بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه بیرجند
دانشکده مهندسی

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک - طراحی کاربردی

شبیه سازی و بهینه سازی خواص مکانیکی نانو کامپوزیت‌ها با استفاده از الگوریتم های تکاملی

رضا اسماعیلی

استاد راهنما:
دکتر محمد رضا دشت بیاض

پاییز ۱۳۹۰

تأییدیه هیات داوران

(برای پایان‌نامه)

یک نسخه اصل فرم مربوطه

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

چکیده

امروزه نانو کامپوزیت ها کاربرد های وسیع و نوینی در بسیاری از عرصه های علمی و صنعتی دارند و از آنها به عنوان جایگزین های مناسب برای مواد مرکب سنتی می توان نام برد. خواص مکانیکی نانوکامپوزیتها متاثر از روش تولید و عناصر سازنده ی آنهاست. تولید و ساخت این نوع مواد با خواص مورد نیاز از اهمیت بالایی برخوردار است. تولید نانوکامپوزیتها منجر به صرف وقت و هزینه های هنگفت می شود. از این رو است که شبیه سازی رفتار فیزیکی و مکانیکی این مواد، قبل از ساخت آنها مورد توجه ویژه ای قرار گرفته است. امروزه یکی از پرکاربردترین روشهای شبیه سازی در علوم مهندسی، روش شبیه سازی دینامیک مولکولی است. در پروژه ی حاضر از این روش برای تعیین خواص مکانیکی (مدول یانگ، ضریب پواسون و مدول برشی) نانو کامپوزیت زمینه فلزی Al-SiC با درصدهای مختلف تقویت کننده استفاده شده است و سپس مدلی مناسب برای این خواص وابسته به درصد تقویت کننده ارائه گردیده است. نتایج حاصله از شبیه سازی مدل مذکور نشان می دهد که این مدل به مدل Voigt نزدیک می باشد که نشان دهنده بهبود خواص مکانیکی مواد نانوکامپوزیت در مقایسه با مواد کامپوزیت سنتی است. در نهایت درصد پیشنهادی بهینه با توجه به عواملی مانند خواص مکانیکی، وزن و قیمت ماده ی نانوکامپوزیت توسط الگوریتم ژنتیک محاسبه شده است. بر اساس نتایج بهینه سازی کسر حجمی بهینه تقویت کننده ۰/۴۴ می‌باشد که برای این کسر از سیلیکون کاربید مدول یانگ 165.9 GPa و مدول برشی 111.4 GPa خواهند بود, همچنین قیمت واحد وزن ماده 8.8$/lb و وزن واحد حجم آن 2.93 gr/cm^3 خواهند بود.

کلید واژه‌ها: خواص الاستیک، شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانوکامپوزیت، بهینه سازی، الگوریتم ژنتیک

فـهـرست مـطـالـب

عنوان **صفحه**

فهرست علایم و نشانه‌ها ..... ج
فهرست جدول‌ها ..... ه
فهرست شکل‌ها ..... و

فصل ۱- اهمیت و تعریف مسئله ۱
۱-۱- مقدمه ۲

فصل ۲- پیشینه تاریخی تحقیق : ۶

فصل ۳- روش تحقیق ۱۲
۳-۱- نانوکامپوزیت Al-SiC ۱۳
۳-۱-۱- ساختار بلوری ۱۴
۳-۱-۱-۱- ساختار بلوری FCC ۱۵
۳-۱-۱-۲- ساختار بلوری BCC ۱۵
۳-۱-۲- آلومینیوم ۱۶
۳-۱-۳- سیلیکون کارباید (SiC) ۱۶
۳-۲- شبیه سازی دینامیک مولکولی ۱۸
۳-۲-۱- مکانیک آماری ۱۸
۳-۲-۲- مکانیک کلاسیک ۲۰
۳-۲-۳- الگوریتم های انتگرال گیری ۲۳
۳-۲-۳-۱- الگوریتم Verlet ۲۳
۳-۲-۴- نیروهای بین اتمی ۲۴
۳-۲-۴-۱- پتانسیل EAM ۲۵
۳-۲-۴-۲- پتانسیل Tersoff ۲۵
۳-۲-۴-۳- پتانسیل Morse ۲۶
۳-۳- شبیه سازی ۲۸
۳-۳-۱- شبیه سازی آلومینیوم ۲۹
۳-۳-۲- شبیه سازی سیلیکون ۳۱
۳-۳-۳- شبیه سازی نانوکامپوزیت Al-SiC ۳۴
۳-۳-۴- مکان اولیه اتم‌ها و پتانسیل های بین اتمی ۳۶
۳-۳-۵- اجرای شبیه سازی و محاسبه ی ثوابت ۳۷
۳-۴- مدل سازی ۴۱
۳-۴-۱- مدل های Reuss و Voigt ۴۱
۳-۴-۲- مدل Halpin-Tsai ۴۲

۳-۴-۳- شبیه سازی مدل دینامیک مولکولی ۴۴
۳-۴-۴- مقایسه ی مدل مولکولی با نتایج تجربی در کار های دیگران ۴۸
۳-۵- بهینه سازی ۵۳
۳-۵-۱- تعریف مساله ۵۳
۳-۵-۲- الگوریتم ژنتیک ۵۵
۳-۵-۲-۱- انتخاب C ۵۸
۳-۵-۲-۲- تقاطع ۵۹
۳-۵-۲-۳- جهش ۶۰
۳-۵-۲-۴- تابع هزینه ۶۰
۳-۵-۳- نتایج بهینه سازی ۶۱
فصل ۴- نتیجه گیری و پیشنهادات ۷۰
۴-۱- نتیجه گیری ۷۱
۴-۲- پیشنهادات ۷۳
ضمیمه أ - برنامه ی اجرا شده در LAMMPS ۷۵
مراجع ۸۵
واژه نامه فارسی به انگلیسی ۹۰
واژه نامه انگلیسی به فارسی ۹۴

فـهـرست علایـم و نـشـانـه ها

عنوان	علامت اختصاری
نانو کامپوزیت زمینه آلومینیومی با تقویت کننده ی سیلیکون کرباید	Al-SiC
نانو کامپوزیت زمینه نیکلی با تقویت کننده ی نقره	Ni-Ag
جرم ذره ی i	m_i
سرعت ذره ی i	v_i
نیروی وارد بر ذره ی i	F_i
پتانسیل m-ذره ای	V_m
انرژی کلی اتم i	E_i
شعاع قطع	R
کسر حجمی زمینه	V_m
کسر حجمی تقویت کننده	V_f
اندازه حرکت (۳-۲-۲)	P
مدول یانگ	E
مدول برشی	G
وزن	W
قیمت (۳-۵)	P
ضریب پواسون	ν
کسر حجمی تقویت کننده	vf
مدول یانگ هدف	E_t
مدول برشی هدف	G_t
وزن هدف	W_t
قیمت هدف	P_t
خطا نسبت به هدف	C
احتمال انتخاب	P_i
برازندگی کروموزوم i (۳-۵)	F_i
هزینه ی کروموزوم i	C_i
ژن کروموزوم پدر	P_{nf}
ژن کروموزوم مادر	P_{mf}
ژن کروموزوم فرزند	P_{new}
یک عدد تصادفی بین ۰ و ۱ برای عملگر تقاطع	β
احتمال جهش	P_m

فـهـرست جـد و ل هـا

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۱ مختصات اتمهای پایه ی سیلیکون کارباید ۱۷
جدول ۳-۲ ثوابت ماتریس سختی آلومینیوم حاصل از شبیه سازی مولکولی به همراه مقادیر تجربی ۲۹
جدول ۳-۳ ثوابت ماتریس سختی سیلیکون حاصل از شبیه سازی مولکولی به همراه مقادیر تجربی ۳۲
جدول ۳-۴ جرم عناصر موجود در شبیه سازی ۳۶
جدول ۳-۵ پتانسیل های بین اتمی ۳۶
جدول ۳-۶ خواص آلومینیوم و سیلیکون کارباید خالص ۴۱
جدول ۳-۷ وزن و قیمت Al و SiC ۵۳
جدول ۳-۸ مقادیر اولیه ی E، G، W و P قبل از هم مرتبه سازی ۵۴
جدول ۳-۹ مقادیر بعد از هم مرتبه سازی ۵۵
جدول ۳-۱۰ پارامترهای الگوریتم ژنتیک ۶۰
جدول ۳-۱۱ نتایج نهایی الگوریتم ژنتیک ۶۹
جدول ۳-۱۲ خواص پیش بینی شده برای نانوکامپوزیت Al-%44SiC ۶۹

فـهـرست شـکـل هـا

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱ انواع مختلف مواد در مقیاس نانو [۱۱] ۴
شکل ۳-۱ ساختار FCC [۴۴] ۱۵
شکل ۳-۲ ساختار BCC [۴۴] ۱۶
شکل ۳-۳ ساختار بلوری سیلیکون کارباید 3c-SiC(β) ۱۷
شکل ۳-۴ پتانسیل و نیروی Morse [۳۹] ۲۷
شکل ۳-۵ نمونه آلومینیوم شبیه سازی شده به روش دینامیک مولکولی (تصاویر توسط نرم افزار VMD تولید شده اند). الف) نمای دو بعدی بلور ب) نمای سه بعدی بلور ۳۰
شکل ۳-۶ موقعیت اتم ها در ساختار الماس [۶۸] ۳۱
شکل ۳-۷ ارتفاع اتم های سیلیکون از پایین سلول واحد [۶۹] ۳۲
شکل ۳-۸ نمونه سیلیکون شبیه سازی شده به روش دینامیک مولکولی (تصاویر توسط نرم افزار VMD تولید شده اند). الف) نمای دو بعدی بلور ب) نمای سه بعدی بلور ۳۳
شکل ۳-۹ نانو کامپوزیت Al-10%SiC (تصاویر توسط نرم افزار VMD تولید شده اند). الف) نمای دو بعدی بلور ب) نمای سه بعدی بلور ۳۵
شکل ۳-۱۰ نحوه ی تغییر شکل های عمودی اعمال شده در سه راستای x، y و z بر نمونه نانوکامپوزیت ۳۷
شکل ۳-۱۱ نحوه ی تغییر شکل های برشی اعمال شده در سه صفحه ی xy، xz و yz بر نمونه ی نانوکامپوزیت ۳۸
شکل ۳-۱۲ پیش بینی تغییرات مدول الاستیک طولی E_c و مدول عرضی E_t کامپوزیت شیشه و رزین اپوکسی [۷۶] ۴۲
شکل ۳-۱۳ پیش بینی ثوابت ماتریس سختی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی در برابر تغییر کسر حجمی تقویت کننده SiC ۴۵
شکل ۳-۱۴ مقایسه ی مدول یانگ تخمین زده شده توسط شبیه سازی مولکولی با مدل های میکرومکانیکی Voigt، Reuss و Halpin-Tsai ۴۶
شکل ۳-۱۵ پیش بینی مدول برشی با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی و مقایسه ی آن با مدل های میکرومکانیکی ۴۷
شکل ۳-۱۶ پیش بینی ضریب پواسون با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی و مقآیسه آن با روش سنتی میکرومکانیکی ۴۸
شکل ۳-۱۷ مدول یانگ و مدول برشی Al-SiC به عنوان تابعی کسر حجمی SiC برگرفته از مرجع [۸۲] ۴۹

شکل ۳-۱۸ مقایسه ی مدول یانگ از مدل دینامیک مولکولی و مدل تجربی ارائه شده توسط مرجع [۸۲] ۵۰
شکل ۳-۱۹ مقایسه ی مدول برشی از مدل دینامیک مولکولی و مدل تجربی ارائه شده توسط مرجع [۸۲] ۵۰
شکل ۳-۲۰ مدول یانگ Al-SiC به عنوان تابعی کسر حجمی SiC بر گرفته از مرجع [۸۳] ۵۱
شکل ۳-۲۱ مقایسه ی مدول یانگ از مدل دینامیک مولکولی و مدل تجربی [۸۳] ۵۲
شکل ۳-۲۲ نمودار الگوریتم ژنتیک ۵۷
شکل ۳-۲۳ کروموزوم استفاده شده در بهینه سازی ۵۸
شکل ۳-۲۴ چرخ رولت ۵۹
شکل ۳-۲۵ بهترین اعضای هر نسل در صفحه E و P ۶۱
شکل ۳-۲۶ فرزندان تولید شده در صفحه E و P ۶۲
شکل ۳-۲۷ تمام اعضای جمعیت در صفحه E و P ۶۳
شکل ۳-۲۸ اعضای همه ی نسل ها در فضای E، G و W ۶۴
شکل ۳-۲۹ اعضای همه ی نسل ها در فضای E، G و P ۶۴
شکل ۳-۳۰ اعضای همه ی نسل ها در فضای E، W و P ۶۵
شکل ۳-۳۱ اعضای همه ی نسل ها در فضای G، W و P ۶۵
شکل ۳-۳۲ اعضای همه ی نسل ها در فضای C، G و E ۶۶
شکل ۳-۳۳ اعضای همه ی نسل ها در فضای C، P و W ۶۷
شکل ۳-۳۴ اعضای همه ی نسل ها در فضای C، P و E ۶۷
شکل ۳-۳۵ اعضای همه ی نسل ها در فضای C، W و G ۶۸
شکل ۳-۳۶ بهترین کروموزوم و کروموزوم دوم در هر نسل ۶۸

فصل اول:
اهمیت و تعریف مساله

۱-۱- مقدمه

علم نانوتکنولوژی به درک و کنترل ماده در سطوح اتمی، مولکولی و یا میکرومولکولی در ابعاد تقریبی ۱ تا ۱۰۰ نانومتر (10^{-9} m) گفته می شود. نانوتکنولوژی عبارت است از طراحی، شناخت ویژگیها، تولید و کاربرد ساختارها، ابزار و سیستم ها بوسیله کنترل شکل واندازه در مقیاس نانومتر [۱]. بر اساس گفته ی Braun و همکاران [۲] از دهه ی ۱۹۸۰، تعداد مقالات و تحقیقات شامل پیشوند نانو به صورت نمایی افزایش یافته است که یکی از مهمترین قسمتهای آن مدل کردن خواص مکانیکی نانو کامپوزیتها بوده است. نانوکامپوزیتها مواد مرکبی هستند که حداقل یکی از فازهای آنها در ابعاد نانومتر باشد.این مواد با غلبه بر محدودیتهای مواد مرکب ماکرو و مواد یکپارچه توانسته اند جایگزین های خوبی برای مواد صنعتی به حساب آیند اگر چه هنوز با محدودیتهایی در زمینه ساخت مواجه هستند.

از نانوکامپوزیتها به علت یگانگی طراحی و ترکیب خواصی که در مواد مرکب سنتی دیده نمی شود به عنوان مواد قرن ۲۱ یاد می شود [۳]. اگر چه اولین بار این مواد در سال ۱۹۹۲ معرفی شدند [٤]، درک عمومی از این مواد هنوز موضوع بحث وبررسی است [٥].

تعداد مقالات چاپ شده که حاوی کلماتی مانند علوم نانو، فناوری نانو، نانومواد، و غیره بودند، در عرض ۱/۶ سال در اواخر دهه ی ۱۹۹۰ دو برابر شد [۶]. همچنین، بررسی متون علمی[1] نوشته شده نشان می دهد که در حدود ۱۳۴۲۰ مقاله (که ۴۰۲۸ تای آنها حاوی کلمات کلیدی نانوکامپوزیت و پلیمر در سایت علمی ISI به روز رسانی شده در تاریخ ۱۰ فوریه ۲۰۰۹) درباره ی نانوکامپوزیتها در دو دهه گذشته (۱۹۸۸-۲۰۰۸) به چاپ رسیده است. به طور مشابه، اختراعات ثبت شده در زمینه ی نانوکامپوزیتها با سند کامل (بر اساس سایت www.scirus.com) در همان دوران حدود ۴۶۶۳ بوده است. علاوه بر این، کنفرانس های ویژه و نشریات اختصاصی از برخی از مجلات به طور انحصاری به علم در حال ظهور و تکنولوژی نانومواد اختصاص داده شده اند [۳].

با نزدیک شدن ابعاد به نانومتر، اثر متقابل درمحل تماس فازها بهبود چشمگیری پیدا کرده که منتهی به تقویت خواص مکانیکی ماده می شود [۳]. نانو کامپوزیتها را می توان به سه دسته تقسیم کرد:

۱- نانو کامپوزیتهای زمینه سرامیکی[2]
۲- نانو کامپوزیتهای زمینه فلزی[3]
۳- نانو کامپوزیتهای زمینه پلیمری[4]

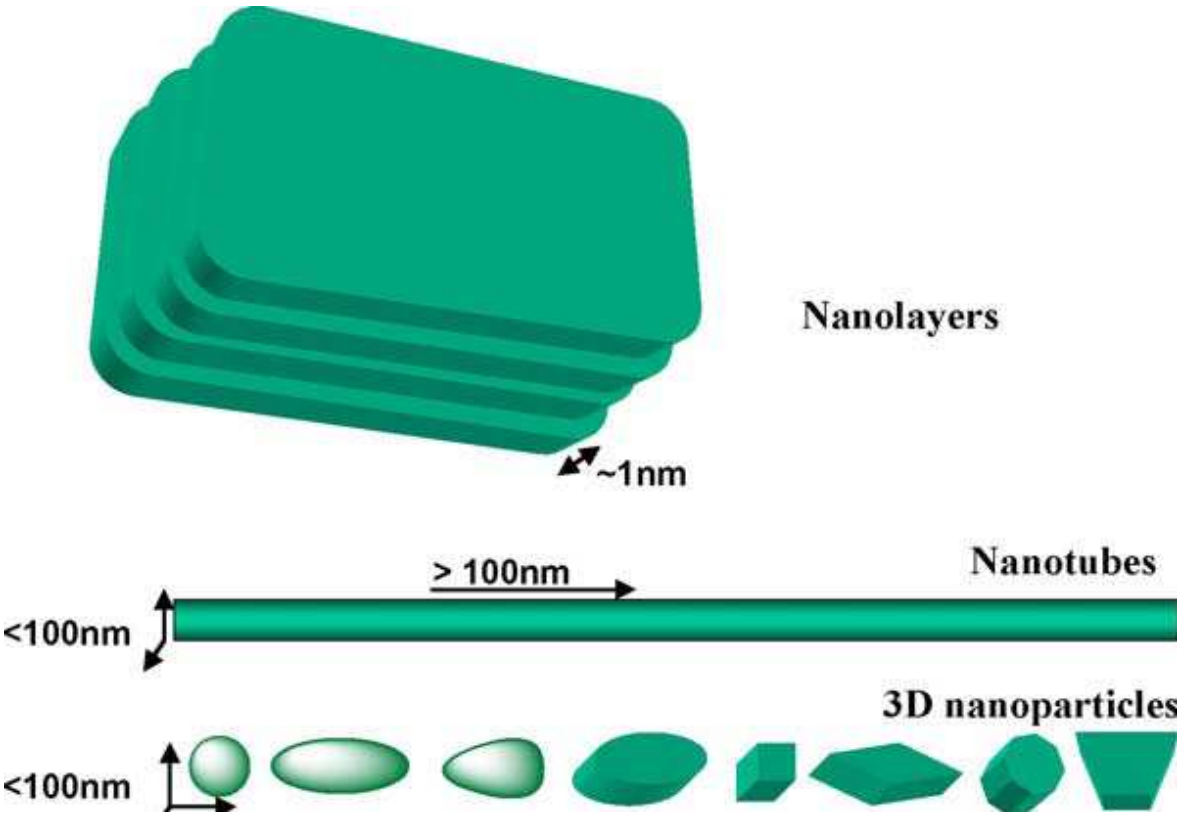
مواد نانوکامپوزیت تقویت شده با ذرات نانومتری سیلیکون کارباید به خاطر خواص مکانیکی عالی و قیمت ساخت مناسب مورد توجه ویژه قرار گرفته اند. افزودن سرامیک‌ها از جمله SiC به مواد زمینه فلزی موجب بهبود چشمگیر خواص مانند استحکام کششی، مدول الاستیک و مقاومت در برابر خزش می‌شود[۷و۸].

در تحقیق حاضر ماده ی مورد بررسی نانو کامپوزیت زمینه آلومینیومی (AL) تقویت شده با ذرات نانومتری سیلیکون کارباید (SiC) است. همان طور که اشاره شد ساخت این مواد کار آسانی نبوده و نیاز به صرف هزینه و زمان زیادی دارد و ساخت این مواد به منظور مطالعه ی رفتار فیزیکی و مکانیکی آنها مقرون به صرفه نمی باشد. بنابراین درک صحیح از ساختار این مواد و مدل کردن آنها قبل از ساخت از اهمیت ویژه ای برخوردار است و می تواند در کاهش هزینه ها و زمان و همچنین تطابق با نیازهای کاربردی این مواد نقش به سزایی داشته باشد. مدلهای تجربی و تحلیلی بسیاری برای خواص مکانیکی نانوکامپوزیتها ارائه شده است.

برای مدل کردن نانو کامپوزیتها دو روش عمده وجود دارد [۱]:

۱- استفاده از شبیه سازی المان محدود به روش پیوسته[5].
۲- استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی[6] به روش مستقیم

[1] Literature
[2] Ceramic Matrix Nanocomposites (CMNC)
[3] Metal Matrix Nanocomposites (MMNC)
[4] Polymer Matrix Nanocomposites (PMNC)
[5] Continuum Mechanics
[6] Molecular Dynamics Simulation (MD)



شکل ۱-۱ انواع مختلف مواد در مقیاس نانو [۹]

نانومواد از نظر هندسی در سه دسته طبقه بندی می شوند. همانطور که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است [۱۰]:

۱. نانوذرات[1]: زمانی که هر سه بعد ذرات در مرتبه ی نانومتر هستند، و از آنها به عنوان نانوذرات یا نانودانه ها[2] یا نانوبلور های[3] هم-بعد[4] نام برده می شود.

۲. نانولوله[5]: زمانی که دو بعد در مقیاس نانومتر هستند و بعد سوم بزرگتر است که تشکیل یک ساختار طویل می دهد. از آنها به طور کلی به عنوان "نانولوله" نانوالیاف[6]، ویسکرها[7] یا نانومیله[8] ها یاد می شود.

۳. نانو لایه ها[9]: ذراتی هستند که توسط تنها یک بعد در مقیاس نانومتری مشخص می شوند. به آنها نانو لایه ها، نانو صفحات یا نانو ورقه ها[10] گفته می شود. این ذرات در فرم های ورق با ضخامت یک نانومتر تا چند نانومتر تا صدها و یا هزاران نانومتر وجود دارند.

---

[1] Nanoparticles
[2] Nanogranules
[3] Nanocrystals
[4] Isodimensional (equi-axed)
[5] Nanotubes
[6] Nanofibers
[7] Whiskers
[8] Nanorods
[9] Nanolayers
[10] Nanosheets or Nanoplatelets

همچنین نانومواد می توانند از دیدگاه مسیر تولیدشان در سه نوع متمـایز طبیعـی[1]، اتفـاقی[2] و مهندسی[3] دسته بندی شوند [۹]. نانومواد طبیعی از طریق فرآیندهای طبیعی کـه در محـیط زیسـت رخ می دهد تشکیل می شوند (به عنوان مثال گرد و غبار آتشفشانی، باکتری های مغناطیسی، مواد معدنی، و غیره). نانومواد اتفاقی در نتیجه فرآیندهای صنعتی انسانی ساخته می شوند (به عنوان مثال احتراق زغال سنگ، گازهای جوشکاری، و غیره). نانومواد مهندسی از طریق خرد کردن نمونه های بزرگ به نانوذرات، یا توسط جمع آوری واحد های کوچکتر و رشد بلور و یا از طریق ترکیب های شـیمیایی تولیـد مـی شـوند. نانومواد مهندسی اغلب اشکال هندسی منظمی از قبیل لوله ها، کره ها، حلقه ها، و غیره دارند.

در کار حاضر از روش شبیه سازی مولکولی بـرای ارائـه مـدل بـرای نانوکامپوزیـت Al-SiC بـا درصدهای مختلف تقویت کننده استفاده شده است. شبیه سازی دینامیک مولکولی روشی است که با حل معادله حرکت نیوتن با در نظر گرفتن نیروها وپتانسیل های بین اتمی به بررسی وتعیین خواص فیزیکـی ومکانیکی ماده می پردازد [۱۱و۱۲]. در این روش اطلاعاتی از قبیل مکانهای اتمی، سرعتها و نیروها تولید می شود، که می توان از این اطلاعات برای تعیین خواص ماکروسـکوپیک مـاده توسـط مکانیـک آمـاری استفاده کرد [۱]. پس از پیش بینی خواص مکانیکی ماده نانو کامپوزیت (مـدول یانـگ و مـدول برشـی) برای درصدهای مختلف تقویت کننده مدلی ارائه شـده و بـا مـدل هـای سـنتی میکرومکـانیکی (Voigt، Reuss و Halpin-Tsai) مقایسه شده است. همچنین نتایج حاصل از مدل شبیه سازی دینامیک مولکولی با دو کار تجربی مقایسه شده است. سپس از مدل ارائه شده برای بدست آوردن درصد بهینه تقویت کننده با در نظر گرفتن قیمت، وزن و خواص مکانیکی ماده ی ساخته شده استفاده شده است. برای بهینه سازی از روش الگوریتم ژنتیک[4] استفاده شده است. الگوریتم ژنتیک یک روش جستجوی اکتشافی[5] است که بـا تقلید از فرآیند تکامل طبیعی به حل مسائل جستجو وبهینه سازی می پردازد.

[1] Natural
[2] Incidental
[3] Engineering
[4] Genetic Algorithms
[5] Heuristic Method

فصل دوم:
پیشینه تاریخی تحقیق

مواد در مقیاس نانو در سال های اخیر یک موضوع تحقیقاتی فعال شده اند. مطالعات تجربی و عددی نشان می دهد همانطور که اندازه ی دانه در چند بلوری ها[1] به مقیاس ۱۰ نانومتر نزدیک می شود، استحکام این مواد افزایش می یابد [۱۳]. بسیاری از مواد نانو بلوری تک فاز برای پیدا کردن درک صحیحی از مکانیزم های تغییر شکل در این مقیاس مورد مطالعه قرار گرفته اند. انجام آزمایش ها به منظور روشن کردن خواص مکانیکی نانو بلور دشوار است، زیرا بسیاری از فرآیندهای مورد استفاده برای ایجاد نانوبلور ها، به عنوان مثال ، رسوب الکتریکی[2] ، فقط قادر به ایجاد فیلمهایی با ضخامت 100 μm هستند که حاوی مقدار قابل توجهی ناخالصی است. با این حال، آزمایش ها بر روی نانو بلور با دانه هایی با اندازه های نزدیک به ۱۰ نانومتر افزایش زیادی در استحکام و کاهش نرمی[3] نشان می دهند [۱۴]. در اینجا سیستم های نانوکامپوزیتی، به عنوان مثال، سیستم های حاوی مخلوطی از دانه ها در مقیاس نانو از

[1] Polycrystals
[2] Electrodeposition
[3] Ductility

مواد مختلف مورد توجه است. نانوکامپوزیت ها می توانند در بهبود ثبات نانو مواد در مقابل رشد دانه[1] و خزش[2]، بهبود سفتی، بهبود خواص مکانیکی از قبیل سختی و مقاومت در برابر سایش مؤثر باشند.

روشهای زیادی برای مدل سازی واندازه گیری خواص مکانیکی نانو کامپوزیتها مورد استفاده واقع شده اند. روش تجربی نانو دندانه[3] در سالهای اخیر مورد توجه قرار گرفته و خواص مکانیکی مواد نانوکامپوزیتی مختلفی توسط این روش اندازه گیری شده است [۱۵و۱۶]. اگرچه کارایی مکانیک پیوسته برای نانو کامپوزیتها جای بحث و بررسی دارد، اخیرا کارهای زیادی با به کارگیری مستقیم مکانیک پیوسته برای نانومواد و نانوساختارها نتایج قابل قبولی ارائه داده اند [۱۷و۱۸]. از جمله این روشها می توان به مدل های میکرو مکانیکی Voigt، Reuss و Halpin-Tsai اشاره کرد که می توان برای هر گونه ماده ی مرکب دو فازی بدون در نظر گرفتن شکل تقویت کننده آنها را به کار برد. دو مدل اول در واقع حدود بالایی و پایینی مدول الاستیک ماده ی نانو کامپوزیت هستند و تنها سه پارامتر در آنها دخالت دارند، یعنی مدول های زمینه و تقویت کننده و کسر حجمی تقویت کننده. همچنین مدل Halpin-Tsai یکی دیگر از این مدل ها است که جواب های بهتری نسبت به دو مدل Reuss و Voigt ارائه می دهد. در بخشهای بعدی برای مقایسه به تشریح این سه مدل پرداخته می شود. مدل عددی روشهای اجزاء محدود[4] یکی از ابزارهای تحلیل عددی قوی میباشد که برای پیش بینی خواص مکانیکی مواد مرکب در اوئل دهه ی ۱۹۷۰ استفاده شد [۱۹و۲۰]. از آن موقع به بعد، روشهای اجزاء محدود مختلفی برای تعیین خواص انواع مختلف مواد توسعه داده شده اند [۲۱و۲۲و۲۳].

یکی از جدیدترین روشهای شبیه سازی، شبیه سازی دینامیک مولکولی است. در سالهای اخیر شبیه سازی مولکولی در پیش بینی خواص مکانیکی نانولوله های کربنی و کامپوزیتهای تقویت شده با نانولوله ها [۲۴و۲۵]، نانوکامپوزیت های گرافیت/اپوکسی [۲۶و۲۷] و نانوکامپوزیتهای دیگر [۲۸و۲۹] به وفور استفاده شده است.

Wen-Hwa.Chen و همکاران [۳۰] مجموعه ای کامل از خواص موثر یک نانوکامپوزیت ایزوتروپیک عرضی در کسرهای مختلف حجمی نانوفیبر را از طریق مدل سازی پیوسته و آزمایش تجربی مورد مطالعه و ارزیابی قرار داده اند. بررسی ها از محاسبه ی تئوری و تجربی خواص الاستیک فلز کبالت در مقیاس نانو با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی و تست نانودندانه شروع می شود. همچنین آنها برای تعیین خواص مکانیکی- حرارتی مواد نانوکامپوزیت، یک مدل پیوسته ی موثر بر اساس روش اجزاء محدود، معرفی کرده اند.

نانوکامپوزیت های پلیمری تقویت شده توسط نانولوله های کربنی دارای خواص جدیدی هستند که باعث مفید بودن آنها در طیف گسترده ای از کاربردها شده است و مطالعات بیشماری برای پیش بینی خواص کلی این نانوکامپوزیتها صورت گرفته است. مطالعات تئوری برای درک خواص این مواد نانولوله را در ابعاد نانومتر بررسی می کنند. J.N.Reddy و همکاران [۳۱] خواص مکانیکی نانولوله که در

[1] Grain Growth
[2] Creep
[3] Nanoindentation
[4] Finite Element Methods (FEM)