت ها پلیمری.....	۲۳
۵-۱- روش های متداول مدلسازی مواد در مقیاس نانو.....	۲۵
۱-۵-۱- روش های مدلسازی پیوسته.....	۲۷
۱-۵-۱-۱- روش های تحلیلی پیوسته.....	۲۷
۲-۵-۱-۱- روش های محاسباتی پیوسته.....	۲۸
۱-۵-۱-۲- روش اجزاء محدود.....	۲۹
۱-۵-۱-۲-۱- روش المان مرزی.....	۲۹
۲-۵-۱-۲- روش های مدلسازی مولکولی (شیمی محاسباتی).....	۳۰
۱-۵-۲-۱- دینامیک مولکولی.....	۳۰
۲-۵-۲-۱- روش مونت کارلو.....	۳۳
۱-۵-۲-۳- روش اب اینیشیو.....	۳۴

فصل دوم- شکست، مکانیزم های چقرمگی و تحلیل ترک در نانوکامپوزیت ها	۳۵
۲-۱- مقدمه	۳۶
۲-۲- تحقیقات اولیه در مکانیک شکست	۳۸
۲-۳- انواع تغییر شکل نوک ترک	۴۰
۲-۴- چقرمگی شکست	۴۱
۲-۴-۱- روش های به کار رفته در تعیین ضرایب شدت تنش	۴۲
۲-۴-۱-۱- روش های عددی	۴۲
۲-۴-۱-۲- روش های آزمایشگاهی	۴۲
۲-۵- انتگرال J	۴۳
۲-۶- روش های جلوگیری از رشد ترک	۴۶
۲-۷- مکانیزم های کنترل ترک در نانومواد	۴۷
۲-۸- روش های عددی بررسی ترک در نانوکامپوزیت ها	۵۰
۲-۸-۱- دینامیک مولکولی ترک	۵۰
۲-۸-۲- شبیه سازی چندگانه مقیاس طولی	۵۱
۲-۸-۲-۱- اتصال روش های MD و FE	۵۲
۲-۸-۲-۲- اتصال روش های MD و QM	۵۳
۲-۸-۲-۳- اتصال روش های MD و QM و FE	۵۳
۲-۸-۳- روش المان حجمی نمایشی	۵۴
۲-۹- روش های آزمایشگاهی بررسی ترک در نانوکامپوزیت ها	۵۴
۲-۹-۱- روش کار ضروری شکست	۵۴
۲-۹-۲- آنالیز گشودگی دهانه ترک	۵۵
۲-۹-۳- ریخت شناسی ترک با استفاده از SEM	۵۶
فصل سوم- شبیه سازی چند مقیاسه کلی- محلی و المان حجمی نمایشی	۵۷
۳-۱- روش چند مقیاسه	۵۸
۳-۱-۱- روش چندمقیاسه پایین به بالا	۵۸
۳-۱-۲- روش چندمقیاسه بالا به پایین	۵۹
۳-۲- مدلسازی با استفاده از روش چندمقیاسه بالا به پایین	۶۰
۳-۳- مدلسازی المان حجمی نمایشی (RVE)	۶۴
۳-۳-۱- مدلسازی نانولوله کربنی	۶۵

- ۳-۳-۱-۱- خصوصیات مکانیکی پیوند های کربن- کربن ۶۵
- ۳-۳-۱-۲- مدل سازی هندسه نانولوله کربنی در انسیس ۶۹
- ۳-۳-۱-۳- صحت مدول الاستیسیته نانولوله کربنی ۷۲
- ۳-۳-۱-۴- مدول الاستیک نانولوله کربنی تغییر شکل یافته ۷۷
- ۳-۳-۱-۴-۱- نانولوله کربنی پیچیده شده ۷۷
- ۳-۳-۱-۴-۲- نانولوله کربنی بیضوی ۷۸
- ۳-۳-۱-۴-۲- نانولوله کربنی هتروجانکشن ۷۹
- ۳-۳-۲- مدل سازی ماتریس ۸۰
- ۳-۳-۳- مدل سازی فاز واسط ۸۳
- ۳-۳-۴- بررسی صحت مدل RVE ۸۷
- فصل چهارم- تعریف مسئله، ارائه نتایج، بحث و تحلیل ۸۹
- ۴-۱- بررسی اثر نانولوله های کربنی بر چقرمگی شکست و ضریب شدت تنش در حالت بازشدگی ۹۰
- ۴-۱-۱- اپوکسی/نانولوله کربنی تک جداره ۰.۱٪ ۹۳
- ۴-۱-۱-۱- اثر جهت گیری نانولوله در مسیر ترک بر ضریب شدت تنش (۰.۱٪) ۹۳
- ۴-۱-۱-۲- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط RVE (۰.۱٪) ۹۹
- ۴-۱-۱-۳- اثر تغییر طول بر ضریب شدت تنش ترک وسط RVE (۰.۱٪) ۱۰۰
- ۴-۱-۱-۴- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو آرمچیر (۰.۱٪) ۱۰۱
- ۴-۱-۱-۵- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ (۰.۱٪) ۱۰۲
- ۴-۱-۲- اپوکسی/نانولوله کربنی تک جداره ۰.۰۵٪ ۱۰۲
- ۴-۱-۲-۱- اثر جهت گیری نانولوله در مسیر ترک بر ضریب شدت تنش (۰.۰۵٪) ۱۰۲
- ۴-۱-۲-۲- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط RVE (۰.۰۵٪) ۱۰۳
- ۴-۱-۲-۳- اثر تغییر طول بر ضریب شدت تنش ترک وسط RVE (۰.۰۵٪) ۱۰۴
- ۴-۱-۲-۴- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو آرمچیر (۰.۰۵٪) ۱۰۵
- ۴-۱-۲-۵- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ (۰.۰۵٪) ۱۰۶
- ۴-۲- مقایسه ضریب شدت تنش اپوکسی/نانولوله کربن با اپوکسی/هالوی سایت با درصد وزنی مشابه ... ۱۰۶
- ۴-۲-۱- محاسبه مدول یانگ نانوکامپوزیت ۱۰۷
- ۴-۲-۱-۱- مدل هالپین-تسای ۱۰۸
- ۴-۲-۱-۲- مدل هیو-شیا ۱۰۸
- ۴-۲-۲- اثر جهت گیری نانولوله در مسیر ترک بر ضریب شدت تنش ۱۱۰
- ۴-۲-۳- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط RVE ۱۱۴

۱۱۵.....	۴-۲-۴- اثر تغییر طول بر ضریب شدت تنش ترک وسط RVE
۱۱۷.....	۴-۲-۵- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو آرمچیر
۱۱۸.....	۴-۲-۶- اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ
۱۱۹.....	۴-۳- بررسی اثر نانولوله های کربنی بر نسبت ضریب شدت تنش در مودهای شکست مختلف
۱۲۳.....	فصل پنجم- نتیجه گیری و پیشنهادات
۱۲۴.....	۵-۱- نتیجه گیری
۱۲۶.....	۵-۲- پیشنهادات
۱۲۷.....	مراجع

فهرست اشکال

- شکل ۱ مدلی از مولکول فولرن C60 [۳] ۱
- شکل ۲ شمایی از الف) صفحه گرافن و ب) نانولوله کربنی [۴] ۲
- شکل ۱-۱ آلوتروپ‌های مختلف کربن [۵۷] ۸
- شکل ۲-۱ ساختار سه بعدی گرافیت [۵۹] ۹
- شکل ۳-۱ طرح کلی پیوندهای سیگما [۵۹] ۹
- شکل ۴-۱ مکانیزم ساخت نانولوله کربنی [۶۰] ۱۰
- شکل ۵-۱ تصویر TEM از کربن نانولوله تک جداره و چندجداره [۶۰] ۱۰
- شکل ۶-۱ نحوه به وجود آمدن انواع نانولوله ها ۱۱
- شکل ۷-۱ شماتیک ایجاد انواع نانو لوله کربنی [۶۱] ۱۲
- شکل ۸-۱ بردار و زاویه کایرال [۶۲] ۱۲
- شکل ۹-۱ نانولوله‌های زیگزاگ (۰ و ۱۰)، آرمچیر (۶ و ۶) و چیرال (۴ و ۸) [۶۳] ۱۳
- شکل ۱۰-۱ سه مدل نانولوله سرپوشدار، از بالا به پایین به ترتیب: آرمچیر، زیگزاگ، و کایرال [۶۴] ۱۴
- شکل ۱۱-۱ نمونه ای از یک نانوکامپوزیت [۷۰] ۲۰
- شکل ۱۲-۱ نحوه توزیع نانولوله در نانو کامپوزیت پلیمری [۷۰] ۲۴
- شکل ۱۳-۱ مقیاس های طولی و زمانی مختلف برای تخمین خواص مکانیکی نانو کامپوزیت ها [۷۶] ۲۵
- شکل ۱۴-۱ روش های مختلف مدلسازی مواد [۷۶] ۲۶
- شکل ۱۵-۱ مدل پیوسته معادل برای یک نانوکامپوزیت [۸۵] ۳۳
- شکل ۱-۲ الف) ترک در هواپیما F-111 (ب) کشتی نفتکش اسچنکتادی ۳۶
- شکل ۲-۲ محدوده وسیع مکانیک شکست ۳۷
- شکل ۳-۲ سه حالت مختلف بارگذاری بر اجسام دارای ترک ۴۰
- شکل ۴-۲ مختصات و مولفه های تنش نوک ترک ۴۱
- شکل ۵-۲ نمونه های اندازه گیری چقرمگی شکست الف) SENB (ب) CT ۴۳
- شکل ۶-۲ ناحیه خاکستری برابر مقدار انتگرال جی ۴۴
- شکل ۷-۲ پارامترهای محاسبه انتگرال J ۴۴
- شکل ۸-۲ نمایش مسیر انتگرال گیری در محاسبه انتگرال جی ۴۵
- شکل ۹-۲ دو کانتور مستقل از مسیر پیرامون نوک ترک ۴۵
- شکل ۱۰-۲ همپوشانی میدان تنش توسط ذرات نانو [۱۰۷] ۴۷
- شکل ۱۱-۲ مکانیزم های چقرمگی [۱۰۷] ۴۸
- شکل ۱۲-۲ مکانیزم پل زنی ترک در نانوکامپوزیت ها [۱۰۷] ۴۹
- شکل ۱۳-۲ مکانیزم گیر کردن ترک در نانوکامپوزیت ها ۴۹
- شکل ۱۴-۲ عملکرد نانولوله های کربنی بر مسیر انتشار ترک [۵۰] ۵۰
- شکل ۱۵-۲ اتصال روش های MD و FE [۱۱۹] ۵۲

- شکل ۲-۱۶ اتصال روش های MD و QM ۵۳
- شکل ۲-۱۷ نواحی کاربرد روش های MD و QM و FE [۱۱۹] ۵۴
- شکل ۲-۱۸ کار ضروری شکست و نمونه DDENT [۱۲۹] ۵۵
- شکل ۲-۱۹ ریخت شناسی SEM از نمونه ها [۱۲۹] ۵۶
- شکل ۳-۱ روش شبیه سازی چند مقیاسه (الف) روش پایین به بالا (ب) روش بالا به پایین [۵۱] ۵۹
- شکل ۳-۲ نمونه تست کشش (CT) براساس استاندارد ASTM D5045 [۱۴۲] ۶۰
- شکل ۳-۳ بار گذاری و قیود اعمال شده به نصف نمونه CT ۶۱
- شکل ۳-۴ (الف) و (ب) - کانتور تنش نمونه CT (گام اول)، (ج) و (د) - جابجایی نمونه ۶۱
- شکل ۳-۵ (الف) المان های انتخاب شده در نوک ترک از گام اول، (ب) المان های کوچک تر در گام دوم ۶۲
- شکل ۳-۶ گام دوم (الف) بارگذاری و قید (ب) کانتور تنش ۶۲
- شکل ۳-۷ بارگذاری، مش بندی و کانتور تنش گام های سوم تا ششم ۶۳
- شکل ۳-۸ نانولوله تک جداره به عنوان یک سازه قاب مانند [۱۴۵] ۶۵
- شکل ۳-۹ هم ارزی میان الف) مدل مکانیک سازه ای و ب) مدل مکانیک مولکولی [۱۴۵] ۶۶
- شکل ۳-۱۰ نمونه هایی از مدل های نانو در نانوتیوب مدلر ۷۰
- شکل ۳-۱۱ نمونه هایی از مدل های پیچیده نانومقیاس در انسیس ۷۲
- شکل ۳-۱۲ سطح مقطع نانولوله تک جداره و مدل محیط پیوسته معادل آن [۱۴۵] ۷۴
- شکل ۳-۱۳ شرایط مرزی و بارگذاری نانولوله (۱۰ و ۱۰) ۷۴
- شکل ۳-۱۴ شرایط مرزی و بارگذاری نانولوله نقص دار (۱۰ و ۱۰) ۷۵
- شکل ۳-۱۵ مدول یانگ و برشی نانولوله (الف-ب) و نانولوله نقص دار (ج-د) با طول 50 \AA ۷۶
- شکل ۳-۱۶ نانولوله پیچیده شده (۱۰ و ۱۰) ۷۷
- شکل ۳-۱۷ مدول الاستیک نانولوله پیچشی برحسب زاویه پیچش برای کایرالیته (۱۰ و ۱۰) و طول 100 \AA ۷۸
- شکل ۳-۱۸ نانولوله بیضوی (۱۰ و ۱۰) ۷۸
- شکل ۳-۱۹ مدول الاستیک نانولوله بیضوی برحسب نسبت ab برای کایرالیته (۱۰ و ۱۰) و طول 100 \AA ۷۸
- شکل ۳-۲۰ نانولوله هتروجانکشن متشکل از (۱۰ و ۱۰) و (۱۵ و ۱۵) ۷۹
- شکل ۳-۲۱ مدول یانگ و برشی هتروجانکشن برحسب کایرالیته برای طول های مختلف ۷۹
- شکل ۳-۲۲ سطح مکعب نانوکامپوزیت ۸۳
- شکل ۳-۲۳ مشبندی ماتریس ۸۳
- شکل ۳-۲۴ نمودار نیروی واندروالس بر حسب فاصله بین اتمی ۸۵
- شکل ۳-۲۵ نمودار نیروی واندروالس بر حسب جابجایی فنر ۸۵
- شکل ۳-۲۶ چگونگی اتصال المان های فنر بین نانولوله و ماتریس ۸۶
- شکل ۳-۲۷ مدل RVE استوانه ای با نانولوله بیضوی ۸۷
- شکل ۳-۲۸ منحنی تنش- کرنش ۸۷
- شکل ۳-۲۹ مدول یانگ و برشی RVE برای a/b های مختلف ۸۸
- شکل ۴-۱ شرایط تست CT ۹۰

- شکل ۴-۲ نصف نمونه CT با اعمال شرط تقارن، (الف) شرایط مرزی و بارگذاری (ب) کانتور تنش اپوکسی/نانولوله کربن تک جداره ۰.۱٪..... ۹۱
- شکل ۴-۳ بار بحرانی برحسب درصد های وزنی مختلف نانولوله های کربنی ۹۲
- شکل ۴-۴ مقایسه چقرمگی شکست برای درصدهای مختلف با مرجع ۹۳
- شکل ۴-۵ مدل RVE براساس ظرفیت ۰.۱٪ نانولوله کربن برای نانولوله (۱۰، ۱۰)..... ۹۳
- شکل ۴-۶ ترک موازی نانو ۹۴
- شکل ۴-۷ ترک عمود بر نانو ۹۵
- شکل ۴-۸ ترک در وسط RVE (پل زنی) ۹۶
- شکل ۴-۹ ضرایب شدت تنش برای نانو با جهت گیری های مختلف (۰.۱٪) ۹۹
- شکل ۴-۱۰ ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های دارای شعاع تقریباً مساوی با نانولوله (۱۰، ۱۰) (۰.۱٪) ۱۰۰
- شکل ۴-۱۱ ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های (۱۰، ۱۰)، (۰، ۱۷) و (۵، ۱۴)، برحسب طول (۰.۱٪) ۱۰۰
- شکل ۴-۱۲ ضریب شدت تنش RVE با طول ثابت برای کایرالیته های مختلف آرمچیر (۰.۱٪) ۱۰۱
- شکل ۴-۱۳ ضریب شدت تنش RVE با طول ثابت برای کایرالیته های مختلف زیگ-زاگ (۰.۱٪) ۱۰۲
- شکل ۴-۱۴ ضرایب شدت تنش برای نانو با جهت گیری های مختلف (۰.۰۵٪) ۱۰۳
- شکل ۴-۱۵ ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های دارای شعاع تقریباً مساوی با نانولوله (۱۰، ۱۰) (۰.۰۵٪) ۱۰۴
- شکل ۴-۱۶ ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های (۱۰، ۱۰)، (۰، ۱۷) و (۵، ۱۴)، برحسب طول (۰.۰۵٪) ۱۰۵
- شکل ۴-۱۷ ضریب شدت تنش RVE با طول ثابت برای کایرالیته های مختلف آرمچیر (۰.۰۵٪) ۱۰۵
- شکل ۴-۱۸ ضریب شدت تنش RVE با طول ثابت برای کایرالیته های مختلف زیگ-زاگ (۰.۰۵٪) ۱۰۶
- شکل ۴-۱۹ تصویر TEM از هالوی سایت [۱۴۲] ۱۰۷
- شکل ۴-۲۰ کانتور تنش نمونه CT اپوکسی/نانولوله کربن ۱۰٪ ۱۱۰
- شکل ۴-۲۱ مدل RVE براساس ظرفیت ۰.۱٪ نانولوله کربن برای نانولوله (۱۰، ۱۰) ۱۱۰
- شکل ۴-۲۲ نانو موازی ترک در حالت انتها باز ۱۱۱
- شکل ۴-۲۳ نانو موازی ترک در حالت انتها بسته (کپسول) ۱۱۱
- شکل ۴-۲۴ نانو عمود بر ترک ۱۱۲
- شکل ۴-۲۵ ترک در وسط RVE (پل زنی) ۱۱۳
- شکل ۴-۲۶ ضرایب شدت تنش برای نانو با جهت گیری های مختلف ۱۱۳
- شکل ۴-۲۷ نانولوله های دارای شعاع تقریباً مساوی با نانولوله (۱۰، ۱۰) ۱۱۴
- شکل ۴-۲۸ ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های دارای شعاع تقریباً مساوی با نانولوله (۱۰، ۱۰) ۱۱۵
- شکل ۴-۲۹ RVE دارای نانولوله (۱۰، ۱۰) با طول های مختلف ۱۱۶
- شکل ۴-۳۰ ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های (۱۰، ۱۰)، (۰، ۱۷) و (۵، ۱۴)، برای طول های ۷۵، ۵۰، ۲۵ و ۱۱۷
- ۱۰۰ آنگستروم ۱۱۷
- شکل ۴-۳۱ تغییر کایرالیته ۱۱۷
- شکل ۴-۳۲ اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش در ترک وسط نانو آرمچیر ۱۱۸
- شکل ۴-۳۳ اثر تغییر کایرالیته بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ ۱۱۹

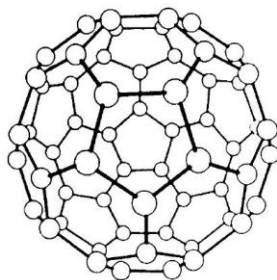
- شکل ۴-۳۴ مدل های RVE برای کایرالیته (۵، ۵) با درصد حجمی نانولوله کربن ۵٪ ۱۲۰
- شکل ۴-۳۵ حالت بازشدگی ۱۲۰
- شکل ۴-۳۶ حالت لغزشی ۱۲۱
- شکل ۴-۳۷ حالت پارگی ۱۲۱
- شکل ۴-۳۸ نسبت ضریب شدت تنش نانوکامپوزیت به اپوکسی خالص برای کایرالیته های مختلف ۱۲۲

فهرست جداول

جدول ۱-۱	خواص مکانیکی نانولوله‌ها در مقایسه با گرافیت و فولاد [۶۳]	۱۵
جدول ۲-۱	مقایسه چگالی بین کامپوزیت و فلزات [۶۷]	۱۷
جدول ۱-۳	ابعاد و اندازه مش بندی گام های مختلف	۶۴
جدول ۲-۳	مشخصات مقطع و جنس المان تیر [۱۴۵]	۶۹
جدول ۳-۳	نحوه تبدیل فایل PDB به APDL	۷۰
جدول ۴-۳	مدول یانگ و برشی نانولوله و نانولوله نقص دار با کایرالیتهی مختلف و طول 50 \AA	۷۶
جدول ۵-۳	مدول یانگ و برشی ارائه شده با روش های المان محدود توسط دیگر محققین	۷۷
جدول ۱-۴	مدول یانگ و چقرمگی شکست اپوکسی و نانوکامپوزیت [۴۴]	۹۰
جدول ۲-۴	بار بحرانی و چقرمگی شکست اپوکسی و نانوکامپوزیت	۹۲
جدول ۳-۴	ضرایب شدت تنش برای نانو با جهت گیری های مختلف (۰.۱٪)	۹۸
جدول ۴-۴	ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های دارای شعاع تقریباً مساوی با نانولوله (۱۰، ۱۰) (۰.۱٪)	۹۹
جدول ۵-۴	ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های (۱۰، ۱۰)، (۱۷، ۰) و (۵، ۱۴)، برای طول های ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰	۱۰۰
جدول ۱۰۱	آنگستروم (۰.۱٪)	۱۰۱
جدول ۶-۴	اثر تغییر کایرالیتهی بر روی ضریب شدت تنش در ترک وسط نانو آرمچیر (۰.۱٪)	۱۰۱
جدول ۷-۴	اثر تغییر کایرالیتهی بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ (۰.۱٪)	۱۰۲
جدول ۸-۴	ضرایب شدت تنش برای نانو با جهت گیری های مختلف (۰.۰۵٪)	۱۰۳
جدول ۹-۴	ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های دارای شعاع تقریباً مساوی با نانولوله (۱۰، ۱۰) (۰.۰۵٪)	۱۰۴
جدول ۱۰-۴	ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های (۱۰، ۱۰)، (۱۷، ۰) و (۵، ۱۴)، برای طول های ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰	۱۰۴
جدول ۱۱-۴	اثر تغییر کایرالیتهی بر روی ضریب شدت تنش در ترک وسط نانو آرمچیر (۰.۰۵٪)	۱۰۵
جدول ۱۲-۴	اثر تغییر کایرالیتهی بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ (۰.۰۵٪)	۱۰۶
جدول ۱۳-۴	مدول یانگ و چقرمگی شکست و بار بحرانی اپوکسی و نانوکامپوزیت اپوکسی/هالوی سایت [۱۴۲]	۱۰۷
جدول ۱۴-۴	مشخصات RVE اپوکسی/نانولوله کربن ۱۰٪	۱۰۹
جدول ۱۵-۴	مدول یانگ نانوکامپوزیت بر اساس مدل های هالپین-تسای و هیو-شیا	۱۰۹
جدول ۱۶-۴	ضرایب شدت تنش برای نانو با جهت گیری های مختلف	۱۱۲
جدول ۱۸-۴	ضریب شدت تنش RVE با نانولوله های (۱۰، ۱۰)، (۱۷، ۰) و (۵، ۱۴)، برای طول های ۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰	۱۱۶
جدول ۱۹-۴	اثر تغییر کایرالیتهی بر روی ضریب شدت تنش در ترک وسط نانو آرمچیر	۱۱۸
جدول ۲۰-۴	اثر تغییر کایرالیتهی بر روی ضریب شدت تنش ترک وسط نانو زیگ-زاگ	۱۱۸

مقدمه

پیشوند «نانو» متناظر با یک واحد اصلی در مقیاس طول است که به معنای 10^{-9} متر می‌باشد. تحقیقات جدی در فن‌آوری نانو پس از کشف مواد نانو مقیاس مانند فولرن‌ها در میانه دهه ۱۹۸۰ و نانولوله‌های کربنی در ابتدای دهه ۱۹۹۰ آغاز شد. تا حدود سال ۱۹۸۰ تنها دو ساختار کریستالی تماماً کربن، یعنی آلوتروپ‌های طبیعی گرافیت و الماس، شناخته شده بودند. در آگوست سال ۱۹۸۵ در دانشگاه رایس، در حین آزمایشاتی برای تبخیر گرافیت توسط لیزر، یکی از جالب‌ترین کشف‌های سه دهه گذشته یعنی یافتن آلوتروپ تازه‌ای از کربن به نام فولرن^۱ رخ داد [۱]. شناخته شده‌ترین مولکول فولرن، C_{60} است که به آن باکی‌بال^۲ نیز اطلاق می‌گردد [۲ و ۳].



شکل ۱ مدلی از مولکول فولرن C_{60} [۳]

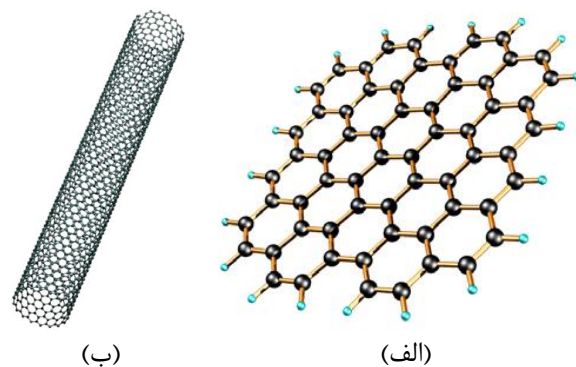
مدت کوتاهی پس از این کشف، ایجیما^۳ که سابقه انجام مطالعات بی‌ثمری بر روی دوده حاصل از فرایند تبخیر گرافیت با استفاده از میکروسکوپ الکترونی عبوری^۴ را داشت، با اعمال تغییراتی، تحقیقات خود را در این زمینه از سر گرفت. سرانجام در سال ۱۹۹۱، وی مزد زحمات خود را گرفت و آلوتروپ تازه‌ای از کربن را کشف کرد که به خاطر نسبت طول به قطر بالایش، نام نانولوله را بر آن نهادند [۱]. نانولوله‌های کربنی را می‌توان به صورت صفحات اتم کربنی در نظر گرفت که به صورت یک ساختار لوله‌ای پیچیده شده‌اند.

^۱ Fullerene

^۲ Buckyball

^۳ Iijima

^۴ TEM



شکل ۲ شمایی از الف) صفحه گرافن و ب) نانولوله کربنی [۴]

پس از کشف نانولوله‌های کربن، علاقه به نانومواد تک بعدی به طور قابل توجهی رشد یافت. تا کنون استراتژی‌های متعددی برای سنتز این مواد توسعه یافته و خصوصیات جالبی نیز برای آنها گزارش شده است. از خصوصیات مهم نانولوله‌های کربنی می‌توان به استحکام مکانیکی بالا و خصوصیات الاستیک بسیار خوب، رسانش گرمایی عالی، خواص الکترونیکی در محدوده نیمه رسانا تا فلز، حساسیت الکترونیکی به جاذب‌های شیمیایی و کرنش‌های مکانیکی، همچنین نسبت طول به قطر و نسبت سطح به حجم بسیار بالا اشاره کرد. این خواص نانولوله‌ها را به عنوان کاندیداهای ایده‌آلی برای کاربردهایی از قبیل فیبرهای تقویت کننده در مواد کامپوزیت سبک وزن، اجزای دستگاه‌های الکترونیکی مولکولی، محرک‌ها و حسگرهای شیمیایی و مکانیکی، و مواد ذخیره کننده گاز و انرژی معرفی می‌کنند.

در سالهای اخیر، استفاده از نانوکامپوزیت‌های پلیمر/نانولوله کربن به جای کامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با الیاف کربن، توجه بسیاری از محققین را به دلیل افزایش زیاد سفتی^۱ و استحکام^۲ به خود جلب کرده است [۵ و ۶].

رزین‌های اپوکسی به دلیل خواص مکانیکی بسیار خوب برای کاربردهای صنعتی مختلف مورد توجه می‌باشند. به دنبال تلاش‌های انجام شده برای تقویت پلیمرها با تقویت کننده‌های مختلف [۷-۱۱]، نانولوله‌های کربنی نیز برای این هدف در نظر گرفته شدند [۱۲-۱۸]. آیت‌اللهی و همکارانش نشان دادند که با افزودن نانولوله کربنی، چقرمگی شکست اپوکسی تحت خمش خالص و برش خالص بهبود می‌یابد [۱۹].

^۱ Stiffness

^۲ Strength

اپوکسی به عنوان ماتریس، به طور وسیع در سازه های کامپوزیتی به خصوص در صنایع اتومبیل سازی و هوایی به کار برده می شود. با این حال چقرمگی شکست پایین کامپوزیت های پایه اپوکسی، ظرفیت آن را برای مقاومت در برابر بارهای ضربه ای و ناگهانی کاهش می دهد. در سالهای اخیر بسیاری از محققین با انجام آزمایش های بسیار دریافتند که افزودن نانوذرات به اپوکسی، اثرات مثبتی بر چقرمگی شکست و نرخ آزادسازی انرژی می گذارد [۲۰-۲۵].

در حالیکه تعداد قابل توجهی از تحقیقات موجود بر روی سفتی و استحکام کامپوزیت های نانولوله های کربنی متمرکز شده اند، تحقیقات اندکی در ارتباط با رفتار شکست این مواد در حضور پیش ترک انجام شده است [۲۶-۲۸].

بررسی ها نشان می دهد زمانیکه نانولوله های کربنی عمود بر ترک قرار می گیرند، قادرند تا با پل زنی در مسیر ترک، سرعت رشد ترک را کاهش دهند. نانولوله های کربنی علاوه بر تقویت نانوکامپوزیت ها، خواص لایه ای و خارج از صفحه آنها را نیز بهبود می دهند [۲۹].

کوانین^۱ و همکارانش در یکی از اولین گزارش ها پیرامون ماتریس های تقویت شده با نانولوله نشان دادند که حضور ۱٪ وزنی نانولوله کربن در پلی استر که به طور همگن و یکنواخت پراکنده شده، مدول الاستیک را ۳۶-۴۲٪ و استحکام کششی را تقریباً ۲۵٪ افزایش می دهد [۳۰].

اثر ابعاد نانولوله کربن بر خواص شکست نانوکامپوزیت ها یکی از موضوعات مهمی می باشد که نیاز به بررسی دقیق دارد. بسته به روش تولید و دیگر پارامترهای درگیر، قطر نانولوله کربنی از چند نانومتر تا چندصد نانومتر تغییر می کند. تحقیقات معدودی در زمینه اثر ابعاد نانولوله بر خواص مختلف نانوکامپوزیت انجام شده است [۳۱ و ۳۲].

گزارش هایی نیز در ارتباط با چگونگی اثر انواع نانولوله ها و روش های مختلف تولید مواد بر چقرمگی شکست حالت بازشدگی نانوکامپوزیت ها داده شده است. گوجنیت^۲ و همکارانش به بررسی K_{Ic} نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربن چند جداره با استفاده از تست

Qian^۱Gojneyet^۲

نمونه کشش فشرده (CT)^۱ پرداختند [۳۳]. نتایج نشان داد که چقرمگی شکست برای درصد‌های وزنی ۰.۱ و ۱، به ترتیب ۱۸.۵٪ و ۲۷.۷٪ افزایش یافته است. تاستنسون^۲ و چو^۳ نیز با استفاده از تست خمش نمونه با قاچ لبه ($SENB$)^۴ K_{Ic} نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربن چند جداره را اندازه گیری کردند [۳۴].

آری^۵ و همکارانش ۵۰٪ و ۱۵۰٪ افزایش را برای چقرمگی شکست حالت های اول و دوم کامپوزیت لایه ای اپوکسی/الیاف کربن اصلاح شده با نانولوله کربن گزارش داده اند [۳۵]. علاوه بر این افزودن ۵٪ وزنی نانولوله کربنی فنجان‌ی انباشته^۶ به اپوکسی، چقرمگی شکست بین لایه ای را ۳۰۰٪ افزایش می دهد [۳۶].

اثر عامل دار کردن نانولوله های کربن بر خواص مکانیکی شامل K_{Ic} در برخی تحقیقات بررسی شده است. به عنوان نمونه، سان^۷ و همکارانش ۱٪ وزنی نانولوله کربن تک جداره دست نخورده و عامل دار شده را به رزین اپوکسی افزودند [۳۷]. چقرمگی شکست برای نانولوله دست نخورده و عامل دار شده به ترتیب ۳٪ و ۱۸٪ افزایش داشت.

تحقیقاتی دیگری نیز در ارتباط با بهبود رفتار شکست ماتریس اپوکسی یا کامپوزیت های اپوکسی به وسیله انواع نانولوله های کربن از طریق آزمایش انجام شده است [۳۸-۴۴]. همه نتایج، افزایش چقرمگی شکست و مقاومت به ترک را نشان می دهد.

در زمینه مدلسازی و کاربرد روش های عددی برای بررسی رفتار شکست کارهای معدودی انجام شده است که بیشتر در ارتباط با اثر نانوذرات مختلف در ماتریس می باشد. برای نمونه، کمال^۸ و همکارانش اثر افزودن نانوذرات کلسیم کربنات در ماتریس پلی ونیل کلراید بر چقرمگی را با استفاده از روش المان محدود در نرم افزار انسیس بررسی کرده اند [۴۵].

^۱ Compact tension

^۲ Thostenson

^۳ Chou

^۴ Single Edge Notch Bending

^۵ Arai

^۶ cup-stacked

^۷ Sun

^۸ Kemal

چو^۱ و همکارانش به بررسی اثر حضور نانوذرات بر خواص مکانیکی کامپوزیت های پلیمری در نرم افزار آباکوس [۴۶] و تان^۲ و همکارانش با استفاده از روش المان مجزا^۳ به بررسی ترک های حاصل از ماشین کاری در پلی کرستالین Al_2O_3 پرداخته اند [۴۷].

تحلیل سه بعدی برهم کنش بین ترک ماتریس و نانوالیاف کربن نیز توسط گواندی^۴ و همکارانش [۴۸] و همچنین تحلیل المان محدود ترک در سیمان تقویت شده با نانولوله کربن توسط چان^۵ و همکارانش [۴۹] در انسیس بررسی شده است.

میرجلالی نیز به بررسی اثر پل زنی نانولوله های کربن بر چقرمگی پلیمرها به وسیله آزمایش و مدلسازی مشابه کامپوزیت با الیاف کوتاه و جهت گیری تصادفی پرداخته است [۵۰]. در تمام کارهایی که تاکنون برای شبیه سازی ترک در ماتریس تقویت شده با نانولوله کربن انجام شده است، نانولوله به صورت پیوسته مدل شده و بیشتر نسبت ضریب شدت تنش نانوکامپوزیت به ماتریس خالص ارائه گردیده است. تا پیش از این از روش چندمقیاسه به شیوه ای که در فصل ۳ توصیف می گردد، برای تحلیل ترک در مواد تقویت شده با نانولوله کربن استفاده نشده است.

شبیه سازی چندمقیاسه از مقیاس نانو به ماکرو یا برعکس، این ظرفیت را دارا می باشد تا کمک شایانی به تفهیم مکانیزم های چقرمگی کند [۵۱]. به طور کلی مدلسازی چند مقیاسه شامل دو فرایند کاملاً متفاوت می باشد. در روش اول از المان حجمی نمایشی^۶ یا سلول واحد^۷ به سوی ابعاد بالاتر می روند [۵۲-۵۴]، یعنی روش چند مقیاسه پایین به بالا^۸ یا مقیاس رو به بالا می باشد. روش دوم از مقیاس سازه ای شروع می شود و به سمت مقیاس های پایین تر می رود [۵۵]، یعنی روش چند مقیاسه بالا به پایین^۹ یا روش کلی-محلی^{۱۰} می باشد.

Cho^۱Tan^۲Discrete element method^۳Gawandi^۴Chan^۵Representative volume element (RVE)^۶Unit cell^۷Bottom-up multiscale^۸Top-down multiscale^۹Global-local method^{۱۰}