



اثر جدایش نانوذرات گرافن بر چقرمگی شکست مود I نانوکامپوزیت‌های پلیمری

الهام مرادی¹، محمدحسین یاس^{2*}، افشین زین‌الدینی³

1- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

3- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه

* کرمانشاه، صندوق پستی 14971-67144، yas@razi.ac.ir

چکیده

اطلاعات مقاله:

دریافت: 1402/05/11

پذیرش: 1402/07/08

کلیدواژگان

نانوذرات گرافن،

چقرمگی شکست،

نانوکامپوزیت،

مدل چند مقیاسی

یکی از مهم‌ترین کاربردهای نانومواد در رزین‌های پلیمری، دستیابی به چقرمگی شکست بالا حتی در کسرهای حجمی کم از نانوذرات پرکننده است. چنین عملکردی مربوط به انرژی آزاد شده از طریق مکانیزم‌های آسیب است که در مقیاس نانو رخ می‌دهد. در بین این مکانیزم‌ها جدایش سطحی نانوذره اهمیت بیشتری دارد. در کار حاضر باتوجه به ساختار سلسله مراتبی نانوکامپوزیت‌ها، سعی شده است که با استفاده از روش چندمقیاسی اثر جدایش نانوذرات گرافن از رزین اطراف آن بر چقرمگی شکست مود اول نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن مورد بررسی قرار گیرد. از این رو یک المان حجمی نماینده انتخاب شده است و با استفاده از داده‌های موجود در کارهای تجربی سایر محققین، اثر چندین پارامتر مانند مدول یانگ، کسر وزنی و ابعاد نانوذرات مورد بررسی قرار گرفت. در نهایت مشاهده شد که چقرمگی شکست با مدول یانگ نانوکامپوزیت نسبت مستقیم دارد همچنین هر چقدر ابعاد نانوذرات بکار رفته کوچک‌تر باشد، بهبود در چقرمگی شکست بیشتر خواهد بود.

Effect of GNPs debonding on mode I fracture toughness of polymeric nanocomposites

Elham Moradi¹, Mohammad Hossein Yas^{1*}, Afshin Zeinedini²

1- Department of Mechanical Engineering, Razi University, Kermanshah, Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran

* P.O.B. 67144-14971, Kermanshah, Iran, yas@razi.ac.ir

Keywords

Graphene nanoparticles,
Fracture toughness,
Nano composite,
Multiscale model.

Abstract

One of the most important applications of nanomaterials in polymer resins is to achieve high fracture toughness even in small volume fractions of filler nanoparticles. Such performance is related to energy released through damage mechanisms that occur at the nano scale. Among these mechanisms, nanoparticle surface separation is more important. In the present work, considering the hierarchical structure of nanocomposites, it has been tried to investigate the effect of debonding of graphene nanoparticles from the surrounding resin on the fracture toughness of the first mode of the presented epoxy/graphene nanocomposite using a multi-scale method. Therefore, a representative volume element has been selected and using the data available in the experimental works of other researchers, the effect of several parameters such as Young's modulus, weight fraction and dimensions of nanographene was investigated. Finally, it was observed that the fracture toughness has a direct relationship with the Young's modulus of the nanocomposite. Also, the smaller the dimensions of the nanoparticles used, the greater the improvement in the fracture toughness.

1- مقدمه

به همین دلیل از انواع مختلفی از پرکننده‌ها با ابعاد و خواص گوناگون جهت افزایش چقرمگی شکست پلیمرها استفاده می‌شود [2,3]. در بین این ذرات ساختارهای گرافنی به عنوان نازک‌ترین و یکی از مستحکم‌ترین مواد موجود در طبیعت، با داشتن خواص مکانیکی، شیمیایی و الکتریکی منحصر به فرد، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده‌اند [4,5]. استحکام و سفتی بسیار بالای گرافن این ایده را ایجاد کرده است که می‌توان از این نانوذرات به عنوان تقویت‌کننده در مواد پلیمری استفاده کرد. در این راستا مطالعات

افزایش نیاز به مواد بادوام و سبک، باعث استفاده روزافزون از مواد کامپوزیتی در صنعت گردیده است. در این میان کامپوزیت‌های پلیمری با خواص جالب توجه خود، نقش مهمی را در پیشرفت تکنولوژی دارند. این مواد علیرغم داشتن ویژگی‌های منحصر بفرد، دارای ضعف‌هایی نیز هستند [1]. از آنجایی که اکثر رزین‌های گرماسخت شکننده هستند، مقاومت کمی در برابر رشد ترک دارند.

Please cite this article using:

برای ارجاع به مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Moradi, E., Yas, M. H., Zeinedini, A., "Effect of GNPs debonding on mode I fracture toughness of polymeric nanocomposites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 10, No. 2, pp. 2233-2241, 2023. <https://doi.org/10.22068/JSTC.2023.2008325.1848>

2- ارتباط بین فضاهای ماکرو، میکرو و نانو

از آنجایی که در این تحقیق، با مقیاس‌های طولی نانو و ماکرو سروکار داریم لذا لازم است که ارتباطی منطقی بین این فضاها برقرار گردد. بدین منظور از روابط میکرومکانیک بهره گرفته شده است که در سال‌های اخیر برای نانوذرات نیز بکار گرفته شده‌اند [8-11].

مدل‌های میکرومکانیکی زیادی برای پیش‌بینی رفتار کامپوزیت‌های دارای الیاف کوتاه ارائه شده است. هرکدام از این روش‌ها دارای مزایا و معایبی هستند. هر مدل باتوجه به محدوده بکارگیری و شرایط حاکم بر مسئله و تحت تأثیر مواد سازنده ترکیب مورد نظر، پاسخ‌های متفاوتی را ایجاد می‌کند که در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی، می‌توان صحت یک مدل و برتری آن را مشخص کرد. این مدل‌ها عبارتند از مدل رقیق مبتنی بر ناهمگنی معادل اشبلی، مدل خودسازگار، مدل‌های موری-تاناکا، مدل‌های کراندار، معادله هالپین-تسای و معادلات توسعه یافته آن [12-14].

3- مشخصات مکانیکی متوسط و تنسور سفتی

در میکرومکانیک، معادلات ساختاری برای الیاف و زمینه بصورت زیر ارائه می‌شوند [15].

$$\begin{cases} \sigma^f = C^f \varepsilon^f \\ \sigma^m = C^m \varepsilon^m \end{cases} \quad (1)$$

که C^f ، C^m ، σ^f ، σ^m ، ε^f و ε^m به ترتیب تانسورهای سفتی الیاف و زمینه، تنش‌های به وجود آمده در الیاف و زمینه و کرنش در الیاف و زمینه است.

هنگامی که یک ماده مرکب تحت بار باشد، میدان تنش نقطه‌ای $\sigma(x)$ و میدان کرنش متناظر آن $\varepsilon(x)$ در مقیاس میکرو غیریکنواخت خواهند بود. تنش متوسط $\bar{\sigma}$ بعنوان میانگین تنش نقطه‌ای در حجم مفروض V بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V} \int_V \sigma(x) dV \quad (2)$$

از تنسور سفتی، می‌توان کرنش متوسط را به تنش متوسط مرتبط کرد، بنابراین خواهیم داشت:

$$\bar{\sigma} = C \bar{\varepsilon} \quad (3)$$

بنابر مفهوم ارائه شده توسط هیل [16] یک نسبت مشخص میان تنش متوسط الیاف و مقدار متناظر متوسط کامپوزیت وجود دارد:

$$\bar{\sigma}^f = H \bar{\sigma} \quad (4)$$

که H تنسور تمرکز تنش مرتبه چهار می‌باشد و باید آن را باتوجه به حل میدان‌های ماکروسکوپی تنش تعیین کرد [8].

4- مدل اشبلی رقیق

طبق مدل اشبلی رقیق [17] برای کامپوزیت‌های رقیق (کسر حجمی خیلی کم برای تقویت کننده) تنش متوسط در مقیاس میکرو برابر است با تنش اعمالی در مقیاس ماکرو:

$$\bar{\sigma} = \sigma^A \quad (5)$$

تجربی زیادی صورت گرفته است که همگی با صرف هزینه و زمان زیاد انجام شده است. از این رو بسیاری از محققین به منظور بررسی رفتار این نوع مواد، روش‌های محاسباتی و تحلیلی را انتخاب کرده‌اند. روش‌های محاسباتی می‌توانند عوامل مؤثر بر خواص نانوکامپوزیت‌ها را با کمترین هزینه و کوتاه‌ترین زمان شناسایی کرده و راه‌حلی برای بهبود عملکرد آن‌ها پیشنهاد کنند.

یکی از روش‌های مرسوم برای بررسی خواص نانوکامپوزیت‌ها روش چند مقیاسی سلسله مراتبی نام دارد. در این روش خواص نانوکامپوزیت در هر مقیاس با مدل مناسب همان مقیاس محاسبه می‌شود. به این ترتیب می‌توان از خواص نانوذرات و ماتریس به خواص نانوکامپوزیت در مقیاس کلان دست یافت [6]. بر این اساس، چقرمگی شکست نانوکامپوزیت را می‌توان بصورت جمع چقرمگی شکست ماتریس بدون بار (G_{Im}) و بهبود چقرمگی شکست بر اثر هر مکانیزم آسیب (ΔG_i) نوشت [7].

شکریه و زین‌الدینی [8] اثر جدا شدن نانولوله‌های کربنی¹ از ماتریس اطراف را بر چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌های اپوکسی/نانولوله‌های کربنی بررسی کردند. به‌منظور ارائه یک مدل چند مقیاسه، یک المان حجمی نماینده شامل نانولوله کربنی، رزین اطراف آن و فاز میانی انتخاب کردند. آن‌ها با استفاده از داده‌های تجربی موجود در ادبیات، تأثیر چندین پارامتر مانند کسر وزنی نانولوله کربنی، ضخامت فاز میانی و مدول یانگ را بررسی کردند. در نهایت به این نتیجه رسیدند که ویژگی‌های فاز میانی و همچنین کسر وزنی نانولوله کربنی به شدت بر افزایش چقرمگی شکست ناشی از مکانیزم جداسازی و تنش جداسازی در اطراف نانولوله تأثیر می‌گذارد. کوارسیمین و همکاران [9] یک استراتژی مدل‌سازی مکانیزم چند مقیاسی برای پیش‌بینی افزایش چقرمگی به دلیل ظهور پدیده‌های جداشدگی، تسلیم پلاستیک و نوارهای برشی پلاستیکی موضعی در رزین‌های پر شده با نانوذرات ارائه کردند. این مدل با حجم زیادی از داده‌های تجربی جمع‌آوری شده از ادبیات مقایسه شده است که توافق خوبی را نشان می‌دهد. شین [10] یک مدل چند مقیاسی برای پیش‌بینی چقرمگی شکست نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی، پیشنهاد داد. در این مدل اثر مکانیزم‌های تخریب مختلف (جداسازی سطحی، تسلیم پلاستیک نانوحفره‌ها و بیرون کشیدگی نانولوله‌های کربنی) بررسی شده است. همچنین میزان اثربخشی مکانیزم‌های مختلف باید دیگر مقایسه شد و مشاهده شد که مکانیزم‌های تسلیم پلاستیک نانوحفره‌ها و بیرون کشیدگی نانولوله اثر بیشتری را در این تحقیق داشته است. نتایج پیش‌بینی شده با داده‌های تجربی مطابقت مطلوبی را نشان داده است.

در مقاله حاضر مدلی برای شبیه‌سازی بهبود چقرمگی شکست به دلیل مکانیزم جدا شدن نانوذرات گرافن² از رزین اطرافش که مهم‌ترین مکانیزم تخریب در اطراف ترک است، تحت بارگذاری شکست مود اول³ پیشنهاد شده است. برای دستیابی به این هدف، یک مدل چند مقیاسی بر اساس روابط بین میدان‌های تنش و جابجایی در مقیاس‌های کلان، خرد و نانو ارائه شد. یک المان حجمی نماینده⁴ شامل یک نانوذره گرافنی و یک فاز پلیمری خالص در نظر گرفته شد. چقرمگی شکست نرمالایز شده به عنوان تابعی از برخی پارامترها از جمله کسر وزنی و ابعاد نانوذرات بیان شد. در نهایت، مقادیر چقرمگی شکست در کار حاضر با کار تجربی سایر محققین مقایسه شد و نتایج قابل قبولی مشاهده شد.

Carbon nanotube (CNT)¹
Graphene nanoparticle (GNP)²
First mode (I)³
Representative volume element (RVE)⁴

شود) البته با اعمال شرایط مرزی، جهت در نظر گرفتن اثرات مواد اطراف آن (این مدل می‌تواند برای مطالعه اثرات متقابل نانوذره با زمینه، بررسی تنش‌های فاز واسطه، یا ارزیابی و برآورد خواص نانوکامپوزیت به کار گرفته شود. به هر حال تا زمانی که نانوذره از نظر طولی کوتاه باشد، بهتر است از المان حجمی سه بعدی برای شبیه‌سازی نانوکامپوزیت‌ها استفاده شود [22,21].

در تحقیق حاضر، یک المان حجمی مکعب مستطیلی شکل، شامل یک نانو گرافن احاطه شده توسط رزین خالص به منظور بررسی افزایش چقرمگی شکست ناشی از مکانیزم جدایش نانوذرات از ماتریس اطرافش در نظر گرفته شده است.

7- افزایش چقرمگی شکست

در این بخش مدلی برای بررسی اثر جدایش نانوذرات گرافن در منطقه فرآیند جداسازی¹ بر چقرمگی شکست نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن پیشنهاد شده است.

چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌ها $G_{Ic,nc}$ را می‌توان به عنوان مجموع چقرمگی شکست اپوکسی خالص $G_{Ic,m}$ و افزایش چقرمگی شکست ناشی از مکانیزم‌های مختلف $G_i\Delta$ بیان کرد [23,14,8].

$$G_{Ic,nc} = G_{Ic,m} + \Delta G_i \quad (7)$$

در این تحقیق بهبود چقرمگی شکست از طریق جداسازی نانوذره گرافن از رزین اطراف با در نظر گرفتن توزیع یکنواخت نانوغرافن‌ها در ماتریس و صرف نظر کردن از اثر فاز میانی، تعیین می‌شود. به منظور تعیین افزایش چقرمگی شکست ΔG_i ناشی از جدا شدن نانوذرات گرافن از رزین اطراف، طبق [23,22]، از رابطه زیر استفاده شده است:

$$\Delta G_{db} = 2 \int_0^{\rho^*(\theta=\pi/2)} w_{db} d\rho \quad (8)$$

ρ^* شعاع در $\theta = \pi/2$ است و w_{db} چگالی انرژی کرنشی در المان حجمی ناشی از مکانیزم‌های تخریب می‌باشد که بصورت زیر بدست می‌آید:

$$w_{db} = \Delta U_{db} \frac{V_f}{\pi t_n^2 l_n} \quad (9)$$

که ΔU_{db} انرژی کرنشی ناشی از پدیده جدایش و V_f ، t_n و l_n به ترتیب کسر حجمی، میانگین ضخامت و میانگین طول نانوذرات هستند. با توجه به پدیده جداسازی، تنش‌های عرضی باعث جدا شدن نانوذرات از فازهای اطراف می‌شود. برطبق [8] رابطه بین تنش عرضی و میدان تنش ماکروسکوپی نانوکامپوزیت‌ها را می‌توان با استفاده از رابطه (10) بیان کرد:

$$\sigma_{yy} = \frac{\alpha\sigma_{11} + \beta\sigma_{22} + \gamma\sigma_{33}}{3} \quad (10)$$

σ_{11} ، σ_{22} و σ_{33} تنش‌های اصلی در مقیاس ماکرو هستند و می‌توان آن‌ها را در فاصله ρ از نوک ترک با زاویه θ محاسبه کرد:

بطوریکه σ^A تنش اعمالی در بی‌نهایت است. در پایان، با ترکیب روابط (4) و (5) می‌توان تنش در اطراف تقویت کننده را بصورت زیر استخراج نمود:

$$\bar{\sigma}_n = H\sigma^A \quad (6)$$

شکل (1) ارتباط بین مقیاس‌های طولی مختلف در فضای اطراف پیرامون ترک در نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذرات گرافن را نشان می‌دهد.

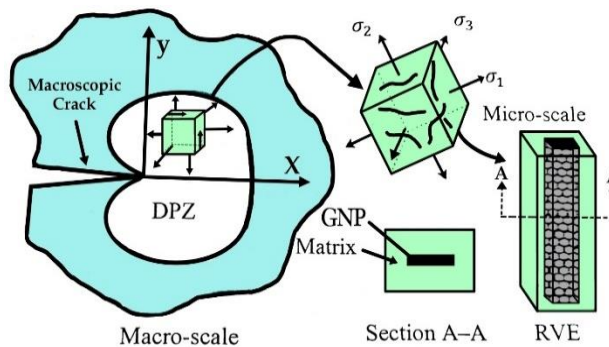


Fig. 1 Description of different scales

شکل 1 توصیف مقیاس‌های مختلف

5- مکانیزم‌های تخریب در نانوکامپوزیت‌ها

یکی از ویژگی‌های مهم در ساختارهای نانویی بر پایه پلیمر، بدست آوردن چقرمگی زیاد حتی در بخش کم حجم یعنی نانوذرات پرکننده است. چنین عملکردی با انرژی تلف شده از طریق مکانیزم‌های تخریب در مقیاس نانو مرتبط هستند.

مکانیزم‌های تخریب به شرح زیر است [19,18]:

جدایش سطح تماس: مهم‌ترین مکانیزم تخریب است که در محدوده بار که اصطلاحاً بار بحرانی گفته می‌شود نانوذره از ماتریس جدا می‌شود. نانوحفره‌های پلاستیکی: جدایش در سطح تماس باعث به وجود آمدن نانو حفره‌هایی با قطر اولیه نانوذرات می‌شود. که هرچقدر تنش موضعی در سطح نانو حفره زیاد شود، احتمال تسلیم نیز بالا می‌رود. اتصال برشی موضعی: در منطقه آسیب دیده نزدیک به نوک ترک میزان تنش اطراف نانوذرات ممکن است با تشکیل باندهای برشی پلاستیکی کمتر یا بیشتر، عملکرد برشی موضعی را افزایش دهد.

در این میان جدایش سطحی نانوذرات می‌تواند نقش مهمی را به‌عنوان یک مکانیزم یا به‌عنوان راه‌انداز برای پدیده‌هایی مانند رشد حلال پلاستیک یا تسلیم برشی ماتریس ایفا کند [20]. در کار حاضر مدلی برای تنش هیدرواستاتیک مرتبط به جدایش سطحی ارائه شده است.

6- المان حجمی نماینده

نانوصفحات گرافن هنگامی که در زمینه، جهت تهیه نانوکامپوزیت‌ها پخش می‌شوند، می‌توانند در شکل‌ها و اندازه‌های مختلفی باشند. آن‌ها می‌توانند تک لایه و یا چند لایه، با طول چند نانومتر تا چندین میکرون باشند. جهت‌گیری آن‌ها در زمینه می‌تواند چندین جهت یا تصادفی باشد. تمامی این فاکتورها، شبیه‌سازی پاسخ‌های مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها را پیچیده می‌کند. بنابراین، محققین به دنبال این بوده‌اند که یک بخش از نانوکامپوزیت را به عنوان سلول‌های واحد یا المان‌های حجمی نماینده، برای مطالعه نانوکامپوزیت‌ها در نظر بگیرند. در روش سلول واحد یک نانوذره با ماتریس اطراف آن مدل می‌-

$$\Delta G_{db} = \lambda V_f \Delta U_{db} G_{Ic,nc} \quad (20)$$

بطوریکه

$$\lambda = \frac{8H^2 E_{nc}}{9\pi^2 \sigma_{cr}^2 t_n^2 l_n} \frac{f}{1 - v_{nc}^2} \quad (21)$$

8- انرژی کرنشی ناشی از جدایش

در این بخش، انرژی کرنش ناشی از جدا شدن یک نانوذره از فاز میانی اطراف (u) تخمین زده می‌شود. با توجه به [24,8]، این مقدار از رابطه (22) مشخص می‌شود:

$$\Delta U_{db} = \frac{1}{2} P (u_2 - u_1) \quad (22)$$

u₁ و u₂ به ترتیب به عنوان جابجایی سطح بیرونی فاز ماتریس خالص در امتداد جهت عرضی Y بعد و قبل از جداسازی نانوذره تعریف می‌شوند. علاوه بر این، نیروی اعمال شده بر روی سطح خارجی فاز ماتریس خالص است و از طریق رابطه (23) بدست می‌آید:

$$P = L_g W_{nc} \bar{\sigma}_{yy} \quad (23)$$

بنابراین، میدان جابجایی المان حجمی در دو شرایط مختلف، قبل از جداسازی و پس از جداسازی باید تجزیه و تحلیل شوند.

9- تحلیل میدان جابجایی قبل از جداسازی نانوذره گرافن

در این بخش، مدل جدیدی برای بررسی اثر جداسازی نانوذرات گرافن از رزین اطراف پیشنهاد شده است. جابجایی در یک سیستم مختصات دکارتی (قبل از فرآیند جداسازی برای (n) نانوغرافن و (m) ماتریس) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$u_n^b = \frac{1}{E_n} [\sigma_{y,n}^b - v_n (\sigma_{x,n}^b + \sigma_{z,n}^b)] y_n^b + A^b \quad (24)$$

$$u_m^b = \frac{1}{E_m} [\sigma_{y,m}^b - v_m (\sigma_{x,m}^b + \sigma_{z,m}^b)] y_m^b + B^b \quad (25)$$

که A^b و B^b ضرایب ثابت قبل از جدایش هستند. جداسازی زمانی اتفاق می‌افتد که تنش در اطراف نانوغرافن به یک مقدار بحرانی σ_{cr} برسد که در شکل (2) مشاهده می‌شود. این شکل به طور شماتیک فشار اعمال شده بر نانوغرافن و اجزای اطراف آن را قبل و بعد از جداسازی نشان می‌دهد. بنابراین شرایط مرزی و پیوستگی جابجایی‌ها را در شروع جداسازی نانوغرافن می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\sigma_{y,n}^b|_{y_1} = \sigma_{cr}, \sigma_{y,m}^b|_{y_1} = \sigma_{cr}, \sigma_{y,m}^b|_{y_2} = \sigma_n \quad (26)$$

$$u_n^b|_{y_0} = 0, u_n^b|_{y_1} = u_m^b|_{y_1} \quad (27)$$

بطوریکه

$$y_1 = \frac{t_g}{2}, y_2 = \frac{t_g}{2} + t_m \quad (28)$$

درحالی که t_g و t_m به ترتیب ضخامت نانوغرافن و ضخامت ماتریس در راستای جداسازی هستند.

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \left(\frac{K_{I,nc}}{\sqrt{2\pi\rho}} \right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \\ \left(\frac{K_{I,nc}}{\sqrt{2\pi\rho}} \right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \\ v_{nc}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \end{Bmatrix} \quad (11)$$

که ρ و v_{nc} به ترتیب نسبت پواسون نانوکامپوزیت و فاصله شعاعی از نوک ترک می‌باشند. با جایگذاری معادله (11) در معادله (10) رابطه بین تنش عرضی در مقیاس ماکرو برحسب فاکتور شدت تنش و پارامترهای دیگر بدست می‌آید.

$$\sigma_{yy} = \frac{K_{I,nc}}{3\sqrt{2\pi\rho}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left\{ \alpha \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \beta \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + 2\gamma v_{nc} \right\} \quad (12)$$

بنابراین تنش عرضی در اطراف نانوذره را می‌توان بصورت زیر تعیین کرد:

$$\sigma_{yy} = H \bar{\sigma}_{yy} \quad (13)$$

H تنسور تمرکز تنش است و $\bar{\sigma}_{yy}$ تنش عرضی متوسط در منطقه فرآیند جداسازی می‌باشد. در نتیجه با استفاده از معادله (12) خواهیم داشت:

$$\bar{\sigma}_{yy} = \frac{1}{\rho^*} \int_0^{\rho^*} \sigma_{yy} d\rho = 2\sigma_{yy}(\rho^*) \quad (14)$$

با جایگذاری معادله (12) و (14) در معادله (13)، مؤلفه تنش عرضی را در همسایگی نانوذره از طریق زیر بدست آورد:

$$\sigma_{yy,n} = \frac{2HK_{I,nc}}{3\sqrt{2\pi\rho}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left\{ \alpha \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \beta \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + 2\gamma v_{nc} \right\} \quad (15)$$

بنابراین، شعاع المان نوک ترک بدین صورت بدست می‌آید:

$$\rho = \frac{4HK_{I,nc}^2}{9\pi\sigma_{yy}^2} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \left\{ \alpha \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \beta \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + 2\gamma v_{nc} \right\}^2 \quad (16)$$

در شروع ترک، شعاع المان نوک ترک را می‌توان بصورت زیر بیان کرد [9]:

$$\rho^* = \frac{4HK_{I,nc}^2}{9\pi\sigma_{cr}^2} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \left\{ \alpha \left[1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \beta \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + 2\gamma v_{nc} \right\}^2 \quad (17)$$

σ_{cr} تنش بحرانی در مقیاس نانو است که عامل جداشدن نانوذرات از رزین اطراف است. سپس خواهیم داشت:

$$G_{Ic,nc} = \frac{K_{Ic,nc}^2 (1 - v_{nc}^2)}{E_{nc}} \quad (18)$$

با معادلات (16) و (18)، افزایش چقرمگی شکست ناشی از مکانیزم‌های تخریب برابر است با:

$$\Delta G_i = \frac{8H^2 E_{nc}}{9\pi^2 \sigma_{cr}^2 t_n^2 l_n} \frac{f}{1 - v_{nc}^2} V_f \Delta U_i G_{Ic,nc} \quad (19)$$

که در این رابطه f فاکتور محاسبه شده بر طبق [14,8] است. E_{nc} مدول ینگ نانوکامپوزیت است.

همانطور که از معادلات بالا مشخص است، بهبود چقرمگی شکست ناشی از جداسازی نانوذرات گرافن را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

11- تانسور تمرکز تنش H

تانسور تمرکز تنش برطبق [8] برابر است با:

$$H = \frac{\sigma_{cr}}{\sigma_{yy}} \quad (39)$$

از طرفی تنش متوسط راستای جدایش را می‌توان بصورت زیر بدست آورد:

$$\bar{\sigma}_{yy} = E_{nc} \frac{u^a - u^b}{y_2} = E_{nc} \frac{B^a - B^b}{y_2} \quad (40)$$

با در نظر گرفتن معادلات (39) و (40)، تانسور تمرکز تنش را می‌توان به عنوان تابعی از خواص مکانیکی و ضخامت‌های نانوذره و ماتریس بازنویسی کرد:

$$H = \frac{\sigma_{cr}}{E_{nc} \frac{B^a - B^b}{y_2}} = \frac{1}{E_{nc} \left(\frac{f_a - f_b}{y_2} \right)} \quad (41)$$

که با توجه به روابط (30) و (37) می‌توان مقدار H را تعیین نمود.

12- تنش بحرانی در مقیاس نانو σ_{cr}

در این بخش، تنش بحرانی در مقیاس نانو تعیین می‌گردد. انرژی کرنشی ناشی از پدیده جدایش ΔU_{db} منجر به ایجاد یک سطح جدید به مساحت $2Lg(t_g + Lg)$ می‌گردد. بنابراین انرژی شکست بر واحد سطح با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$\gamma_i = \frac{\Delta U_{bd}}{2Lg(t_g + Lg)} \quad (42)$$

با جایگذاری معادلات (29)، (30)، (36) و (37) در معادله (42) بدست می‌آید:

$$\gamma_i = \frac{\bar{\sigma}_{yy} \sigma_{cr}}{2} (f_a - f_b) \quad (43)$$

با جایگذاری ثوابت در معادله فوق و باتوجه به رابطه (40)، تنش بحرانی در مقیاس نانو بصورت زیر بدست می‌آید:

$$\sigma_{cr} = 2 \sqrt{\frac{\gamma_i H \left(\frac{t_g}{2} + \frac{Lm}{2} \right)}{(f_a - f_b)(t_g + 2Lm)}} \quad (44)$$

در رابطه فوق مقدار انرژی شکست مجهول است. مقدار این پارامتر مطابق با رابطه ارائه شده توسط جیانگ و همکاران [26] قابل محاسبه است.

$$\gamma_i = \frac{4\pi}{9} \sqrt{\frac{5}{2}} \rho_p \rho_g \epsilon \sigma^3 \quad (45)$$

که ρ_p چگالی جرمی پلیمر و ρ_g چگالی سطحی نانوذره است. همچنین، ϵ و σ پارامترهای لنارد جونز هستند که برای نانوکامپوزیت‌های اپوکسی تقویت‌شده با نانوذرات گرافن برابر 0.06831 kcal/mol و 0.33997 nm هستند [27].

13- کسر حجمی نانوذرات گرافن در نانوکامپوزیت

کسر حجمی نانوذرات در نانوکامپوزیت‌ها با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود [28]:

$$V_{fn} = \frac{W_{fn}}{W_{fn} + \left(\frac{\rho_n}{\rho_m} \right) - \left(\frac{\rho_n}{\rho_m} \right) W_{fn}} \quad (46)$$

با اعمال شرایط مرزی و نیز جابجایی‌ها، می‌توان تمام ضرایب مجهول را تعیین کرد. همچنین B^b را می‌توان به عنوان تابعی از تنش بحرانی و نیز خواص نانوغرافن و رزین خالص نوشت.

$$A^b = 0 \quad (29)$$

$$B^b = f_b(E_n, E_m, \nu_n, \nu_m, \gamma_n) \cdot \sigma_{cr} \quad (30)$$

در نتیجه جابجایی سطح بیرونی RVE با استفاده از رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$u_m^b|_{y_2} = \frac{\sigma_h}{E_m} (1 - 2\nu_m) \left(\frac{t_g}{2} + \frac{Lm}{2} \right) + \frac{\sigma_{cr} t_g}{2} \left[\frac{1}{E_n} (1 - 2\nu_n) - \frac{1}{E_m} (1 - 2\nu_m) \right] \quad (31)$$

10- تحلیل میدان جابجایی پس از جداسازی نانوذره گرافن

پس از جداسازی نانوغرافن، معادله حاکم برای جابجایی در سیستم مختصات دکارتی بصورت زیر بیان می‌شود:

$$u_n^a = \frac{1}{E_n} [\sigma_{y,n}^a - \nu_n (\sigma_{x,n}^a + \sigma_{z,n}^a)] y_n^a + A^a \quad (32)$$

$$u_m^a = \frac{1}{E_m} [\sigma_{y,m}^a - \nu_m (\sigma_{x,m}^a + \sigma_{z,m}^a)] y_m^a + B^a \quad (33)$$

که A^b و B^b ضرایب ثابت قبل از جدایش هستند. در این حالت تنش اعمال شده بین ماتریس و نانوغرافن برابر با صفر خواهد شد. در حالی که تنش در سطح خارجی ماتریس برابر σ_h می‌باشد. بنابراین شرایط تعادل و سازگاری را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$\sigma_{y,n}^a|_{y_1} = 0, \sigma_{y,m}^a|_{y_1} = 0, \sigma_{y,m}^a|_{y_2} = \bar{\sigma}_{yy} \quad (34)$$

$$u_n^a|_{y_0} = 0, u_m^a|_{y_1} = \alpha u_m^b|_{y_1} \quad (35)$$

ضرایب مجهول را می‌توان با بکارگیری شرایط مرزی و جابجایی در معادلات (32) و (33) بدست آورد.

$$A = 0 \quad (36)$$

$$B^a = f_a(E_n, E_m, \nu_n, \nu_m, \gamma_n) \cdot \sigma_{cr} \quad (37)$$

بنابراین جابجایی سطح بیرونی المان حجمی پس از جدایش با استفاده از رابطه زیر تعیین می‌گردد:

$$u_m^a|_{y_2} = \frac{1}{E_m} [\sigma_h (1 - 2\nu_m)] \left(\frac{Lg}{2} + \frac{Lm}{2} \right) + \frac{\sigma_{cr} Lg}{2} \left[\frac{\alpha}{E_m} (1 - 2\nu_m) + \frac{1}{E_n} (1 - 2\nu_n) - \frac{1}{E_m} (1 - 2\nu_m) \right] \quad (38)$$

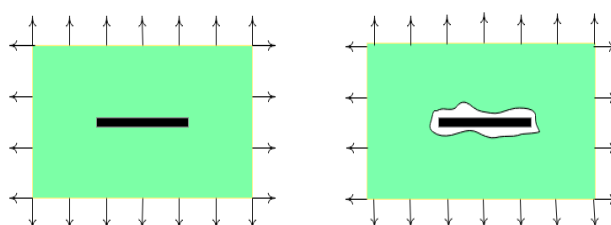


Fig. 2 Applied stress on matrix and nanoparticle a) before debonding b) after debonding

شکل 2 تنش اعمالی بر ماتریس و نانوذره (الف) قبل از جدایش (ب) بعد از جدایش

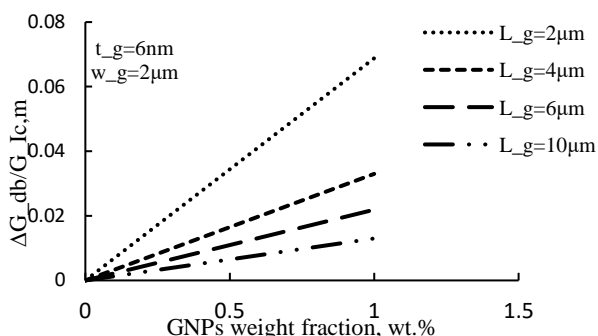


Fig. 4 Normalized fracture toughness of epoxy/graphene nanocomposite according to different weight percentages of nanographene, considering different lengths of graphene nanoparticles based on reference data [30]

شکل 4 چقرمگی شکست نرمالایز شده نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن برحسب درصد‌های وزنی مختلف نانوگرافن، با در نظر گرفتن طول‌های مختلف نانوذرات گرافن بر اساس داده‌های مرجع [30]

همانطور که در شکل (3) مشاهده می‌شود، افزایش طول نانوذرات با فرض ثابت بودن ضخامت و عرض آن، باعث کاهش در بهبود چقرمگی شکست نرمال شده نانوکامپوزیت شده است. بطوریکه به ازای $L_g=2\mu m$ بیشترین میزان اثربخشی و به ازای $L_g=10\mu m$ کمترین اثربخشی در چقرمگی شکست ایجاد شده است.

در ضمن نتایج شکل (3) بر اساس داده‌های ورودی مرجع [29] می‌باشد. همچنین در شکل (4) نیز مشخص است که هرچه اندازه طول نانوذرات گرافن کوچک‌تر باشد، بهبود در چقرمگی شکست نرمالایز شده بیشتر است. این نمودار بر اساس داده‌های مرجع [30] رسم شده است.

با مقایسه دو نمودار بالا مشاهده می‌شود که نمودار (3) که بر اساس داده‌های مرجع [29] بوده است (E_{nc} بیشتری داشته) نسبت به نمودار (4) که بر اساس داده‌های مرجع [30] است (E_{nc} کمتری داشته)، دارای بهبود در چقرمگی شکست بیشتری است. در نتیجه هرچه مقدار E_{nc} بیشتر باشد، چقرمگی شکست افزایش می‌یابد.

در نمودار شکل (5) و (6) اثر عرض نانوذرات گرافن بر چقرمگی شکست نرمالایز شده نشان داده شده است.

که W_{fn} کسر وزنی نانوذرات در نانوکامپوزیت است، همچنین ρ_n و ρ_m چگالی نانوذره و رزین هستند.

14- مطالعات موردی، نتایج و بحث

در این بخش، با استفاده از اطلاعات و داده‌های موجود در ادبیات [30,29] اثرات پارامترهای متغیر از جمله مدول یانگ نانوکامپوزیت، کسرهای وزنی و ضخامت‌های نانوذره گرافن، بر بهبود چقرمگی شکست نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن بررسی شده است. در پایان نتایج بدست آمده با نتایج تجربی محققین مقایسه گردید. لازم بذکر است که جهت انجام محاسبات از نرم‌افزار میپل استفاده شده است. مراجع و داده‌های مربوطه مورد استفاده در کار حاضر بطور خلاصه در جدول (1) جمع‌آوری شده است. همچنین مدول یانگ نانوگرافن 1TPa و چگالی آن $1.9 g/cm^3$ در نظر گرفته شده است.

15- تأثیر پارامترهای مختلف بر بهبود چقرمگی شکست

در این قسمت اثر ابعاد نانوذرات بر بهبود چقرمگی شکست نرمالایز شده، ناشی از مکانیزم جدایش نانوذرات از رزین اطراف به عنوان تابعی از درصد وزنی بررسی شده است.

در نمودار شکل (3) و (4) اثر طول نانوذرات بر چقرمگی شکست نرمالایز شده، نشان داده شده است.

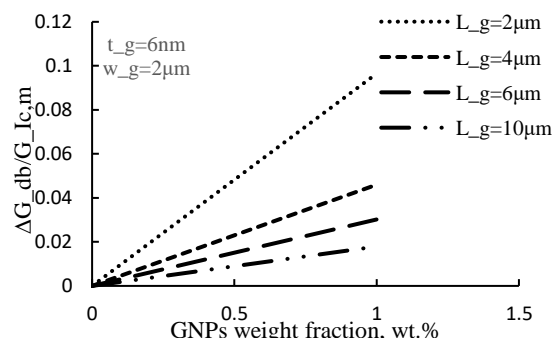


Fig. 3 Normalized fracture toughness of epoxy/graphene nanocomposite according to different weight percentages of nanographene, considering different lengths of graphene nanoparticles based on reference data [29]

شکل 3 چقرمگی شکست نرمالایز شده نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن برحسب درصد‌های وزنی مختلف نانوگرافن، با در نظر گرفتن طول‌های مختلف نانوذرات گرافن بر اساس داده‌های مرجع [29]

جدول 1 خلاصه‌ایی از خواص تجربی استفاده شده در کار حاضر

Table 1 A summary of the experimental properties used in the present work

مرجع	استحکام تسلیم (MPa)	استحکام نهایی (MPa)	چگالی ماتریس (g/cm^3)	سفتی نانوکامپوزیت (GPa)	طول نانوگرافن (μm)	ضخامت نانوگرافن (nm)	کسر وزنی %wt
[29]	31.56	40	1.1	1.99	0.5-20	1-10	0
[29]	35.82	44	1.1	2.33	0.5-20	1-10	0.3
[29]	37.04	48	1.1	2.49	0.5-20	1-10	0.5
[29]	38.86	49	1.1	2.69	0.5-20	1-10	0.8
[29]	40.13	51	1.1	3.83	0.5-20	1-10	1
[30]	21.50	71	1.2	2.49	5-10	6-8	0
[30]	22.00	72	1.2	2.55	5-10	6-8	0.1
[30]	24.00	72	1.2	2.63	5-10	6-8	0.25
[30]	23.50	73	1.2	2.59	5-10	6-8	0.5
[30]	23.70	74	1.2	2.58	5-10	6-8	0.75
[30]	22.50	72	1.2	2.59	5-10	6-8	1

این امر، وابستگی معادلات ارائه شده در کار حاضر به مدول یانگ نانوکامپوزیت است، که در کارهای تجربی نیز این وابستگی به مدول یانگ وجود دارد. به همین دلیل، در کار تجربی مرجع [30] روند کاهشی از درصد وزنی 0.5 به بعد که مدول یانگ کاهش یافته است، مشاهده می‌شود. همچنین بین نتایج تئوری کار حاضر و نتایج تجربی مراجع [30,29] خطاها و اختلافاتی وجود دارد که می‌توان یکی از علت‌های آن را اثر کلوخه شدن نانوذرات در حالت تجربی بیان کرد.

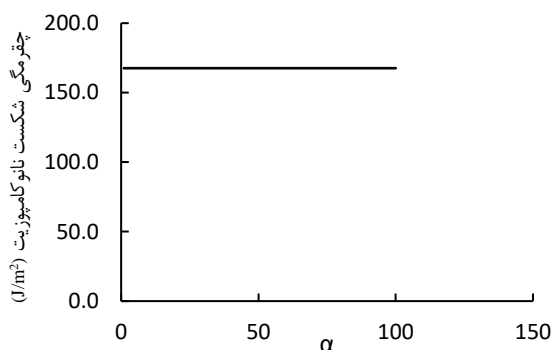


Fig. 7 Fracture toughness for different α

شکل 7 چقرمگی شکست به ازای α های مختلف

17- مقایسه نتایج مدل حاضر با داده‌های تئوری

در این قسمت به مقایسه مطالعه تئوری شکریه و زین‌الدینی [8] با کار حاضر پرداخته شده است. شکریه و زین‌الدینی [8] به کمک معادلات حاکم بر تنش شعاعی و جابجایی در سیستم مختصات استوانه‌ای، مدلی چند مقیاسه، ارائه کردند که اثر افزودن نانولوله کربنی را بر چقرمگی شکست نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی پیش‌بینی می‌کند.

نتایج این مقایسه در جدول (3) برای پرکننده‌های نانولوله کربنی دوجداره¹ و چند جداره² بر اساس مرجع [8] و نانوگرافن در کار حاضر، مشاهده می‌شود. در ضمن چقرمگی‌های شکست کار حاضر بر اساس اطلاعات و داده‌های مرجع [30] بدست آمده‌اند.

همانطور که در جدول (3) مشاهده می‌شود چقرمگی شکست نانولوله‌های چند جداره نسبت به نانوذرات گرافن چندین برابر بیشتر بوده و چقرمگی شکست نانوذرات گرافن در مقایسه با نانولوله‌های دوجداره مقادیر بزرگتری داشته است. از دلایل وجود اختلافات بین نتایج تئوری کار حاضر و مرجع [8] می‌توان به نوع ذرات پرکننده و نوع المان حجمی متفاوت اشاره کرد. بنابراین چقرمگی شکست به نوع ذرات پرکننده بسیار وابسته است.

می‌توان نشان داد که نوع نانوذره تأثیر بسزایی بر افزایش چقرمگی شکست نانوکامپوزیت دارد. از طرفی همانطور که مشاهده می‌شود در مرجع [8] مانند کار حاضر افزودن یک مقدار مشخصی پرکننده باعث بهبود در خواص شکست گردیده است.

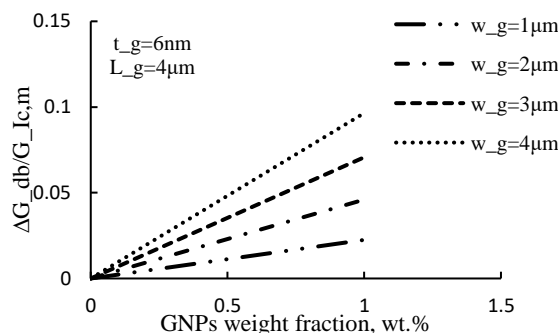


Fig. 5 Normalized fracture toughness of epoxy/graphene nanocomposite according to different weight percentages of nanographene, considering different widths of graphene nanoparticles based on reference data [29].

شکل 5 چقرمگی شکست نرمالایز شده نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن بر حسب درصدهای وزنی مختلف نانوگرافن، با در نظر گرفتن عرض‌های مختلف نانوذرات گرافن بر اساس داده‌های مرجع [29].

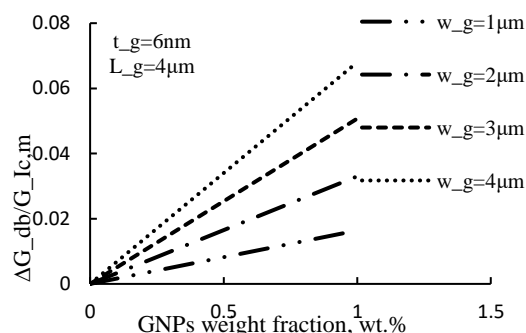


Fig. 6 Normalized fracture toughness of epoxy/graphene nanocomposite according to different weight percentages of nanographene, considering different widths of graphene nanoparticles based on reference data [30].

شکل 6 چقرمگی شکست نرمالایز شده نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن بر حسب درصدهای وزنی مختلف نانوگرافن، با در نظر گرفتن عرض‌های مختلف نانوذرات گرافن بر اساس داده‌های مرجع [30].

در هر دو نمودار (5) و (6) که به ترتیب بر اساس داده‌های مرجع [29] و [30] می‌باشند، مشاهده می‌شود که با افزایش عرض نانوذرات میزان بهبود در چقرمگی شکست کاهش یافته است.

16- مقایسه نتایج مدل حاضر با داده‌های تجربی

اثر مکانیزم جداسازی نانوذرات گرافن بر چقرمگی شکست نانوکامپوزیت، با استفاده از یکسری داده‌های تجربی موجود در ادبیات ارزیابی شد.

در نمودار (7) به ازای α های مختلف مقادیر چقرمگی شکست بر اساس داده‌های مرجع [30] بیان شده است. همانطور که مشاهده می‌شود مقدار α تأثیر بسیار ناچیزی بر نتایج محاسبات دارد. در نتیجه در روند حل معادلات، α در معادله (38) برابر 1 در نظر گرفته شده است.

خواص مورد استفاده در کار حاضر در جدول (1) خلاصه شده است. چقرمگی شکست بدست آمده توسط مطالعات تجربی سایرین [30,29] و مدل حاضر در جدول (2) ذکر و با یکدیگر مقایسه گردید. همانطور که مشخص است در کار حاضر و مرجع [29] با افزایش درصد وزنی نانوگرافن مقادیر چقرمگی شکست نیز افزایش یافته است، ولی در چقرمگی شکست-هایی که بر اساس داده‌های مرجع [30] بدست آمده است، در ابتدا با افزایش درصد وزنی چقرمگی افزایش یافته و در ادامه روند کاهشی داشته است. علت

Double-walled carbon nanotube (DWCNT)¹
Multi-walled carbon nanotube (MWCNT)²

جدول 2 مقایسه چقرمگی شکست به دست آمده توسط آزمایش‌ها [29,30] و مدل چند مقیاسی حاضر

Table 2 Comparison between the fracture toughness obtained by experiments [29, 30] and the present multi-scale model

مرجع	خطا (%)	چقرمگی شکست نانوکامپوزیت (مدل حاضر) (J/m^2)	چقرمگی شکست نانوکامپوزیت (تجربی) (J/m^2)	کسر وزنی %wt
[29]	0.0	217.0	217	0
[29]	3.5	225.4	233	0.3
[29]	11.3	226.0	251	0.5
[29]	14.7	226.9	266	0.8
[29]	20.4	227.5	285	1
[30]	0.0	162.0	162	0
[30]	21.7	167.5	214	0.1
[30]	31.5	167.7	245	0.25
[30]	26.4	167.6	228	0.5
[30]	18.0	167.6	205	0.75
[30]	8.0	167.7	184	1

جدول 3 مقایسه چقرمگی شکست به دست آمده توسط آزمایش‌ها [29,30] و مدل چند مقیاسی حاضر

Table 3 Comparison between the fracture toughness obtained by experiments [29, 30] and the present multi-scale mode

چقرمگی شکست نانوکامپوزیت (مدل حاضر) (J/m^2)	چقرمگی شکست نانوکامپوزیت [8] (J/m^2)	کسر وزنی %wt	نوع پرکننده
---	743.2	0.1	MWCNT
---	746.9	0.5	MWCNT
---	752.0	1	MWCNT
---	145.1	0.1	DWCNT
---	145.6	0.3	DWCNT
---	146.1	0.5	DWCNT
---	---	0.1	GNP
---	---	0.5	GNP
167.5	---	1	GNP
167.6	---		
167.7	---		

نانوذرات گرافن را بر چقرمگی شکست نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن نشان دهد.

19- مراجع

- [1] Aleni, H.M., Liaghat, G.H., Pol, M.H. and Afrouzian, A., "An experimental investigation on mode-II interlaminar fracture toughness of nanosilica modified glass/epoxy fiber-reinforced laminates," In Persian, Modares Mechanical Engineering, Vol. 15, No. 3, 2015.
- [2] Alasvand Zarasvand, k., "Mechanical Property Determination of Graphene and Multi-Walled Carbon Nanotubes Reinforced Epoxy Nanocomposites," MSc Thesis, Shahrekord University, Iran, 2016.
- [3] Abbandanak, S., Siadati, M.H. and Eslami-farsani, R., "Effects of functionalized graphene nanoplatelets on the flexural behaviors of basalt fibers/epoxy composites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 5, No. 3, pp. 315-324, 2018.
- [4] Stankovich, S., Dikin, D.A., Dommett, G.H., Kohlhaas, K.M., Zimney, E.J., Stach, E.A., Piner, R.D., Nguyen, S.T. and Ruoff, R.S., "Graphene-Based Composite Materials," Nature, Vol. 442, No. 7100, pp. 282-286, 2006.
- [5] Moshrefzadeh-Sani, H. and Mohammadkhani, H., "A multi-scale cubic model to calculate the elastic modules of the graphene/polymer nano composites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 7, No. 1, pp. 740-746, 2020.
- [6] Babazade, A., Hadad, M. and Safarabadi, M., "Investigation of the Effect of Graphene Nano Plates and Carbon Nanotubes on the Improvement of Mechanical Properties of Aluminum Matrix Nanocomposites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 7, No. 4, pp. 1197-1206, 2021.
- [7] Zappalorto, M., Salviato, M. and Quaresimin, M., "A multiscale model to describe nanocomposite fracture toughness enhancement by the plastic yielding of nanovoids," Composites Science and Technology, Vol. 72, No. 14, pp.1683-1691, 2012.
- [8] Shokrieh, M. M. and Zeinedini, A., "Effect of CNTs debonding on mode I fracture toughness of polymeric nanocomposites," Materials & Design, Vol. 101, pp. 56-65, 2016.

18- نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر یک مدل چندمقیاسی برای تخمین اثر جدایش نانوذرات گرافن از رزین اطراف آن بر چقرمگی شکست نانوکامپوزیت اپوکسی/گرافن ارائه شده است. این مدل بر اساس همبستگی بین میدان‌های تنش و جابجایی در مقیاس ماکرو، میکرو و نانو ایجاد شده است. یک المان حجمی نماینده به منظور یافتن میدان جابجایی در اطراف نانوذره گرافن در نظر گرفته شده است. در نهایت، اثر حضور نانوذرات بر افزایش چقرمگی شکست در اثر مکانیزم تخریب جدایش، مورد بررسی قرار گرفت. در این راستا اثر پارامترهای مختلفی مانند ابعاد نانوذرات گرافن و مدول یانگ نانوکامپوزیت بررسی شده است.

برخی از نتایج بدست آمده به شرح زیر است:

- 1- افزایش چقرمگی شکست وابستگی قابل توجهی به درصد وزنی نانوذرات گرافن بکاررفته در نانوکامپوزیت دارد.
- 2- هرچه ابعاد نانوذرات بکار رفته از دیدگاه تئوری کوچکتر باشد اثر مطلوب‌تری در افزایش چقرمگی شکست خواهد داشت. اما از دیدگاه تجربی محدودیت ساخت نانوذرات با ابعاد کوچکتر وجود دارد.
- 3- در این تحقیق مکانیزم جدایش سطحی که از انواع مکانیزم‌های اطراف نوک ترک است، مورد بررسی قرار گرفته. بدیهی است که اگر مکانیزم‌های پیش روی ترک همچون بیرون کشیدگی را در نظر بگیریم نانوذرات با ابعاد بزرگتر مقدار چقرمگی شکست بیشتری را نتیجه می‌دهند. اما برای مکانیزم‌های اطراف ترک نانوذرات کوچکتر نتایج بهتری را خواهند داشت.
- 4- افزایش چقرمگی شکست به مدول یانگ نانوکامپوزیت وابسته است بطوریکه با افزایش مدول یانگ نانوکامپوزیت چقرمگی شکست نیز افزایش خواهد یافت.
- 5- با مقایسه نتایج بدست آمده با کارهای تجربی محققین، مشخص شد که مدل پیشنهادی می‌تواند بطور رضایت بخشی اثر مکانیزم جداسازی

- characterization," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 36, No. 5, p. 573, 2003.
- [29] Her, S.C. and Zhang, K.C., "Mode I Fracture Toughness of Graphene Reinforced Nanocomposite Film on Al Substrate," *Nanomaterials*, Vol. 11, No. 7, pp. 1743, 2021.
- [30] Domun, N., Hadavinia, H., Zhang, T., Liaghat, G., Vahid, S., Spacie, C., Paton, K.R. and Sainsbury, T., "Improving the fracture toughness properties of epoxy using graphene nanoplatelets at low filler content," *Nanocomposites*, Vol. 3, No. 3, pp. 85-96, 2017.
- [9] Quaresimin, M., Salviato, M. and Zappalorto, M., "A multi-scale and multi-mechanism approach for the fracture toughness assessment of polymer nanocomposites," *Composites Science and Technology*, Vol. 91, pp. 16-21, 2014.
- [10] Shin, H., "Multiscale model to predict fracture toughness of CNT/epoxy nanocomposites," *Composite Structures*, Vol. 272, pp. 114236, 2021.
- [11] Karimi, M., Ghajar, R. and Montazeri, A., "Investigation of nanotubes length and their agglomeration effects on the elastoplastic behavior of polymer-based nanocomposites," In Persian, *Journal of Science and Technology of Composites*, Vol. 4, No. 2, pp. 229-240, 2017.
- [12] Nielsen, Lawrence E. "Generalized equation for the elastic moduli of composite materials." *Journal of Applied Physics* 41, no. 11, pp.4626-4627, 1970.
- [13] Lewis, T.B. and Nielsen, L.E., "Dynamic mechanical properties of particulate-filled composites," *Journal of applied polymer science*, Vol. 14, No. 6, pp. 1449-1471, 1970.
- [14] Zeinedini, A., "Effect of carbon nanotubes on strain energy release rate of mixed mode I/II delamination initiation in laminated composites," PhD Thesis, Science and Technology Department, Iran, 2017.
- [15] Mori, T. and Tanaka, K., "Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions," *Acta metallurgica*, Vol. 21, No. 5, pp. 571-574, 1973.
- [16] Hill, R., "Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 11, No. 5, pp. 357-372, 1963.
- [17] Eshelby, J., "Elastic inclusions and inhomogeneties," *Progr. Solid Mech*, Vol. 2, p. 89-140, 1961.
- [18] Eskandariyun, A., "Estimating Mechanical Properties of Graphene/Polymer Nanocomposites using Multiscale Modeling," MSc Thesis, University of Tehran, Iran, 2018.
- [19] Blackman, B.R.K., Kinloch, A.J., Sohn Lee, J., Taylor, A.C., Agarwal, R., Schueneman, G. and Sprenger, S., "The fracture and fatigue behaviour of nano-modified epoxy polymers," *Journal of Materials Science*, Vol. 42, pp. 7049-7051, 2007.
- [20] Hsieh, T.H., Kinloch, A.J., Masania, K., Sohn Lee, J., Taylor, A.C. and Sprenger, S., "The toughness of epoxy polymers and fibre composites modified with rubber microparticles and silica nanoparticles," *Journal of materials science*, Vol. 45, pp. 1193-1210, 2010.
- [21] Kolahi Toutakhaneh, H., "Fracture toughness and Fatigue properties of silica/epoxy nanocomposite using multi-scale method," MSc Thesis, Urmia University, Iran, 2019.
- [22] Liu, Y.J. and Chen, X.L., "Evaluations of the effective material properties of carbon nanotube-based composites using a nanoscale representative volume element," *Mechanics of Materials*, Vol. 35, No. 1-2, pp. 69-81, 2003.
- [23] Freund, L.B. and Hutchinson, J.W., "High strain-rate crack growth in rate-dependent plastic solids," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 33, No. 2, pp. 169-191, 1985.
- [24] Zappalorto, M., Salviato, M. and Quaresimin, M., "Influence of the interphase zone on the nanoparticle debonding stress," *Composites Science and Technology*, Vol. 72, No. 1, pp. 49-55, 2011.
- [25] Williams, J.G., "Particle toughening of polymers by plastic void growth," *Composites science and technology*, Vol. 70, No. 6, pp. 885-891, 2010.
- [26] Jiang, L.Y., Huang, Y., Jiang, H., Ravichandran, G., Gao, H., Hwang, K.C. and Liu, B., "A cohesive law for carbon nanotube/polymer interfaces based on the van der Waals force," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 54, No. 11, pp. 2436-2452, 2006.
- [27] Jiao, S. and Xu, Z., "Non-continuum intercalated water diffusion explains fast permeation through graphene oxide membranes," *ACS nano*, Vol. 11, No. 11, pp. 11152-11161, 2017.
- [28] Thostenson, E.T. and Chou, T.W., "On the elastic properties of carbon nanotube-based composites: modelling and