



پیش‌بینی تحلیلی مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی در شروع رشد ترک در نانوکامپوزیت‌های پلیمری

محمود مهرداد شکرپه^{۱*}، افشین زین‌الدینی^۲

۱- استاد، آزمایشگاه تحقیقاتی کامپوزیت، قطب علمی مکانیک جامدات تجربی و دینامیک، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران
 ۲- دانشجوی دکترا، آزمایشگاه تحقیقاتی کامپوزیت، قطب علمی مکانیک جامدات تجربی و دینامیک، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران
 *shokrieh@iust.ac.ir، ۱۶۸۴۶-۱۳۱۱۴

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت: ۹۴/۷/۸	در این مقاله، اثر نانولوله‌های کربنی بر مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی در شروع رشد ترک در نانوکامپوزیت‌های پایه اپوکسی به‌صورت تحلیلی مطالعه شد. در این مدل تحلیلی، اثر وجود پدیده جدایش نانولوله‌های کربنی از رزین پیرامون آن در ناحیه نزدیک به نوک ترک به‌عنوان یکی از عوامل افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی در نانوکامپوزیت نسبت به رزین خالص با استفاده از یک جزء حجمی معرف مطالعه شد. جز معرف حجمی مفروض برای نانولوله‌های کربنی و رزین پیرامون آن با وجود فاز میانی در نظر گرفته شد. برای تخمین خواص مکانیکی فازمیانی، ضخامت آن از مقادیر گزارش شده در مراجع استفاده شد. در نهایت مدلی برای افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت، براساس خواص مکانیکی و پارامترهای هندسی نانولوله‌های کربنی و رزین خالص معرفی گردید. لازم بذکر است که احتمال افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت نسبت به پلیمر خالص، با استفاده از ارتباط بین مقیاس‌های ماکرو، میکرو و نانو مورد بررسی قرار گرفت. برای اعتبارسنجی مدل تحلیلی ارائه شده، نتایج به‌دست آمده از روابط تحلیلی با نتایج مطالعات تجربی سایر محققین مقایسه شد. نتایج نشان دادند که مدل ارائه شده با خطای قابل قبولی، توانایی پیش‌بینی مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌های پایه اپوکسی تقویت شده با نانولوله‌های کربنی تک و چندجداره را داراست.
پذیرش: ۹۴/۹/۲	
کلیدواژگان:	
نرخ رهایی انرژی کرنشی	
مدل تحلیلی	
مود اول	
نانولوله‌های کربنی	
نانوکامپوزیت	

Analytical prediction of mode I strain energy release rate at crack growth initiation of polymeric nanocomposites

Mahmood Mehrdad Shokrieh*, Afshin Zeinedini

Composites Research Laboratory, Center of Excellence in Experimental Solid Mechanics and Dynamics, School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran.

*P.O.B. 16846-13114, Tehran, Iran, shokrieh@iust.ac.ir

Keywords	Abstract
Strain energy release rate Analytical model Mode I Carbon nanotubes Nanocomposites	In this paper, the effect of carbon nanotubes on mode I strain energy release rate at crack growth initiation of epoxy-based nanocomposites was studied analytically. In this theoretical model, effect of carbon nanotubes debonding from its surrounding resin at the crack tip was postulated as one of the causes of increasing of the strain energy release rate of nanocomposites in comparison with the pure resin. Furthermore, a representative volume element was considered at the nanoscale. The assumed representative volume element contains carbon nanotubes, surrounding resin and the interphase. The available mechanical properties and the thickness of the interphase in the literature were used. Finally, a model for increasing the strain energy release rate of nanocomposites due to presence of carbon nanotubes was introduced based on mechanical properties and geometric parameters of carbon nanotubes and resin. It must be noted that enhancement of strain energy release rate in comparison with the pure polymer was investigated by correlation between nano, micro and macro-scales. To validate the proposed analytical model, results were compared with other experimental results available in the literature. The results show that the present model has a reasonable error and is able to model the effect of single-wall and multi-wall carbon nanotubes on nanocomposites strain energy release rate.

۱- مقدمه
 اخیر مورد توجه محققان قرار گرفته است. برای افزایش خواصی همچون نرخ رهایی انرژی کرنشی راهکارهای زیادی پیشنهاد شده است. افزودن نانوذرات،

افزایش خواص مکانیکی پلیمرها، یکی از موضوعاتی است که در سال‌های

Please cite this article using:

Shokrieh, M. M. and Zeinedini, A., "Analytical prediction of mode I strain energy release rate at crack growth initiation of polymeric nanocomposites". In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 3, No. 1, pp. 1-10, 2016.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده نمایید:

هدف اصلی این مقاله، تخمین مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌های با زمینه پلیمری و تقویت شده با نانولوله‌های کربنی است. بر این مبنای مدلی برای پیش‌بینی چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌ها بدون نیاز به انجام آزمایشات تجربی و فقط براساس مقدار چقرمگی شکست رزین خالص ارائه شد. مدل ارائه شده با استفاده از نتایج تجربی موجود در منابع مورد اعتبارسنجی گرفت.

۲- اثر مکانیزم جدایش نانولوله‌های کربنی از رزین بر مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌ها

انفصال نانولوله‌های کربنی و رزین یکی از مهمترین مکانیزم‌های آسیب هنگام رخداد پدیده شکست در نانوکامپوزیت‌ها است. نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی نانوکامپوزیت را می‌توان به عنوان مجموع نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی پلیمر خالص و مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی ناشی از وجود مکانیزم آسیب در نظر گرفت. فرایند کلی محاسبه مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی ناشی از وجود مکانیزم آسیب انفصال نانولوله‌های کربنی و رزین عبارت است از:

- ۱- محاسبه چقرمگی شکست یا نرخ رهایی انرژی کرنشی رزین خالص
 - ۲- نرخ رهایی انرژی کرنشی ناشی از مکانیزم آسیب بر حسب تعداد نانولوله‌ها در ناحیه فرایند شکست و انرژی کرنشی ناشی از جدایش
 - ۳- رابطه بین اندازه ناحیه فرایند شکست برحسب چقرمگی شکست رزین خالص
 - ۴- تخمین انرژی کرنشی ناشی از جدایش
 - ۵- ارتباط بین فضاهای نانو، میکرو و ماکرو
 - ۶- تعریف نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت به صورت مجموع نرخ رهایی انرژی کرنشی رزین خالص و نرخ رهایی انرژی کرنشی ناشی از پدیده جدایش
- فرضیات حل این مسئله، به صورت زیر در نظر گرفته شده‌اند:
- رشد ترک اتفاق نمی‌افتد بلکه ناحیه فرایند شکست در آستانه تخریب قرار می‌گیرد و امکان رشد ترک در آن فراهم می‌گردد.
 - نانولوله‌های کربنی و رزین کشسان خطی فرض می‌شوند.
 - توزیع نانولوله‌های کربنی در ناحیه فرایند شکست یکنواخت و تصادفی است.
 - نانولوله‌های کربنی به صورت استوانه‌های مستقیم، توپر و بدون خمیدگی در نظر گرفته می‌شوند.
 - فازی به عنوان فاز میانی در جزء حجمی معرف^۸ در مقیاس نانو در نظر گرفته می‌شود.
 - جزء حجمی معرف در مقیاس نانو، برای نانولوله‌های کربنی، فاز میانی و پلیمر پیرامون آن به صورت استوانه‌ای لحاظ می‌گردد.
 - شرایط کرنش صفحه‌ای بر مسئله حاکم است.
 - درصد حجمی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت کمتر از یک درصد است. لذا طبق مدل رقیق اشلیبی، اثر وجود نانولوله‌های کربنی بر یکدیگر لحاظ نمی‌گردد.

به عنوان یکی از راهکارهای تاثیرگذار در زمینه بهبود خواص شکست پلیمرها مطرح شده است. با افزودن نانوذرات به پلیمرها، مکانیزم‌هایی در این مواد تقویت شده اتفاق می‌افتد که در منابع به عنوان مکانیزم‌های چقرمگی^۱ مطرح شده‌اند. ریچ [۱] مکانیزم‌های چقرمگی را در دو دسته مکانیزم‌های ایجاد شده در منطقه پیشانی ترک^۲ و مکانیزم‌های مواجه شده با ترک^۳ معرفی کرده است. مکانیزم‌های ایجاد شده در منطقه پیشانی ترک آن دسته از مکانیزم‌های افزایش چقرمگی هستند که در ناحیه فرایند شکست اتفاق می‌افتند. جدایش^۴ نانوذرات از رزین پیرامون آن مهمترین مکانیزمی است که در ناحیه فرایند شکست پلیمرها وجود می‌آید. در حالیکه مکانیزم‌های مواجه شده با ترک آن دسته از مکانیزم‌های افزایش چقرمگی هستند که هنگام رشد ترک و در مواجه با ترک وجود می‌آیند. از جمله این مکانیزم‌ها می‌توان پل‌زنی^۵ ذرات، بیرون‌کشی^۶ ذرات از رزین پیرامون آن و گسیختگی^۷ ذرات را بیان نمود.

محققین حوزه شکست، مدل‌هایی را برای بررسی اثر وجود نانوذرات بر مقدار چقرمگی شکست در پلیمرها پیشنهاد داده‌اند. در این مدل‌ها ناحیه‌ای نزدیک به نوک ترک (ناحیه فرایند شکست) در نظر گرفته شده است که امکان وجود رشد ترک در آن محتمل است. داگلاس و همکارانش [۲] از جمله نخستین محققانی هستند که اثر افزودن ذرات لاستیکی بر مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی پلیمرها را به صورت تحلیلی مورد بررسی قرار دادند. در مقاله مذکور، افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی در حالت رشد ترک به پل‌زنی ذرات لاستیک نسبت داده شده است. ناحیه‌ای با ضخامت مشخص در امتداد فرضی صفحه ترک در نظر گرفته شده که امکان وجود پل‌زنی و افزایش چقرمگی به علت رخ دادن این پدیده در این ناحیه را ارائه می‌کند. کوارسمن، سالویاتو و زاپالورتو در چندین مقاله [۳-۵] مدل‌هایی چندفازی برای مطالعه چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانوذرات کروی ارائه کردند. این مدل‌ها براساس انواع مکانیزم‌های آسیب که به طور عمده در نانوکامپوزیت‌ها اتفاق می‌افتد بوجود آمده‌اند. مکانیزم‌های آسیبی که در این مقالات مورد بررسی قرار گرفتند عبارتند از انفصال نانوذرات از رزین، تسلیم پلاستیک نانوحفره‌ها و باندهای برشی پلاستیک پلیمر. هسیه و همکاران [۶] افزایش چقرمگی ناشی از افزودن نانوذرات کروی سیلیکا را به پدیده‌های باندهای برشی بین نانوذرات و رشد حفره‌ها نسبت دادند. مدل آن‌ها برای نانوکامپوزیت‌ها با درصد حجمی بالای ۲/۵ درصد نانوذرات سیلیکا اعتبارسنجی شده است. مقایسه نتایج تجربی و تئوری نشان می‌دهد که مدل ارائه شده به طور مناسبی می‌تواند مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی را پیش‌بینی کند. نانولوله‌های کربنی از جمله نانوذراتی هستند که باعث افزایش قابل توجهی در مقدار چقرمگی شکست پلیمرها شده‌اند. محققان مطالعات تجربی گسترده‌ای را برای بررسی اثر وجود نانولوله‌های کربنی بر مقدار مود اول چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌ها انجام داده‌اند [۷-۱۴]. علاوه بر روش‌های تجربی، روش‌های تئوری و دینامیک مولکولی نیز اثر وجود نانوذرات بر مقدار چقرمگی شکست پلیمرها را مورد بررسی قرار داده‌اند. اما در زمینه اثر افزودن نانولوله‌های کربنی بر مقدار پارامترهای شکست در نانوکامپوزیت‌ها مطالعات اندکی با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی و تئوری انجام شده است [۱۵].

1. Toughening mechanism
2. Zone shielding
3. Contact shielding
4. Debonding
5. Bridging
6. Pull-out
7. Rupture

8. Representative Volume Element (RVE)

۱-۲- نرخ رهایی انرژی کرنشی رزین خالص

اولین گام، تخمین مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی پلیمر خالص با استفاده از روش تجربی است. نمونه‌های زیادی برای محاسبه مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی در مراجع معرفی شده است [۱۶]. در این استاندارد محاسبات مربوط به مود اول چقرمگی شکست، K_{Ic} ، و انرژی در واحد سطح یا نرخ رهایی انرژی کرنشی در شروع مود اول شکست، G_{Ic} ، لحاظ شده است.

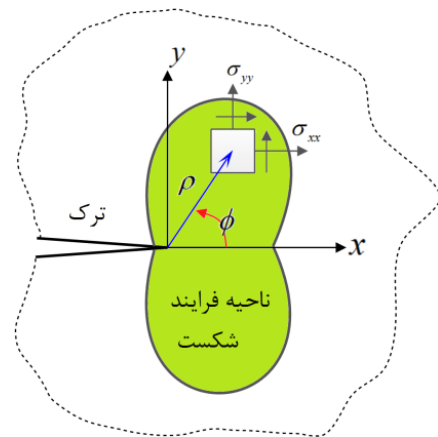
۲-۲- نرخ رهایی انرژی کرنشی ناشی از مکانیزم آسیب

همانطور که بیان شد، انفصال نانولوله کربنی و رزین یکی از مهمترین مکانیزم‌های آسیب هنگام رخداد پدیده شکست در نانوکامپوزیت‌ها است. شکل ۱ ناحیه فرایند شکست در مقیاس میکرو را نشان می‌دهد. مقدار انرژی افزایش یافته ناشی از جدایش نانولوله کربنی‌های و رزین پیرامون آن‌ها یا به عبارتی انرژی لازم برای ایجاد مکانیزم آسیب در ناحیه نزدیک به نوک ترک به ازای تعداد نانولوله کربنی‌های در عرض نمونه شکست را می‌توان طبق رابطه (۱) محاسبه نمود.

$$\Delta G = F \left(\frac{\Delta U}{2\pi r_n l_n} \right) \quad (1)$$

که در آن ΔU انرژی کرنشی ناشی از پدیده انفصال، F تابعی از پارامترهای هندسی، l_n طول و r_n شعاع خارجی متوسط نانولوله کربنی‌های است. تابع F را می‌توان به صورت تعداد نانولوله‌های کربنی در ناحیه فرایند شکست تعریف نمود. بدین منظور حجم ناحیه فرایند شکست را می‌توان به صورت حاصلضرب طول متوسط نانولوله‌های کربنی در راستای عرض نمونه، l_a و سطح ناحیه فرایند شکست با شعاع میانگین $\bar{\rho}^*$ تعیین نمود. همچنین با در نظر گرفتن نسبت حجمی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت، V_{fn} و حجم فضای پر شده توسط یک نانولوله کربنی V تعداد نانولوله‌های کربنی در ناحیه فرایند شکست تعیین می‌گردد (رابطه (۲)).

$$F = \frac{\pi(\bar{\rho}^*)^2 l_a (V_{fn})}{2V} \quad (2)$$



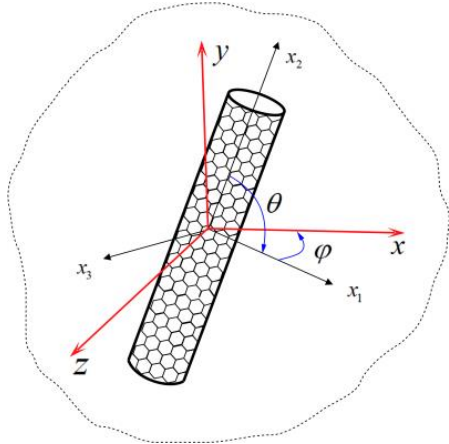
شکل ۱ ناحیه فرایند شکست در مقیاس میکرو

$\bar{\rho}^*$ شعاع متوسط ناحیه فرایند شکست در آستانه شروع رشد ترک است که در بخش بعدی معرفی می‌گردد. مقدار l_a را می‌توان با توجه به شکل ۲ و با استفاده از انتگرال دوگانه طبق رابطه (۳) محاسبه نمود.

$$l_a = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} (l_n \cos\theta + 2r_m \sin\theta) \cos\phi d\theta d\phi \quad (3)$$

که r_m شعاع بیرونی استوانه در جزء حجمی معرف در مقیاس نانو است و در ادامه تعیین می‌گردد. پس از انتگرال‌گیری می‌توان رابطه (۴) را بدست آورد.

$$l_a = \frac{4}{\pi^2} (l_n + 2r_m) \quad (4)$$



شکل ۲ نمایش نانولوله کربنی در فضای سه بعدی

۳-۲- اندازه ناحیه فرایند شکست

در شرایط کرنش صفحه‌ای برای مواد پلیمری مقدار شعاع ناحیه فرایند شکست از رابطه (۵) [۱۷] بدست می‌آید.

$$\bar{\rho} = \frac{1}{6\pi} \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_t} \right)^2 \quad (5)$$

که K_{Ic} مود اول چقرمگی شکست و σ_t استحکام کششی نانوکامپوزیت هستند. روش دوم برای محاسبه شعاع ناحیه فرایند شکست، براساس روابطی است که در ادامه معرفی می‌شوند [۴]. براساس ماهیت فیزیکی پدیده انفصال، تنش‌های عمودی باعث انفصال نانولوله کربنی از رزین می‌شوند، لذا می‌توان رابطه بین تنش هیدرواستاتیک، σ_h ، و تنش‌های در ناحیه فرایند شکست را برقرار نمود.

$$\sigma_h = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \quad (6)$$

که σ_{xx} ، σ_{yy} و σ_{zz} تنش‌های سه بعدی اعمال شده در مقیاس میکرو هستند و در فاصله ρ از نوک ترک و با زاویه ϕ محاسبه (شکل ۱) و به صورت رابطه (۷) تعریف می‌شوند.

$$\begin{cases} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{cases} = \begin{cases} (K_{I,nc}/\sqrt{2\pi\rho}) \cos(\phi/2) [1 - \sin(\phi/2) \sin(3\phi/2)] \\ (K_{I,nc}/\sqrt{2\pi\rho}) \cos(\phi/2) [1 + \sin(\phi/2) \sin(3\phi/2)] \\ v(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{cases} \quad (7)$$

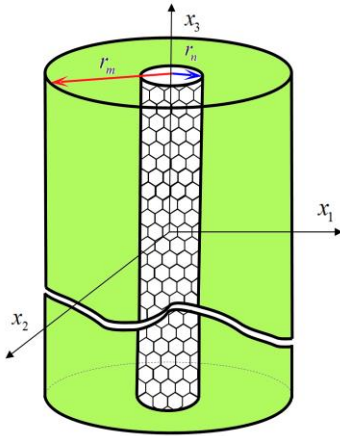
که v نسبت پواسون و $K_{I,nc}$ ضریب شدت تنش برای نانوکامپوزیت هستند. با جایگذاری تنش‌های رابطه (۷) در رابطه (۶)، تنش هیدرواستاتیک از رابطه (۸) بدست می‌آید.

$$\sigma_h = \frac{2(1+v)K_{I,nc}}{3\sqrt{2\pi\rho}} \cos(\phi/2) \quad (8)$$

ارتباط بین تنش هیدرواستاتیک در مقیاس نانو، $\sigma_{h,n}$ ، با تنش در مقیاس میکرو با استفاده از ترکیب مدل‌های اشلیبی رقیق [۱۸] و هیل [۱۹] از طریق رابطه (۹) برقرار می‌شود.

$$\sigma_{h,n} = H_h \sigma_h \quad (9)$$

$$\begin{cases} \sigma_{rr} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{zz} \end{cases} = \begin{cases} B + \frac{A}{r^2} \\ B - \frac{A}{r^2} \\ v(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{cases} \quad (19)$$



شکل ۳ جزء حجمی معرف در مقیاس نانو

همچنین در شرایط کرنش صفحه‌ای میدان کرنش عمودی در مختصات استوانه‌ای برای جزء حجمی معرف را می‌توان به صورت زیر نوشت [۲۳].

$$\begin{cases} e_{rr} \\ e_{\theta\theta} \end{cases} = \begin{cases} \frac{1}{E} [\sigma_{rr} - v(\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{zz})] \\ \frac{1}{E} [\sigma_{\theta\theta} - v(\sigma_{rr} + \sigma_{zz})] \end{cases} \quad (20)$$

که جابجایی در راستای شعاع استوانه از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$u_r = r e_{\theta\theta} \quad (21)$$

با جایگذاری رابطه (۱۹) در رابطه (۲۰) و سپس جایگذاری عبارت به دست آمده در رابطه (۲۱) می‌توان نوشت.

$$u_r = \left(\frac{1+v}{E}\right) r \left[B(1-2v) - \frac{A}{r^2} \right] \quad (22)$$

شرایط مرزی قبل از انفصال نانولوله کربنی از رزین به صورت زیر هستند.

$$\begin{cases} u_r = 0 & r = r_n \\ \sigma_r = \sigma_h & r = r_m \end{cases} \quad (23)$$

مطابق شکل ۳، r_m و r_n به ترتیب شعاع بیرونی نانولوله کربنی و استوانه در جزء حجمی معرف در مقیاس نانو هستند. با اعمال شرایط مرزی فوق بر رابطه (۲۲) و عبارت اول رابطه (۱۹) می‌توان نوشت.

$$\begin{cases} 0 = (1-2v)B_1 - \frac{A_1}{r_n^2} \\ \sigma_h = B_1 + \frac{A_1}{r_m^2} \end{cases} \quad (24)$$

ثابت‌های A_1 و B_1 به صورت زیر تعیین می‌شوند.

$$\begin{cases} A_1 = \left\{ \frac{(1-2v)r_n^2}{1+(1-2v)X} \right\} \sigma_h \\ B_1 = \left\{ \frac{1}{1+(1-2v)X} \right\} \sigma_h \end{cases} \quad (25)$$

که X با استفاده از رابطه (۲۶) تعریف می‌شود.

$$X = \left(\frac{r_n}{r_m}\right)^2 \quad (26)$$

با جایگذاری ثابت‌های A_1 و B_1 در رابطه (۲۲) مقدار جابجایی در اثر اعمال تنش σ_h در شعاع r_m از رابطه (۲۷) به دست می‌آید.

که H_h بخش هیدرواستاتیک تانسور تمرکز تنش است. با جایگذاری رابطه (۸) در رابطه (۹) می‌توان تنش در مقیاس نانو را به صورت رابطه (۱۰) تعیین نمود.

$$\sigma_{h,n} = \frac{2H_h(1+v)K_{I,nc}}{3\sqrt{2\pi\rho}} \cos(\theta/2) \quad (10)$$

با استفاده از رابطه فوق می‌توان شعاع فاصله المان از نوک ترک، شکل ۱ را به صورت رابطه (۱۱) نوشت.

$$\rho = \frac{2H_h(1+v)^2 K_{I,nc}^2}{9\pi\sigma_{h,n}^2} \cos^2(\theta/2) \quad (11)$$

هنگامی که ترک در آستانه رشد باشد رابطه فوق به صورت رابطه (۱۲) نوشته می‌شود.

$$\rho^*(\theta) = \frac{2H_h(1+v)^2 K_{I,nc}^2}{9\pi\sigma_{cr}^2} \cos^2(\theta/2) \quad (12)$$

که در رابطه فوق σ_{cr} تنش بحرانی در مقیاس نانو است که باعث انفصال نانولوله کربنی از رزین می‌شود. مقدار ρ^* را می‌توان با استفاده از اعمال انتگرال میانگین بر رابطه (۱۲) بدست آورد.

$$\bar{\rho}^*(\theta) = \frac{H_h^2(1+v)^2 K_{I,nc}^2}{9\pi\sigma_{cr}^2} \quad (13)$$

با جایگذاری روابط (۵) و (۱۳) در رابطه (۱) می‌توان نوشت.

$$\Delta G = \left[\frac{H_h^2(1+v)^2 K_{I,nc}^2 V_{fn}}{18\pi\sigma_{cr}^2 r_n^2 l_n r_m} \right] \Delta U \quad (14)$$

در شرایط کرنش صفحه‌ای رابطه بین مود اول چقرمگی شکست، $K_{Ic,nc}$ و نرخ رهایی انرژی کرنشی در شروع مود اول شکست نانوکامپوزیت، $G_{Ic,nc}$ به صورت زیر تعیین می‌شود [۲۰].

$$G_{Ic,nc} = \frac{K_{Ic,nc}^2(1-v^2)}{E_{nc}} \quad (15)$$

با جایگذاری رابطه (۱۵) در رابطه (۱۴)، می‌توان نوشت.

$$\Delta G = \bar{\rho}^* \left[\frac{H_h^2 E_{nc} V_{fn} \Delta U}{18\pi\sigma_{cr}^2 r_n^2 l_n r_m} \right] \left(\frac{1+v}{1-v} \right) G_{Ic,nc} \quad (16)$$

که در آن E_{nc} مدول یانگ کششی نانوکامپوزیت است. همانطور که از رابطه فوق پیداست افزایش انرژی ناشی از انفصال نانولوله کربنی از رزین را می‌توان به صورت ضربی از نرخ رهایی انرژی کرنشی در شروع رشد ترک مود اول شکست در نظر گرفت.

$$\Delta G = \Gamma G_{Ic,nc} \quad (17)$$

که

$$\Gamma = \bar{\rho}^* \left[\frac{H_h^2 E_{nc} V_{fn} \Delta U}{18\pi\sigma_{cr}^2 r_n^2 l_n r_m} \right] \left(\frac{1+v}{1-v} \right) \quad (18)$$

سه پارامتر H_h و σ_{cr} در گام‌های بعد تعیین می‌شوند.

۴-۲- جزء حجمی معرف و انرژی کرنشی

طبق مراجع [۲۱، ۲۲] برای تعیین انرژی کرنشی برای انفصال یک نانولوله کربنی از رزین آن یک نانولوله کربنی با رزین پیرامون آن مطابق شکل ۳ به صورت استوانه‌ای به عنوان جزء حجمی معرف در نظر گرفته می‌شود. در شرایط کرنش صفحه‌ای (نسبت طول به قطر نانولوله زیاد) میدان تنش در مختصات استوانه‌ای برای جزء حجمی معرف را می‌توان به صورت رابطه (۱۹) نوشت [۲۳].

تعریف درصد نسبت حجمی نانولوله‌کربنی این شعاع را تعیین نمود. درصد نسبت حجمی نانولوله‌کربنی در جزء حجمی معرف در مقیاس نانو را می‌توان به صورت رابطه (۳۸) تعریف کرد.

$$V_f = \frac{\pi l_n r_n^2}{\pi l_n r_m^2} \quad (38)$$

که صورت و مخروط رابطه فوق به ترتیب بیانگر حجم نانولوله‌کربنی و حجم کل جزء حجمی معرف، شکل ۳، هستند. از آنجایی که در جزء حجمی معرف در مقیاس نانو طول نانولوله‌کربنی و رزین پیرامون آن یکسان در نظر گرفته شده است، لذا:

$$V_f = \frac{r_n^2}{r_m^2} \quad (39)$$

همچنین با مقایسه روابط (۲۶) و (۳۹) می‌توان دریافت که:

$$V_f = X \quad (39)$$

بنابراین،

$$\Delta U = \frac{\pi l_n (1+v) r_n^2}{4E} \left[\frac{\{1 + (1-2v)(3-2v)\} \{1 + (1-2v)V_f\}}{(1-V_f)(1-v)^2} \right] \sigma_{h,n}^2 \quad (41)$$

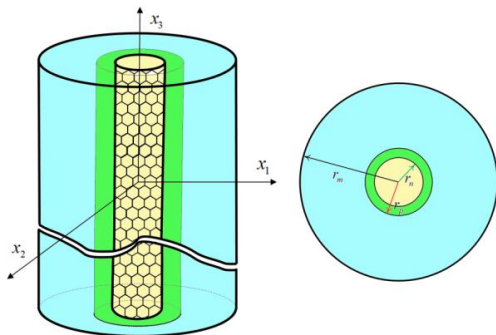
با جایگذاری رابطه (۴۱) در رابطه (۱۸) پارامتر Γ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\Gamma = \left(\frac{\bar{\rho}^* H_h^2 V_f l_a}{144 \pi r_n l_n} \right) \left(\frac{1+v}{1-v} \right)^2 \left[\frac{\{1 + (1-2v)(3-2v)\} \{1 + (1-2v)V_f\}}{(1-V_f)(1-v)} \right] \quad (42)$$

در رابطه فوق فقط پارامتر مجهول H_h وجود دارد که در گام بعد تعیین می‌گردد.

۲-۵- تنسور تمرکز تنش

همانطور که در گام قبل بیان گردید در این گام درایه‌ای از تنسور تمرکز تنش کلی هیدرواستاتیک، H_h ، در آستانه رخداد پدیده انفصال محاسبه می‌شود. که رابطه بین تنش هیدرواستاتیک در مقیاس میکرو و نانو را برقرار می‌کند. برای تخمین مقدار H_h ، می‌توان مدلهای زیادی را برای جزء حجمی معرف در مقیاس نانو در نظر گرفت. مدل حجمی معرف با فاز میانی در شکل ۴ مشاهده می‌شود.



شکل ۴ جزء حجمی معرف در مقیاس نانو با وجود فاز میانی

معادله حاکم بر تغییرمکان در راستای شعاعی برای استوانه مطابق رابطه (۴۳) است.

$$u_{1r} = \frac{(1+v)r_m}{E} \left[\frac{(1-2v)(1-X)}{1+(1-2v)X} \right] \sigma_h \quad (27)$$

پس از انفصال نانولوله‌کربنی از رزین مقدار تنش بین نانولوله‌کربنی و رزین صفر می‌شود در حالی که تنش σ_h در شعاع r_m اعمال می‌گردد، لذا می‌توان رابطه (۲۸) را نوشت.

$$\begin{cases} 0 = B_2 + \frac{A_2}{r_n^2} \\ \sigma_h = B_2 + \frac{A_2}{r_m^2} \end{cases} \quad (28)$$

ثابت‌های A_2 و B_2 به صورت زیر تعیین می‌شوند:

$$\begin{cases} A_2 = \left\{ \frac{r_n^2}{X-1} \right\} \sigma_h \\ B_2 = \left\{ \frac{1}{1-X} \right\} \sigma_h \end{cases} \quad (29)$$

با جایگذاری ثابت‌های ثابت‌های A_2 و B_2 در رابطه (۲۲) مقدار جابجایی در اثر اعمال تنش σ_h در شعاع r_m پس از انفصال نانولوله‌کربنی از رزین برابر است با:

$$u_{2r} = \frac{(1+v)r_m}{E} \left[\frac{X + (1-2v)}{1-X} \right] \sigma_h \quad (30)$$

مقدار انرژی کرنشی ΔU برای برای انفصال یک نانولوله‌کربنی از رزین پیرامون آن با استفاده از رابطه زیر تعیین می‌گردد:

$$\Delta U = \frac{1}{2} P (u_{2r} - u_{1r}) \quad (31)$$

که P مقدار نیروی مورد نیاز برای انفصال یک نانولوله‌کربنی از رزین پیرامون آن است:

$$P = 2\pi r_m l_n \sigma_h \quad (32)$$

با جایگذاری روابط (۲۷)، (۳۰) و (۳۲) در رابطه (۳۱) می‌توان پارامتر ΔU را تعیین کرد:

$$\Delta U = \frac{\pi l_n (1+v) r_n^2}{E} \left[\frac{1 + (1-2v)(3-2v)}{(1-X)\{1 + (1-2v)X\}} \right] \sigma_h^2 \quad (33)$$

پارامتر ΔU بر حسب تنش هیدرواستاتیک در مقیاس نانو، $\sigma_{h,n}$ ، را می‌توان با برقراری ارتباط بین σ_h و $\sigma_{h,n}$ بدست آورد:

$$\sigma_{h,n} = B_1 + \frac{A_1}{r_n^2} \quad (34)$$

بنابراین

$$\sigma_{h,n} = \left[\frac{2(1-v)}{1+(1-2v)X} \right] \sigma_h \quad (35)$$

انفصال یک نانولوله‌کربنی از رزین پیرامون آن وقتی اتفاق می‌افتد که تنش هیدرواستاتیک در مقیاس نانو با تنش بحرانی انفصال نانولوله‌کربنی از رزین در مقیاس نانو برابر می‌شود:

$$\sigma_{h,n} = \sigma_{cr} \quad (36)$$

با جایگذاری رابطه (۳۶) در رابطه (۳۵) و محاسبه σ_h برحسب σ_{cr} و جایگذاری آن در رابطه (۳۳) می‌توان نوشت:

$$\Delta U = \frac{\pi l_n (1+v) r_n^2}{4E} \left[\frac{1 + (1-2v)(3-2v)\{1 + (1-2v)X\}}{(1-X)(1-v)^2} \right] \sigma_{h,n}^2 \quad (37)$$

نکته قابل توجه آن است که مقدار شعاع بیرونی استوانه در جزء حجمی معرف در مقیاس نانو، r_m ، در این گام مشخص نیست اما می‌توان با استفاده از

$$\left\{ \left[\frac{(3k_n - \lambda_n + 2\mu_p)\{3(k_m - k_p) - (\lambda_m - \lambda_p)\}}{(3k_p - \lambda_p + 2\mu_p)(3k_m - \lambda_m + 2\mu_m)} \right] \left(\frac{r_p}{r_m} \right) + \left[\frac{(3k_m - \lambda_m + 2\mu_p)\{3(k_p - k_n) - (\lambda_p - \lambda_n)\}}{(3k_p - \lambda_p + 2\mu_p)(3k_m - \lambda_m + 2\mu_m)} \right] \left(\frac{r_n}{r_m} \right)^2 \right\}$$

در نهایت با محاسبه خواص الاستیک و ضخامت فاز میانی، می‌توان مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت را پیش‌بینی کرد:

$$G_{IC,nc} = G_{IC,m}(1 - V_{fn}) + \Delta G \quad (52)$$

که $G_{IC,nc}$ مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی نانوکامپوزیت و $G_{IC,m}$ مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی پلیمر خالص است.

۳- تخمین چگالی و نسبت حجمی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت
طبق مرجع [۲۴] درصد نسبت حجمی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت از طریق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$V_{fn} = \frac{W_{fn}}{W_{fn} + (\rho_n/\rho_m) - (\rho_n/\rho_m)W_{fn}} \quad (53)$$

که W_{fn} درصد نسبت وزنی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت، ρ_n و ρ_m به ترتیب چگالی نانولوله‌های کربنی و رزین هستند. چگالی نانولوله‌های کربنی با توجه به چگالی صفحه گرافن، ρ_g ، بدست می‌آید:

$$\rho_n = \frac{\rho_g(r_n^2 - r_i^2)}{r_n^2} \quad (54)$$

که r_i شعاع داخلی میانگین نانولوله‌های کربنی است.

۴- مقادیر مرتبط با فاز میانی

تحقیقات زیادی به فهم صحیح و مطالعه کامپوزیت‌های پلیمری مبتنی بر نانولوله‌های کربنی اختصاص داده شده است که مربوط به مشخصه‌سازی فاز میانی، روش‌های آزمایشی و محاسباتی برای بررسی فاز میانی و اثرات آن بر روی بهبود و رشد خواص مکانیکی است. محققانی نظیر باربر و همکاران [۲۵]، مک کارتی و همکاران [۲۶]، کیان و همکاران [۲۷]، جین و همکاران [۲۸] با استفاده از روش‌های مختلفی پیوند قوی بین نانولوله‌های کربنی و رزین و به عبارتی وجود فاز میانی را مشاهده و گزارش کرده‌اند. تخمین خواص مکانیکی فاز میانی از جمله مهمترین مباحثی است که در نانوکامپوزیت‌ها مورد توجه محققین قرار گرفته است [۲۹-۳۲]. مدل‌های تحلیلی زیادی برای تغییرات مدول یانگ در فاز میانی ارائه شده است. سمندری و آفاقی [۳۳] معادله حاکم بر مدول یانگ در فاز میانی را به صورت زیر پیشنهاد داده‌اند:

$$E_p(r) = E_m \left(\frac{r}{r_p} \right) + \left[E_n - E_m \left(\frac{r_p}{r_n} \right) \right] \sqrt{\left(\frac{r_p - r}{r_p - r_n} \right)^q} \quad (55)$$

که q عامل افزایش پیوسته مدول یانگ فاز میانی در راستای شعاعی است که به رفتار سطحی و شیمیایی ماده پرکننده بستگی دارد. برای پلیمرهای تقویت شده با نانولوله‌های کربنی این فاکتور برابر ۲۰ در نظر گرفته شده است [۳۴]. مدول یانگ میانگین فاز میانی، E_p ، را می‌توان از طریق رابطه زیر محاسبه نمود:

$$E_p = \frac{1}{r_p - r_n} \int_{r_n}^{r_p} E_p(r) dr \quad (56)$$

هو و همکاران [۳۵] برای توصیف واکنش بین سطح خارجی نانولوله‌های کربنی و رزین پیرامون آن در مقیاس اتمی، مدلی را براساس شبیه

$$\frac{d^2 u_r}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_r}{dr} - \frac{u_r}{r^2} = 0 \quad (43)$$

می‌توان تغییرمکان در راستای شعاعی در فازهای مختلف را به صورت رابطه (۴۴) بیان کرد.

$$\begin{cases} u_r^n = B_n r + \frac{A_n}{r}, & r \in [0, r_n] \\ u_r^p = B_p r + \frac{A_p}{r}, & r \in (r_n, r_p] \\ u_r^m = B_m r + \frac{A_m}{r}, & r \in (r_p, r_m] \end{cases} \quad (44)$$

که u_r^n ، u_r^p و u_r^m به ترتیب تغییرمکان شعاعی در نانولوله‌های کربنی، فاز میانی و رزین، و r_n ، r_p و r_m به ترتیب شعاع بیرونی نانولوله‌های کربنی، فاز میانی و رزین هستند. A_n و B_n ثابت‌های مربوط به تغییرمکان در راستای شعاعی نانولوله‌های کربنی، A_p و B_p ثابت‌های مربوط به تغییرمکان در راستای شعاعی فاز میانی، و A_m و B_m ثابت‌های مربوط به تغییرمکان در راستای شعاعی رزین هستند. با محاسبه میدان کرنش در دستگاه مختصات استوانه‌ای براساس تغییرمکان‌ها در راستای شعاعی و سپس استفاده از روابط بین میدان‌های تنش و کرنش می‌توان میدان تنش را به صورت زیر نوشت [۲۳]:

$$\sigma_{rr,i} = (3k_i - \lambda_i)B_i - \frac{2A_i\mu_i}{r^2} = 0 \quad (45)$$

که $i = n, p, m$ ، k_i مدول حجمی، و λ_i و μ_i ثابت‌های لامه هستند و به صورت زیر تعریف می‌شوند [۲۳]:

$$k_i = \frac{E_i}{3(1 - 2\nu_i)} \quad (46)$$

$$\mu_i = \frac{E_i}{2(1 + \nu_i)} \quad (47)$$

$$\lambda_i = \frac{E_i\nu_i}{(1 + \nu_i)(1 - 2\nu_i)} \quad (48)$$

برای این مسئله، شرایط مرزی و پیوستگی برای تنش به صورت زیر هستند:

$$\begin{cases} \sigma_r^n|_{r=r_n} = \sigma_{cr} \\ \sigma_r^p|_{r=r_n} = \sigma_{cr} \\ \sigma_r^p|_{r=r_p} = \sigma_r^m|_{r=r_p} \\ \sigma_r^m|_{r=r_m} = \sigma_n \end{cases} \quad (49)$$

همچنین شرایط پیوستگی برای تغییرمکان‌ها در راستای شعاعی به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$\begin{cases} u_r^n|_{r=r_n} = u_r^p|_{r=r_n} \\ u_r^p|_{r=r_p} = u_r^m|_{r=r_p} \end{cases} \quad (50)$$

با توجه به شرایط مرزی و پیوستگی و اعمال آنها بر میدان‌های تنش و تغییرمکان در نانولوله‌های کربنی، فاز میانی و رزین، می‌توان درایه‌ای از تنسور تمرکز تنش کلی هیدرواستاتیک در آستانه رخداد پدیده انفصال را تخمین زد:

$$\frac{1}{H_h} = \left(\frac{3k_m - \lambda_m}{3k_n - \lambda_n} \right) \left\{ \left[\frac{(3k_p - \lambda_p + 2\mu_m)(3k_n - \lambda_n + 2\mu_p)}{(3k_p - \lambda_p + 2\mu_p)(3k_m - \lambda_m + 2\mu_m)} \right] + \left[\frac{2(\mu_m - \mu_p)\{3(k_p - k_n) - (\lambda_p - \lambda_n)\}}{(3k_p - \lambda_p + 2\mu_p)(3k_m - \lambda_m + 2\mu_m)} \right] \left(\frac{r_n}{r_p} \right)^2 \right\} - \left(\frac{2\mu_m}{3k_n - \lambda_n} \right) \quad (51)$$

لازم برای رشد مایکروتکرک‌های بوجود آمده ناشی از انفصال نانولوله‌ها است. در نانوکامپوزیت تقویت شده با ۰/۵ درصد وزنی نانولوله‌های کربنی دو جداره، مقادیر مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی اختلاف نتایج روش‌های تجربی و تئوری افزایش می‌یابد و مقدار تئوری برخلاف دو درصد وزنی دیگر از مقدار تجربی بزرگتر است. این اختلاف را می‌توان به کلوخه شدن نانولوله‌های کربنی در روش تجربی، عدم لحاظ کلوخه شدن و اثر نانولوله‌های کربنی بر یکدیگر و همین‌طور فرض مستقیم بودن نانولوله‌ها در روش تئوری نسبت داد.

جدول ۱ ویژگی‌های نانوکامپوزیت و اجزای آن [۱۰، ۳۶]

ویژگی	نماد	مقدار	واحد
شعاع داخلی نانولوله‌های کربنی دو جداره	r_{in}	۱/۰۵	نانومتر
شعاع خارجی نانولوله‌های کربنی دو جداره	r_n	۱/۴۰	نانومتر
شعاع خارجی فاز میانی	r_p	۱/۸۲	نانومتر
طول نانولوله‌های کربنی	l_n	۱۰	مایکرومتر
چگالی رزین	ρ_m	۱/۱۹	گرم بر سانتی‌متر مربع
چگالی صفحه گرافن	ρ_g	۲/۲۵	گرم بر سانتی‌متر مربع
مدول یانگ نانولوله‌های کربنی دو جداره	E_n	۱۰۰۰	گیگاپاسکال
مدول یانگ پلیمر اپوکسی	E_m	۲/۶	گیگاپاسکال
نسبت پواسون رزین	ν_m	۰/۳۵	---
نسبت پواسون فازمیانی	ν_p	۰/۳۵	---
نسبت پواسون نانولوله‌های کربنی دو جداره	ν_n	۰/۲۷	---
نسبت پواسون نانوکامپوزیت	ν	۰/۳۵	---
استحکام کششی رزین	S	۶۳/۸	مگاپاسکال
مود اول چقرمگی شکست رزین خالص	$K_{Ic,m}$	۰/۶۵	مگاپاسکال در مجذور متر
مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی رزین خالص*	$G_{Ic,m}$	۰/۱۴۳	کیلوژول بر متر مربع

* با استفاده از رابطه (۱۳)

جدول ۲ مدول یانگ، چقرمگی شکست نانوکامپوزیت و درصد حجمی به ازای درصدهای مختلف نانولوله کربنی دو جداره [۱۰]

پارامتر	۰/۱	۰/۳	۰/۵
مدول یانگ (گیگاپاسکال)	۲/۷۸۵	۲/۸۸۵	۲/۷۹۰
چقرمگی شکست (مگاپاسکال در مجذور متر)	۰/۷۶	۰/۸۵	۰/۸۵
درصد حجمی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت*	۰/۱۲۱	۰/۳۴۱	۰/۵۴۷

* با استفاده از رابطه (۵۳)

جدول ۳ پیش‌بینی مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی (kJ/m²) نانوکامپوزیت و مقایسه آن با نتایج تجربی

روش	۰/۱	۰/۳	۰/۵
تجربی [۱۰]	۰/۱۸۲	۰/۲۲۰	۰/۲۲۷
مدل حاضر	۰/۱۵۸	۰/۲۰۰	۰/۲۷۲
خطا (%)	-۱۳/۱	-۹/۱	۱۹/۸

سازی دینامیک مولکولی ارائه کرده‌اند. این مدل‌سازی نشان می‌دهد که فاصله تعادلی بین اتم‌های H در زنجیره پلیمر و اتم‌های C در نانولوله کربنی از ۰/۲۸۵۱ تا ۰/۵۴۴۵ نانومتر است که به طور میانگین برابر ۰/۴۲ نانومتر فرض می‌شد.

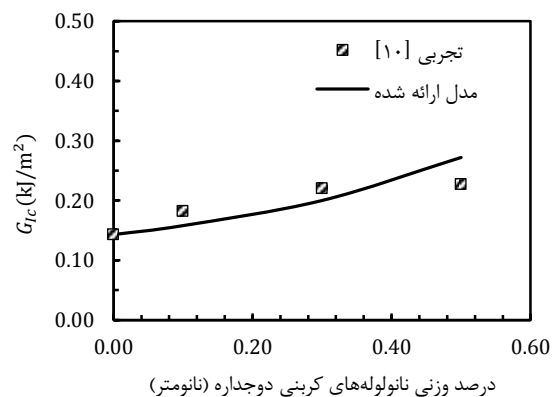
۵- اعتبار سنجی مدل ارائه شده

برای اعتبارسنجی مدل ارائه شده در این مقاله، براساس مطالعات تجربی سایر مقالات، اثر جدایش نانولوله‌های کربنی بر مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی پلیمرها مورد بررسی قرار گرفته است. در این تحقیق سه مطالعه موردی برای بررسی اثر جدایش نانولوله‌های کربنی از رزین پیرامون آن و همچنین اثر تغییرات درصد وزنی و پارامترهای هندسی بر مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی مورد بررسی قرار است.

۵-۱- مطالعه موردی اول

گاجنی و همکاران [۱۰] افزودن نانولوله‌های کربنی را به عنوان راهکاری مناسب جهت بهبود خواص مکانیکی و چقرمگی شکست اپوکسی مورد بررسی قرار دادند. نانوکامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی دو جداره و افزایش قابل توجهی را در مقدار چقرمگی شکست نسبت به رزین اپوکسی خالص (۰/۶۵ مگاپاسکال بر مجذور متر) دارد. سایر ویژگی‌های این نانوکامپوزیت‌ها در جدول ۱ نشان داده شده‌اند. در جدول ۲ مدول یانگ و چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌ها به ازای درصدهای وزنی مختلف ذکر شده‌اند. همچنین در این جدول درصد حجمی‌های متناظر با ۳ درصد وزنی مختلف با استفاده از رابطه (۵۳) محاسبه شده‌اند.

طبق جدول ۳، نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده در این تحقیق نشان می‌دهند که مکانیزم جدا شدن نانولوله‌های کربنی رزین پیرامون آن در ناحیه فرایند شکست اثر مهمی بر مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی دارند. همانطور که از شکل ۵ برمی‌آید با افزایش درصد وزنی و یا حجمی نانولوله‌های کربنی مقادیر مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی در هر دو روش تجربی و تئوری افزایش می‌یابند.



شکل ۵ اثر درصد وزنی نانولوله‌های کربنی دو جداره بر مقدار مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی

برای نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با ۰/۱ و ۰/۳ درصد وزنی نانولوله‌های کربنی، مقادیر نرخ رهایی انرژی کرنشی بدست آمده از روش تئوری کمتر از تجربی است و این اختلاف را می‌توان به عدم لحاظ نرخ رهایی انرژی کرنشی

۵-۲- مطالعه موردی دوم

آیت‌اللهی و همکاران [۸]، اثر افزودن نانولوله‌های کربنی چندجداره را به عنوان راهکاری مناسب جهت افزایش مود اول چقرمگی شکست اپوکسی مورد بررسی قرار داد. ایشان، نانولوله کربنی چندجداره را برای یافتن درصد وزنی و اندازه نانولوله بهینه جهت افزایش خواص مکانیکی و چقرمگی شکست مطالعه کردند.

مدول یانگ نانولوله‌های کربنی و نسبت‌های پواسون رزین، فاز میانی، نانولوله‌های کربنی و نانوکامپوزیت‌ها مطابق جدول ۱ فرض می‌شوند. هر چند که در این مقاله مقادیر قطر داخلی گزارش نشده اما با توجه به مقدار مساحت سطحی ویژه نانولوله‌های چندجداره و روابط ارائه شده در مرجع [۳۷] می‌توان این پارامتر را محاسبه نمود (جدول ۴). همچنین ضخامت فاز میانی نیز برابر با ۰/۴۲ نانومتر فرض می‌شود. چگالی رزین و چگالی صفحه گرافن به ترتیب ۱/۱۱ و ۲/۱ گرم بر سانتی‌متر مکعب هستند. درصد حجمی نانولوله‌های کربنی برای درصدهای وزنی و نانولوله‌های مختلف با توجه به رابطه (۵۳) قابل تخمین هستند. لازم بذکر است که استحکام رزین خالص برابر ۶۸/۳۵ مگاپاسکال گزارش شده است.

همانطور که در جدول ۵ مشاهده می‌گردد برای نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با ۰/۱ درصد وزنی نانولوله‌های کربنی، نتایج پیش‌بینی شده با استفاده از مدل حاضر کمتر از نتایج تجربی است. عدم لحاظ نرخ رهایی انرژی کرنشی لازم برای رشد میکروتکرک‌های بوجود آمده ناشی از انفصال نانولوله‌های کربنی از رزین پیرامون را می‌توان عامل این اختلاف بیان نمود. با افزایش درصد وزنی نانولوله‌های کربنی چندجداره حل شده در نانوکامپوزیت‌ها، مقدار خطای نتایج تئوری نسبت به تجربی کاهش یافته است (جدول ۵). در مقایسه با مطالعه موردی اول، در ۰/۵ درصد وزنی نانولوله‌های کربنی، کاهش اختلاف نتایج تئوری و تجربی، را می‌توان به عدم کلوخه شدن نانولوله‌ها در مطالعات تجربی آیت‌اللهی و همکاران [۸] بیان کرد. اما همچنان عدم اثر نانولوله‌های کربنی بر یکدیگر، عدم لحاظ تسلیم شدن رزین و همین طور فرض مستقیم بودن نانولوله‌ها را می‌توان به عنوان عوامل وجود خطا ذکر نمود.

جدول ۴ ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی چند جداره [۸] استفاده شده در مدل حاضر

قطر خارجی	قطر داخلی	رنج طول	مساحت سطحی ویژه
متوسط (nm)	متوسط (nm)	(μm)	میانگین (m^2/g)
۱۵	۱۰	۳۰-۱۰	۲۰۵

جدول ۵ مقایسه نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربنی چندجداره به روش تجربی و تئوری

درصد وزنی	درصد حجمی	مدول یانگ (GPa)	چقرمگی شکست ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)	نرخ رهایی انرژی کرنشی (kJ/m^2)	
				تجربی [۸]	مدل حاضر
۰	۰	۳/۱۵	۱/۶۲	۰/۷۳۱	---
۰/۱	۰/۰۹۵	۳/۲۴	۱/۸۷	۰/۹۴۷	۰/۷۸۴
۰/۵	۰/۴۸۵	۳/۵۱	۲/۰۴	۱/۰۵۰	۱/۰۹۶

۵-۳- مطالعه موردی سوم

گاجنی و همکاران [۱۱] افزودن نانولوله‌های کربنی تک جداره را بر خواص مکانیکی و چقرمگی شکست اپوکسی مورد بررسی قرار دادند. در جدول ۶ شعاع‌های داخلی و خارجی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره طبق گزارش گاجنی

و همکاران، و شعاع فاز میانی در هر نانوکامپوزیت ذکر شده‌اند. سایر ویژگی‌های این نانوکامپوزیت‌ها در جدول ۱ نشان داده شده‌اند. در جدول ۷ مدول یانگ و چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های کربنی تک و چندجداره به ازای درصدهای وزنی مختلف و همچنین درصد حجمی‌های متناظر با استفاده از رابطه (۵۳) محاسبه شده‌اند. مقادیر مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های تک‌جداره براساس نتایج مطالعات تجربی [۱۱] و مدل ارائه شده در این تحقیق، در جدول ۸ با همدیگر مقایسه شده‌اند. برای نانوکامپوزیت‌های مطالعه شده توسط گاجنی و همکاران [۱۱] مقادیر نرخ رهایی انرژی کرنشی بدست آمده از روش تئوری کمتر از تجربی است، همانند حالت‌های قبل، این اختلاف را می‌توان به عدم لحاظ نرخ رهایی انرژی کرنشی لازم برای رشد میکروتکرک‌های بوجود آمده ناشی از انفصال نانولوله‌ها و یا تسلیم رزین پیرامون نانولوله‌های کربنی دانست.

جدول ۶ طول، شعاع‌های داخلی و خارجی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و شعاع فاز میانی مرتبط با آن‌ها [۱۱]

ویژگی	نماد	مقدار	واحد
شعاع داخلی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره	r_{in}	۱/۰۵	نانومتر
شعاع خارجی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره	r_n	۱/۲۲۵	نانومتر
طول نانولوله‌های کربنی تک‌جداره	l_n	۱۰	میکرومتر
شعاع خارجی فاز میانی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره	r_p	۱/۶۴۵	نانومتر

جدول ۷ مدول یانگ، چقرمگی شکست نانوکامپوزیت و درصد حجمی به ازای درصدهای مختلف نانولوله کربنی تک‌جداره [۱۱]

پارامتر	۰/۰۵	۰/۱
مدول یانگ (گیگاپاسکال)	۲/۶۸۱	۲/۶۹۱
چقرمگی شکست (مگاپاسکال در مجذور متر)	۰/۷۲	۰/۸۰
درصد حجمی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت	۰/۰۹۵	۰/۱۷۲

جدول ۸ مود اول نرخ رهایی انرژی کرنشی بحرانی (kJ/m^2) نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربنی تک‌جداره

روش	۰/۰۵	۰/۱
تجربی [۱۱]	۰/۱۷۰	۰/۲۰۹
مدل حاضر	۰/۱۵۸	۰/۱۷۵
خطا	-۷/۱	-۱۶/۲

۶- جمع‌بندی

آنچه که در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفت، ارائه مدلی تحلیلی بر مبنای مفهوم انرژی کرنشی برای بررسی اثر پدیده جدایش نانولوله‌های کربنی بر نرخ رهایی انرژی کرنشی در نانوکامپوزیت‌ها است. از مزایای مدل حاضر می‌توان موارد ذیل را عنوان کرد:

- پیش‌بینی نرخ رهایی انرژی کرنشی ناشی از پدیده جدایش نانولوله‌های کربنی از رزین اطراف آن

- Content," American Chemical Society, Vol. 3, No. 12, pp. 3884-3890, 2009.
- [10] Gojny, F. H., Wichmann, M. H. G., Kopke, U., Fiedler, B., and Schulte, K., "Carbon Nanotube-Reinforced Epoxy-Composites: Enhanced Stiffness and Fracture Toughness at Low Nanotube Content," *Composites Science and Technology*, Vol. 64, pp. 2363-2371, 2004.
- [11] Gojny, F. H., Wichmann, M. H. G., Fiedler, B., and Schulte, K., "Influence of Different Carbon Nanotubes on the Mechanical Properties of Epoxy Matrix Composites - A comparative study," *Composites Science and Technology*, Vol. 65, pp. 2300-2313, 2005.
- [12] Ganguli, S., Bhuyan, M., Allie, L., and Aglan, H., "Effect of Multi-Walled Carbon Nanotube Reinforcement on the Fracture Behavior of a Tetra-Functional Epoxy," *Journal of Materials Science*, Vol. 40, pp. 3593 - 3595, 2005.
- [13] Ashrafi, B., Guan, J., Mirjalili, V., Zhang, Y., Chun, L., Hubert, P., Simard, B., Kingston, C. T., Bourne, O., and Johnston, A., "Enhancement of Mechanical Performance of Epoxy/Carbon Fiber Laminate Composites Using Single-Walled Carbon Nanotubes," *Composites Science and Technology*, Vol. 71, pp. 1569-1578, 2011.
- [14] Thostenson, E. T., and Chou, T., "Processing-Structure-Multi-Functional Property Relationship in Carbon Nanotube/Epoxy Composites", *Carbon*, Vol. 44, pp. 3022-3029, 2006.
- [15] Shadlou, S., "Fracture Behavior of Epoxy-Based Nanocomposites Reinforced by MWCNTs," Ph.D. thesis, Iran University of Science and Technology, Iran, 2011.
- [16] Standard Test Methods for Plane-Strain Fracture Toughness and Strain Energy Release Rate of Plastic Materials, Annual Book of ASTM Standards, D 5045, 1999.
- [17] Kinloch, A. J., and Young R. J., "Fracture Behaviour of Polymers," First edition, Elsevier Science Publishers Ltd, 1983.
- [18] Eshelby, J. D., "Elastic inclusions and inhomogeneities," *Progress in Solid Mechanics*, Vol. 2, No. 1, pp. 89-140, 1961.
- [19] Hill, R., "A Self-Consistent Mechanics of Composite Materials," *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 13, pp. 213-222, 1965.
- [20] Saouma, V. E., Lecture Notes in: Fracture mechanics, University of Colorado, 80309-800428.
- [21] 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, pp. 69-81, 2003.
- [22] Chen X. L., and Liu Y. J., "Square Representative Volume Elements for Evaluating the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites," *Computational Materials Science*, Vol. 29, pp. 1-11, 2004.
- [23] Sadd, M. H., *Elasticity Theory, Applications, and Numerics*, Elsevier Butterworth-Heinemann, USA, 2005.
- [24] Thostenson, E. T., and Chou, T. W., "On the Elastic Properties of Carbon Nanotube-Based Composites: Modelling and Characterization," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 36, pp. 573-582, 2003.
- [25] Barber, A. H., Cohen S. R., Kenig S., and Wagner H. D., "Interfacial Fracture Energy Measurements for Multi-Walled Carbon Nanotubes Pulled From a Polymer Matrix," *Composites Science and Technology*, Vol. 64, pp. 2283-2289, 2004
- [26] McCarthy, B., Coleman, J. N., Czerw, R., Dalton, A. B., Maiti, A., and Drury, A., "A Microscopic and Spectroscopic Study of Interactions between Carbon Nanotubes and a Conjugated Polymer", *J. Phys. Chem. B*, Vol. 106, pp. 2210-2216, 2002.
- [27] Lourie, O., and Wagner, H. D., "Evidence of Stress Transfer and Formation of Fracture Clusters in Carbon Nanotube Based Composites," *Composite science and technology*, Vol. 59, pp. 975-977, 1999.
- [28] Jin, L., Bower, C., and Zhou, O., "Alignment of Carbon Nanotubes in a Polymer Matrix by Mechanical Stretching," *Applied Physics Letters*, Vol. 73, No. 9, pp. 1197-9, 1998.
- [29] Frankland, S. J. V., and Harik, V. M., "Analysis of Carbon Nanotube Pull-out from a Polymer Matrix," *Surface Science*, Vol. 525, pp. 103-108, 2003.
- [30] Herasati, S., Zhang, L.C., and Ruan, H.H., "A New Method for Characterizing the Interphase Regions of Carbon Nanotube Composites," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 51, pp. 1781-1791, 2014.
- [31] Montazeri, A., and Naghdabadi, R., "Investigation of the Interphase Effects on the Mechanical Behavior of Carbon Nanotube Polymer Composites by Multiscale Modeling", *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 117, pp. 361-367, 2010.
- [32] Seidel, G. D., and Lagoudas, D. C., "Micromechanical Analysis of the Effective Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites," *Mechanics of Materials*, Vol. 38, pp. 884-907, 2006.
- [33] Saber-Samandari, S., and Afaghi-Khatibi, A., "The Effect of Interphase on the Elastic Modulus of Polymer Based Nanocomposites," *Key Eng. Mater.*, Vol. 312, pp. 199-204, 2006.
- [34] Naghdabadi, R., and Hosseini Kordkheili, S., "A Finite Element Formulation for Analysis of Functionally Graded Plates and Shells," *A. Arch Appl Mech*, Vol. 74, pp. 375-386, 2005.

- تخمین اثر تعداد لایه‌های نانولوله‌های کربنی (تک، دو و یا چندجداره) در نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌ها
- امکان مطالعه اثر درصد وزنی و یا حجمی نانولوله‌های کربنی در نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌ها
- امکان بررسی اثر نسبت منطری (نسبت طول به قطر) نانولوله‌های کربنی در نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌ها
- امکان بررسی اثر ضخامت فاز میانی در نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌ها

برای اعتبار سنجی مدل ارائه شده، با استفاده از نتایج تجربی سایر محققین، مقادیر نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت‌ها پیش‌بینی و با مقادیر تجربی مقایسه شدند. نتایج نشان دادند که مدل ارائه شده در این تحقیق در بسیاری از موارد با خطایی قابل قبول، قابلیت پیش‌بینی نرخ رهایی انرژی کرنشی را داراست. با مقایسه نتایج تجربی و مدل حاضر می‌توان یکی از عوامل خطا را بدین صورت بیان کرد که براساس مدل تحلیلی با افزایش درصد وزنی نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت مقدار نرخ رهایی انرژی کرنشی افزایش می‌یابد، درحالی‌که در مطالعات آزمایشگاهی این افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی همواره مشاهده نمی‌شود. این عامل را می‌توان به کلوخه شدن نانولوله‌های کربنی در رزین نسبت داد. لذا با توزیع یکنواخت نانولوله‌های کربنی با استفاده از اعمال روش‌های آزمایشگاهی مناسب، می‌توان افزایش انرژی کرنشی در درصد‌های وزنی بالاتر را نیز مشاهده نمود. رشد میکروترک‌های بوجود آمده ناشی از پدیده انفصال، تسلیم شدن رزین پیرامون نانولوله‌های کربنی، اثر نانولوله‌های کربنی بر یکدیگر و همین‌طور فرض مستقیم بودن نانولوله‌ها را می‌توان به عنوان دیگر عوامل افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی در رزین تقویت شده با نانولوله‌های کربنی مطرح نمود. نهایتاً، با مقایسه نتایج و براساس مدل حاضر می‌توان بیان کرد که جدایش نانولوله‌های کربنی از رزین پیرامون آن یکی از عوامل افزایش نرخ رهایی انرژی کرنشی نانوکامپوزیت نسبت به رزین خالص است.

۷- مراجع

- [1] Ritchie, R., "Mechanisms of Fatigue Crack Propagation in Metals, Ceramics and Composites: Role of Crack Tip Shielding," *Materials Science and Engineering A*, Vol. 103, pp. 15-28, 1988.
- [2] Kunz-Douglass, S., Beaumont, P. W. R. and Ashby, M. F., "A Model for the Toughness of Epoxy-Rubber Particulate Composites," *Journal of Materials Science*, Vol. 15, No. 5, pp. 1109-1123, 1980.
- [3] 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.
- [4] Salviato, M., Zappalorto, M., and Quaresimin, M., "Plastic Shear Bands and Fracture Toughness Improvements of Nanoparticle Filled Polymers: A Multiscale Analytical Model," *Composites: Part A*, Vol. 48, pp. 144-152, 2013.
- [5] 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, pp. 1683-91, 2012.
- [6] Hsieh, T. H., Kinloch, A. J., Masania, K., Sohn Lee, J., Taylor, A. C., and Springer, S., "The Toughness of Epoxy Polymers and Pibre Composites Modified with Rubber Microparticles and Silica Nanoparticles," *Journal of Materials Science*, Vol. 45, pp. 1193-210, 2010.
- [7] Shadlou, S., Alishahi, E., and Ayatollahi, M.R., "Fracture Behavior of Epoxy Nanocomposites Reinforced with Different Carbon Nano-Reinforcements," *Composite Structures*, Vol. 95, pp. 577-581, 2013.
- [8] Ayatollahi M. R., Shadlou S., and Shokrieh M. M., "Mixed Mode Brittle Fracture in Epoxy/Multi-Walled Carbon Nanotube Nanocomposites, *Engineering Fracture Mechanics*," Vol. 78, pp. 2620-2632, 2011.
- [9] Rafiee, M. A., Rafiee, J., Wang, Z., Song, H., Yu, Z., and Koratkar, N., "Enhanced Mechanical Properties of Nanocomposites at Low Graphene

- [35] Hu, N., Fukunaga, H., Lu C., Kameyama, M., and Yan B., "Prediction of Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites," Proc. Roy. Soc. A. Math. Phys. Eng. Sci., Vol. 461, pp. 1685-1710, 2005.
- [36] Palaci, I., Fedrigo, S., Brune, H., Klinke, C., Chen M., and Riedo, E., "Radial Elasticity of Multiwalled Carbon Nanotubes, Physical Review Letters," Vol. 94, 175502, 2005.
- [37] Hollertz, R., Chatterjee, S., Gutmann, H., Geiger, T., Nuesch, F. A., and Chu, B. T. T., "Improvement of Toughness and Electrical Properties of Epoxy Composites with Carbon Nanotubes Prepared by Industrially Relevant Processes," Nanotechnology, Vol. 22, No. 12, pp. 5702-9, 2011.

Archive of SID