



## بررسی تأثیر طول نانولوله و پدیده‌ی کلوخه شدن بر رفتار الاستوپلاستیک نانوکامپوزیت پلیمری

مجید کریمی<sup>۱</sup>، رحمت‌الله قاجار<sup>۲\*</sup>، عباس منتظری هدش<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۳- استادیار، مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

\* تهران، صندوق پستی ۱۹۳۹۵-۱۹۹۹، [ghajar@kntu.ac.ir](mailto:ghajar@kntu.ac.ir)

### اطلاعات مقاله

دریافت: ۹۵/۰۹/۲۱

پذیرش: ۹۶/۰۱/۲۷

### کلیدواژگان:

نانوکامپوزیت پلیمری

منحنی تنش-کرنش

کلوخه شدن

طول نانولوله

زاویه قرارگیری

### چکیده

در این مقاله خواص الاستوپلاستیک یک نانوکامپوزیت پلیمری با تکیه بر تعدادی از عوامل مقیاس مزو مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور از ترکیب روش اجزای محدود با میکرومکانیک استفاده شده است. با توجه به ماهیت پیوند ناکامل نانولوله و ماتریس، برای جایگزین کردن نانولوله و ناحیه‌ی مشترک با یک تکرارشی‌ی توپر، از روش چندمقیاسی اجزای محدود استفاده شده است. سپس با استفاده از روش میدان میانگین موری- تاناکا، منحنی‌های تنش-کرنش نانوکامپوزیت استخراج و با استفاده از آن، تأثیر زاویه‌ی قرارگیری نانولوله بر مدول یانگ، تأثیر طول نانولوله بر خواص الاستوپلاستیک و تأثیر کلوخه شدن نانولوله‌ها بر رفتار الاستوپلاستیک بررسی شده است. همچنین با بررسی طول نانولوله‌ها مشخص شد که نانولوله‌های دارای طول ۱۰ تا ۳۰۰ نانومتر، تأثیر قابل توجهی بر سفتی نانوکامپوزیت دارد، درحالی‌که تأثیر طول‌های کوتاه‌تر و بلندتر چندان قابل توجه نیست. همچنین، با صرف‌نظر از کلوخه شدن، افزایش کسر حجمی نانولوله‌ها منجر به افزایش سفتی نانوکامپوزیت می‌گردد. این در حالی است که کلوخه شدن نانولوله‌ها، منجر به کاهش سفتی نانوکامپوزیت می‌شود. تأثیر منفی این پدیده به حدی است که در برخی موارد، افزایش کسر حجمی نه تنها باعث افزایش سفتی نانوکامپوزیت نمی‌شود، بلکه آن را کاهش می‌دهد.

## Investigation of nanotubes' length and their agglomeration effects on the elastoplastic behavior of polymer-based nanocomposites

Majid Karimi<sup>1</sup>, Rahmatollah Ghajar<sup>1\*</sup>, Abbas Montazeri<sup>2</sup>

1- Faculty of Mechanical Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

2- Faculty of Materials Science and Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

\* P.O.B. 1999-19395, Tehran, Iran, [ghajar@kntu.ac.ir](mailto:ghajar@kntu.ac.ir)

### Keywords

Polymeric nanocomposite  
 Stress-strain curve  
 Agglomeration  
 Nanotube length  
 Orientation

### Abstract

In this article, elastoplastic properties of polymeric nanocomposites embedded with carbon nanotubes (CNTs) are explored with emphasis on the meso-scale phenomena. To this end, a combination of finite element method and micromechanics is implemented. Accordingly, at first, considering the non-bonded nature of nanotube/polymer interactions, a multiscale finite element method is employed to replace the matrix, CNT, and polymer atoms neighboring it with a perfectly bonded equivalent nanofiller. Subsequently, nanocomposite stress-strain curves are extracted based on the mean field homogenization approach. Using this model, the effects of CNTs orientation and their agglomeration on the mechanical behavior of nanocomposite samples are thoroughly studied. Moreover, it is found that to have an efficient reinforcing effect, the CNT length should be greater than 10 nm. On the other hand, it can be concluded that there is an optimum value of this parameter (i.e. 300 nm) above which, there is no any extra stiffening effect. Furthermore, regarding the CNTs agglomeration, it is revealed that although, theoretical investigations show that increasing CNT volume fraction (VF) leads to an increase in the stiffness, occurring this phenomenon can have a deteriorative role in terms of influencing the mechanical behavior of these nanocomposites at higher VFs.

Please cite this article using:

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.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده نمایید:

## ۱- مقدمه

پیشرفت‌های سال‌های اخیر در زمینه تولید نانولوله‌های کربنی و خواص جذاب آن‌ها، بسیاری از محققین را برای ساخت ادوات جدیدی که در آن‌ها از نانولوله‌های کربنی استفاده می‌شود، ترغیب کرده و همین امر انگیزه بررسی‌های فراوان، در زمینه بررسی خواص و کاربردهای آن‌ها شده است. بررسی‌های آزمایشگاهی و تئوری نشان داده است که نانولوله‌ها دارای خواص جذاب مکانیکی، الکتریکی و حرارتی، نوری و شیمیایی هستند [۱]. با توجه به نسبت سطح به حجم بالا و استحکام به وزن زیاد نانولوله‌ها [۲]، یکی از کاربردهای آن‌ها، استفاده از آن‌ها به‌عنوان تقویت‌کننده‌ی یک ماده‌ی کامپوزیتی است. بررسی‌های انجام‌شده نشان می‌دهد که افزودن مقدار اندکی نانولوله‌ی کربنی به پلیمر، می‌تواند منجر به بهبود قابل توجه سفتی آن شود [۳، ۴].

برای مطالعه‌ی آزمایشگاهی نانوکامپوزیت‌ها، تجهیزات آزمایشگاهی گران‌قیمت و پیچیده‌ای مورد نیاز است. علاوه بر این، ساخت نانوکامپوزیت‌ها نیز دارای چالش‌های خاصی است، به‌عنوان مثال عواملی مانند کاپرالیته، طول، نحوه پراکندگی، توزیع زاویه‌ای، موج‌دار شدن، منحنی شدن و کلوخه شدن نانولوله‌ها از جمله عواملی هستند که خواص نانوکامپوزیت را تحت تأثیر قرار می‌دهند ولی کنترل آن‌ها بسیار پیچیده و در برخی موارد غیرممکن است [۱]. همین امر موجب اقبال محققین نسبت به استفاده از شبیه‌سازی شده است. به‌طور کلی، روش‌های بررسی نانوکامپوزیت‌های پلیمری معمولاً به سه گروه اصلی قابل تقسیم هستند که عبارتند از شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی (دینامیک مولکولی و غیره)، در مقیاس میکرو (دینامیک براونی و غیره) و مقیاس مزو و ماکرو (میکرومکانیک و محیط پیوسته‌ی معادل) [۵]. شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی منابع محاسباتی و زمان زیادی نیاز دارد که امکان استفاده از آن‌ها را برای زمان‌های کوتاه و مدل‌های کوچک محدود می‌سازد [۵]. پیچیدگی و زمان‌بر بودن شبیه‌سازی‌های مقیاس مولکولی و میکرو، موجب اقبال محققین به روش‌های سریع‌تر شده است، که در ادامه به برخی از کارهای انجام‌شده اشاره می‌شود.

یکی از روش‌های نسبتاً سریع شبیه‌سازی نانوکامپوزیت‌ها، استفاده از روش اجزای محدود است. در این راستا تسرپس و همکاران [۶]، رفتار کششی نانوکامپوزیت پلیمری را با استفاده از پتانسیل مورس بهبودیافته مورد بررسی قرار دادند. لی و چو [۷]، با معادل قرار دادن انرژی یک المان تیر با ساده‌ترین شکل توابع پتانسیل، روشی برای تعیین خواص طولی صفحه‌ی گرافن و نانولوله ارائه کردند. این مدل از طرف سایر محققین مورد اقبال قرار گرفته و برای بررسی رفتار نانولوله‌های محصور در ماتریس [۸]، تأثیر طول نانولوله [۹]، تأثیر در نظر گرفتن ناحیه میان‌فازی [۱۰] و بهبود پایداری نانوکامپوزیت پلیمری [۱۱] مورد استفاده قرار گرفته است. جوشی و آپادهیای [۱۲] با استفاده از این روش، تأثیر آرایش نانولوله‌ها را بر مدول یانگ نانوکامپوزیت مورد مطالعه قرار دادند. در تمامی تحقیقات مذکور، از المان‌های تیر، خرپا یا فنر استفاده شده است. هوانگ و رودریگ [۱۳]، با استفاده از روش اجزای محدود، تأثیر زاویه نانولوله را بر رفتار کششی نانوکامپوزیت بررسی کردند. علاوه بر این، همین محققین در مرجع [۱۴] به بررسی استفاده از المان‌های مختلف و مقایسه‌ی آن‌ها پرداخته‌اند.

به‌عنوان نمونه‌ی دیگری از روش‌های سریع، می‌توان به روش میکرومکانیک اشاره کرد که اساس و روابط حاکم بر آن، اصول مکانیک محیط پیوسته بوده و در بسیاری از موارد، فرض می‌شود که بین نانولوله و پلیمر

پیوند کامل وجود دارد که با فیزیک واقعی مسئله متفاوت است [۱۵، ۱۶]. زارع و گرمایی [۱۷] و برناردو و همکاران [۱۸]، در بخشی از مقاله خود به مرور روش‌های روش‌های میکرومکانیکی مورد استفاده برای شبیه‌سازی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری پرداخته‌اند. سیدل و لاگوداس [۱۹]، با استفاده از روش استوانه‌های کامپوزیتی و روش موری-تاناکا و خودسازگار خواص نانوکامپوزیت را مورد بررسی قرار دادند. ترکیب روش اجزای محدود و میکرومکانیک، منجر به ارائه جواب‌های قابل قبول‌تری شده است، زیرا با استفاده از روش اجزای محدود اصلاح‌شده، (برای مدل‌سازی بهتر خواص نانوکامپوزیت‌ها)، می‌توان جزئیات مربوط به مقیاس نانو را مورد بررسی قرار داد و با استفاده از میکرومکانیک جزئیات مربوط به مقیاس میکرو را بررسی کرد. در این راستا، آدگارد و همکاران [۲۰]، با استفاده از مدل اجزای محدود خرپای معادل و روش موری-تاناکا، یک مدل محیط پیوسته برای پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت ارائه کرده و با استفاده از آن خواص الاستیک نانوکامپوزیت را مورد بررسی قرار دادند. فیشر و همکاران [۲۱]، با استفاده از روش اجزای محدود و قانون اختلاط، پدیده موج‌دار شدن نانولوله را مطالعه نمودند. همچنین، مگوئید و همکاران [۲۲]، تأثیر کسر حجمی را بر خواص نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار دادند.

با توجه به اینکه در بسیاری از بررسی‌های قبلی به خواص الاستیک نانوکامپوزیت پرداخته شده و در مورد عوامل مربوط به مقیاس مزو بررسی‌های کمتری شده است، بنابراین، در این تحقیق از ترکیب روش اجزای محدود و میکرومکانیک برای بررسی چند عامل مختلف استفاده خواهد شد. از جمله این عوامل می‌توان به تأثیر طول نانولوله و نیز عامل کلوخه شدن اشاره کرد.

## ۲- مدل اجزای محدود چندمقیاسی

مدل المان حجمی مورد استفاده در این بررسی، یک مدل چندمقیاسی توأمانی است و از سه قسمت (۱) نانولوله‌ی کربنی، (۲) ناحیه‌ی بین‌مرزی و (۳) پلیمر تشکیل شده است. اساس این مدل، استفاده از اصول مکانیک سازه‌ای است که اولین بار توسط لی و چو [۷] پیشنهاد گردید. در این مدل، از یک المان حجمی نماینده استفاده می‌شود که از سه قسمت نانولوله‌ی کربنی، ناحیه‌ی بین‌مرزی و پلیمر تشکیل شده است. در ادامه، اجزای این مدل توضیح داده می‌شود.

## ۲-۱- مدل مکانیک سازه‌ای نانولوله کربنی

در بررسی‌های محققین مختلف برای مدل‌سازی نانولوله با استفاده از روش اجزای محدود، از المان‌های مختلفی مانند المان‌های توپر<sup>۱</sup> و پوسته استفاده شده است. مشکل اصلی این المان‌ها این است که خواص نانولوله باید به‌صورت یک ماده‌ی بالک وارد تحلیل گردد و لازم است که این خواص در شروع تحلیل (مثلاً با استفاده از روش دینامیک مولکولی یا مکانیک سازه‌ای ضرایب سفتی تعیین شود) مشخص گردد این در حالی است که برای استفاده از المان‌های تیر کافی است خواص پیوندهای کربن-کربن مشخص شده و ضرایب سفتی نانولوله مستقیماً وارد تحلیل می‌شود. علاوه بر این، استفاده از المان‌های تیر، فرض هندسی خاصی نیاز نداشته و از تساوی انرژی هارمونیک‌ها با انرژی مودهای تغییرشکل تیر، خواص نانولوله را تخمین می‌زند. بنابراین، المان تیر روشی مستقیم برای پیاده‌سازی جزئیات هندسی

<sup>۱</sup> Solid

پلاستیک همسانگرد با سخت‌شوندگی چندخطی استفاده شده است [۲۵].

برای بررسی‌های میکرومکانیکی، از مدل سخت‌شوندگی وُچ<sup>۱</sup> استفاده شده است [۲۷] که اعتبار مناسبی برای شبیه‌سازی تا تنش نهایی دارد. مطابق این مدل، سخت‌شوندگی به‌صورت رابطه‌ی (۵) قابل بیان است:

$$\sigma_e = \sigma_Y^0 + (\sigma_Y^\infty - \sigma_Y^0) \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_e^p}{\varepsilon_p^\infty}\right) \right] \quad (5)$$

که در رابطه‌ی (۵)،  $\sigma_Y^0$ ،  $\sigma_Y^\infty$  و  $\varepsilon_p^\infty$  پارامترهای مدل هستند و از طریق برازش منحنی تنش-کرنش آزمایش کشش تک‌محوره بر داده‌های آزمایشگاهی تعیین می‌شوند. منظور از  $\sigma_e$  و  $\varepsilon_e^p$  تنش و کرنش مؤثر فون میز ماتریس هستند که با توجه به یک‌سویه<sup>۲</sup> بودن بارگذاری، به‌صورت رابطه‌ی (۶) تعریف می‌شوند:

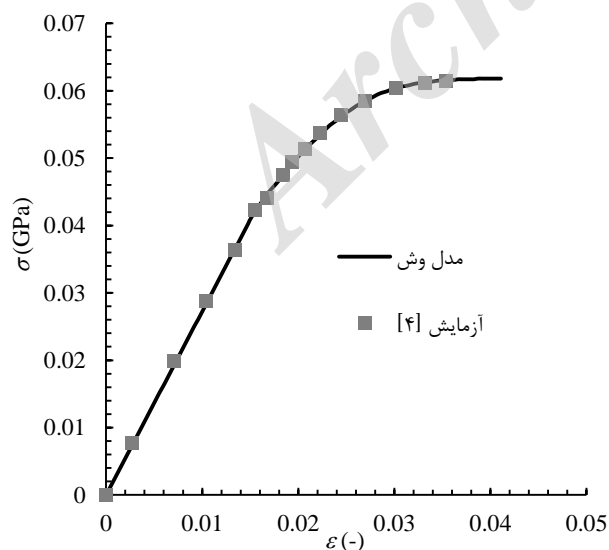
$$\sigma_e = \left(\frac{3}{2} \sigma'_{ij} \sigma'_{ij}\right)^{1/2}, \quad \varepsilon_e^p = \left(\frac{2}{3} \varepsilon'_{ij} \varepsilon'_{ij}\right)^{1/2} \quad (6)$$

که در رابطه‌ی (۶)،  $\sigma'_{ij}$  و  $\varepsilon'_{ij}$  به‌ترتیب مولفه‌های تنش انحرافی و کرنش پلاستیک هستند. مقدار پارامترها که از طریق برازش منحنی معادله‌ی (۵) بر داده‌های مرجع [۴] به‌دست می‌آید، به‌صورت  $\sigma_Y^0 = 0.423 \text{ GPa}$ ،  $\sigma_Y^\infty = 0.7235 \text{ GPa}$  و  $\varepsilon_p^\infty = 0.03164$  است. همچنین  $\nu = 0.4$  و  $E = 21 \text{ GPa}$  در نظر گرفته شده است (شکل ۱).

مدول یانگ سکانت  $E^s$  و ضریب پواسون سکانت  $\nu^s$  از رابطه‌ی (۷) قابل تعیین است [۲۴]:

$$E^s = \frac{1}{1/E + \nu^s/E} \quad (7)$$

که در رابطه‌ی (۷)،  $E$  مدول یانگ الاستیک و  $\nu$  ضریب پواسون ماتریس است. شکل ۱ نتیجه‌ی برازش منحنی وُچ و داده‌های آزمایشگاهی است. مشاهده می‌شود که داده‌های آزمایشگاهی با مدل وُچ همخوانی خوبی داشته و مدل مناسبی است. فرض می‌شود که ماتریس و اینکلوژن (در صورت غیرخطی بودن) در مدل وُچ صدق کنند.



شکل ۱ منحنی تنش-کرنش داده‌های آزمایشگاهی و برازش مدل وُچ بر آن‌ها

<sup>1</sup> Voce  
<sup>2</sup> Monotonic

(مثل محل قرارگیری اتم‌ها) و محاسبه خواص نانولوله‌های کربنی است. در ادامه ایده‌های مربوط به این شیوه‌ی مدل‌سازی ارائه می‌گردد.

نانولوله کربنی یک ساختار مشبک کربنی است که بین اتم‌های آن، برهم‌کنش‌های نیرویی وجود دارد. برای توصیف این نیروها، معمولاً از انرژی‌های پتانسیل مربوط به تغییرشکل استفاده می‌شود. با صرف‌نظر از انرژی‌های غیرپیوندی، انرژی کل نانولوله‌ی کربنی به‌صورت رابطه‌ی (۱) قابل بیان است [۲۳]:

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum (U_\varphi + U_\omega) \quad (1)$$

که در معادله‌ی (۱)،  $U_r$ ،  $U_\theta$ ،  $U_\varphi$  و  $U_\omega$  به ترتیب انرژی‌های پیوندی مربوط به کشش پیوند، تغییر زاویه‌ی خمشی پیوند، پیچش پیوند و پیچش صفحه هستند. انرژی مربوط به تغییرشکل کششی  $U_r$ ، خمشی  $U_\theta$  و پیچشی  $U_\tau = U_\varphi + U_\omega$  پیوندهای کربن-کربن به‌صورت رابطه‌ی (۲) بیان می‌شود:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2$$

$$U_\tau = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \tau)^2 \quad (2)$$

مشاهده می‌شود که انرژی‌های ارائه‌شده در رابطه (۲)، مشابه انرژی کرنشی یک المان تیر است. اکنون، با معادل قرار دادن انرژی‌های میدان نیروی امبر [۷] در رابطه (۱)، با انرژی تغییرشکل المان تیر، می‌توان ثابت‌های مربوط به تغییرشکل محوری، خمشی و پیچشی را تعیین کرد:

$$k_r = \frac{EA}{L}, \quad k_\theta = \frac{EI}{L}, \quad k_\tau = \frac{GJ}{L} \quad (3)$$

که ثابت‌های  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\tau$  برای میدان نیروی امبر، به‌ترتیب به‌صورت  $10^{-11} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$ ،  $10^{-17} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$  و  $10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$  است [۲۴]. با حل معادله‌ی (۳) و با فرض اینکه مقطع تیر معادل دایره‌ای به قطر  $d$  باشد، خواص این المان به‌صورت روابط (۴) است:

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad A = \frac{\pi d^2}{4}, \quad J = 2I = \frac{\pi d^4}{32}$$

$$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}, \quad G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\theta^2} \quad (4)$$

روابط (۴)، اطلاعات لازم برای المان BEAM4 در نرم‌افزار انسیس را فراهم می‌آورد. سایر ملاحظات مورد نیاز برای مدل‌سازی هندسه‌ی نانولوله در مرجع [۲۴] ارائه شده است.

## ۲-۲- خواص ماتریس

مدل‌سازی اتمی زنجیره‌های پلیمری نیاز به محاسبات زیادی دارد. از سوی دیگر، با توجه به فشردگی پلیمر نسبت به نانولوله، می‌توان آن را به‌صورت یک ماده‌ی محیط پیوسته در نظر گرفت و آن را با استفاده از المان سه‌بعدی Solid185 مدل کرد. این المان یک المان سه‌بعدی ۲۰ گره‌ای است که در هر گره دارای سه درجه آزادی انتقالی است. اندازه المان‌های پلیمر مطابق مرجع [۲۴]، به‌اندازه حلقه‌های شش‌وجهی انتخاب شده است. نمودار تنش-کرنش مربوط به ماتریس، از آزمایش کشش اپوکسی ارائه‌شده در مرجع [۴] انتخاب شده است. مدل‌های پلاستیک موجود در نرم‌افزارهای اجزای محدود، غالباً در فضای تنش پیاده‌سازی شده‌اند و براساس شرط پایداری دراکر، این مدل‌ها قادر به مدل‌سازی قسمت نرم‌شونده نمودار تنش-کرنش ماده نیستند. بنابراین، برای تعیین سفتی ماتریس در نرم‌افزار انسیس، از مدل

### ۳-۲- ناحیه‌ی بین‌مرزی

معمول‌ترین شیوه‌ی برهم‌کنش نانولوله با ماتریس، از طریق برهم‌کنش‌های غیرپیوندی است [۱] که در حالت طبیعی که هیچ گروه عاملی‌ای بین دو فاز وجود ندارد، از طریق برهم‌کنش‌های واندروالس رخ می‌دهد (در صورت وجود گروه عاملی روی نانولوله‌ها، ماتریس می‌تواند به درون نانولوله نفوذ کند). با توجه به این امر، در این بررسی از مدل غیرپیوندی استفاده شده است. نیروی حاصل از این نوع برهم‌کنش با استفاده مشتق پتانسیل لنارد جونز بیان می‌شود:

$$V_{LJ} = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (8)$$

$$F = -\frac{dV_{LJ}}{dr} = 4 \frac{\varepsilon}{r} \left[ 12 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 6 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (9)$$

که  $\sigma$  فاصله تعادلی و  $\varepsilon$  عمق چاه پتانسیل است و برای پیوندهای کربن-کربن  $\sigma = 0.34 \text{ nm}$  و  $\varepsilon = 0.0566 \text{ kcal/mol}$  است [۹].

بسیاری از محققین [۸، ۹] فاصله‌ی نانولوله و ماتریس که در واقع همان ضخامت ناحیه‌ی میانی است را براساس شعاع اتم کربن برابر  $0.17 \text{ nm}$  در نظر گرفته‌اند و در این بررسی نیز از همین مقدار استفاده شده است.

با توجه به رفتار غیرخطی نیروی لنارد-جونز، برای مدل‌سازی این نیرو از المان Combin39 استفاده می‌شود که یک المان فنر غیرخطی است، این المان قادر است منحنی نیرو برحسب جابه‌جایی را مدل‌سازی کند و بنابراین روشی مستقیم برای مدل‌سازی برهم‌کنش‌های واندروالس فراهم می‌کند (برای استفاده از المان‌های دیگر لازم است یک ماده‌ی غیرخطی تعریف شود و بنابراین برای تعریف قسمت نرم‌شونده (نزولی) منحنی مشکلات مربوط به پایداری ماده ایجاد می‌گردد). برای تعیین نحوه‌ی اتصال گره‌های نانولوله و ماتریس، از فاصله‌ی قطع پتانسیل لنارد-جونز که برابر  $0.85 \text{ nm}$  است، استفاده می‌شود. بنابراین، در اطراف هر یک از اتم‌های کربن نانولوله، یک گره‌ی فرضی با شعاع  $0.85 \text{ nm}$  در نظر گرفته می‌شود و هر اتمی از ماتریس که در داخل این کره قرار بگیرد، به اتم نانولوله متصل می‌شود. برای سادگی بیشتر مطابق مرجع [۸، ۹] تنها اتم‌هایی که روی لایه‌ی داخلی ماتریس قرار گرفته است، به یکدیگر متصل می‌شوند. همان‌طور که گفته شد، مش‌بندی پلیمر به‌گونه‌ای انجام شده است که اندازه‌ی مش برابر حلقه‌های شش ضلعی نانولوله انتخاب شده است. خواننده برای آشنایی بیشتر می‌تواند به مراجع [۸-۱۱] و [۲۲] مراجعه کند.

### ۳- تک‌رشته معادل محیط پیوسته

برای ساده‌تر شدن استفاده از روش موری-تاناکا لازم است نانولوله با یک تک‌رشته معادل جایگزین شود، به‌طوری‌که تأثیر اتم‌های نانولوله و ناحیه بین‌مرزی در تعیین خواص تک‌رشته معادل وارد شود. تک‌رشته معادل در این مورد، یک استوانه‌ی توپر است که با پلیمر پیوند کامل دارد. طول این تک‌رشته برابر با طول المان حجمی نمونه در نظر گرفته شده و قطر آن برابر قطر نانولوله به‌اضافه‌ی دو برابر ضخامت ناحیه‌ی بین‌مرزی است. برای معادل‌سازی مذکور، از انرژی ناحیه‌ی میانی و نانولوله استفاده می‌شود. این انرژی در مراحل متوالی محاسبه شده و با استفاده از رابطه‌ی (۱۰)، سفتی تک‌رشته توپر محاسبه می‌شود:

$$\omega = \int_V \int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dt \quad (10)$$

با توجه به اینکه رفتار نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) که در این تحقیق مورد استفاده قرار گرفته است، به‌صورت همسانگرد جانبی است، بنابراین فرض

می‌شود که رفتار تک‌رشته معادل هم به‌صورت همسانگرد جانبی باشد و در معادله‌ی (۱۱) صدق کند:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= l(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + n\varepsilon_{11} \\ \sigma_{22} &= (k+m)\varepsilon_{22} + (k-m)\varepsilon_{33} + l\varepsilon_{11} \\ \sigma_{33} &= (k-m)\varepsilon_{22} + (k+m)\varepsilon_{33} + l\varepsilon_{11} \\ \sigma_{23} &= 2m\varepsilon_{13}, \quad \sigma_{13} = 2p\varepsilon_{13}, \quad \sigma_{12} = 2p\varepsilon_{12} \end{aligned} \quad (11)$$

که  $l, n, k, m$  و  $p$  به‌ترتیب مدول سفتی جانبی، طولی، بالک کرنش-صفحه‌ای، برش جانبی و برش طولی هستند و به آن‌ها ضرایب هیل گفته می‌شود. برای تعیین ثوابت هیل لازم است حالت کرنش ثابت روی مرزهای المان حجمی نمونه ایجاد شود که برای این منظور، از شرایط مرزی پیشنهاد شده در مرجع [۲۰] استفاده شده است. به‌عنوان مثال، با اعمال جابه‌جایی  $u = e(x_1, 0, 0)$  روی مرزهای المان حجمی، حالت کرنش یکنواخت  $\varepsilon_{11} = \partial u_1 / \partial x_1 = e$  ایجاد می‌شود و سایر مؤلفه‌های کرنش برابر صفر خواهد بود. جدول ۱ نشان‌دهنده سایر شرایط مرزی موردنیاز برای تعیین دیگر ضرایب سفتی تک‌رشته معادل است.

### ۴- خواص مؤثر

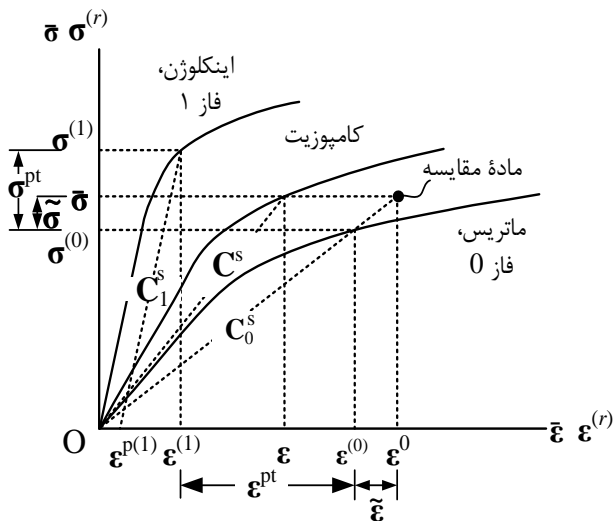
استخراج منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت در دو مرحله انجام می‌شود، نمای کلی فرایند در شکل ۲ نشان داده شده است. در مرحله‌ی اول لازم است نانوکامپوزیت حاوی اینکلوزن‌های استوانه‌ای (نانولوله) همگن شود. به‌عبارت دیگر، لازم است کامپوزیت‌های (آ) و (ب) همگن شده و خواص اجزای کامپوزیت‌های (پ) تعیین شود. به این ترتیب، منحنی تنش-کرنش کشش تک‌محوره‌ی اجزای کامپوزیت‌های (پ) استخراج می‌گردد. در مرحله‌ی دوم، کامپوزیت (پ) نقش اینکلوزن و کامپوزیت (ت) نقش ماتریس را ایفا می‌کند. با همگن‌سازی این دو کامپوزیت، خواص کامپوزیت هیبرید شکل (ث) که خواسته‌ی مسئله است، مشخص می‌گردد. در بخش ۶ تئوری همگن‌سازی توضیح داده شده است. در ادامه تئوری موردنیاز برای همگن‌سازی‌های ارائه می‌گردد.

### ۵- همگن‌سازی ماده‌ی الاستوپلاستیک با روش موری-تاناکا

در این قسمت برای اشاره به کمیت‌های مربوط به فاز ماتریس و اینکلوزن از زیرنویس یا بالانویس‌های (۰) و (۱) استفاده می‌شود. برای تحلیل تغییرشکل الاستوپلاستیک، حالتی در نظر گرفته می‌شود که روی مرز المان حجمی نمونه ترکشن اعمال شود. با توجه به روابط مرجع [۲۹] مشخص شده است که نتایج این روش با نتایج حاصل از اعمال شرط مرزی جابه‌جایی یکسان است. برای ادامه، از یک ماده‌ی مقایسه‌ی همگن خطی استفاده شده است. استفاده از چنین ماده‌ی مقایسه‌ای دارای سابقه‌ی طولانی است. برای اطلاعات بیشتر به مرجع [۲۹] مراجعه شود.

جدول ۱ شرایط مرزی برای تعیین ضرایب سفتی هیل [۲۰]

ثابت الاستیک	چگالی انرژی کرنشی	جابه‌جایی و ترکشن	شرایط مرزی
$n$	$\frac{1}{2}ne^2$	$u = e(x_1, 0, 0)$	$\varepsilon_{11} = e$
$E_L$	$\frac{1}{2}E_L e^2$	$T_2 = T_3 = 0$	$\varepsilon_{11} = e$
$p$	$\frac{1}{2}pe^2$	$u = \frac{e}{2}(x_2, x_1, 0)$	$\sigma_{22} = \sigma_{33} = 0$
$m$	$\frac{1}{2}me^2$	$u = \frac{e}{2}(x_3, x_2, 0)$	$\varepsilon_{12} = \frac{e}{2}$
$k$	$2ke^2$	$u = e(0, x_2, x_3)$	$\varepsilon_{23} = \frac{e}{2}$
			$\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = e$



شکل ۳ مقایسه‌ی منحنی‌های تنش-کرنش کامپوزیت، الیاف و ماتریس و ماده‌ی مقایسه

همچنین،  $\epsilon^{(1)}$  به صورت (۱۸) است:

$$\epsilon^{(1)} = \mathbf{A} : \epsilon^{(0)} \quad (18)$$

که

$$\mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{S} : [\mathbf{S} + (\mathbf{C}_1 - \mathbf{C}_0^s)^{-1} : \mathbf{C}_0^s]^{-1} \quad (19)$$

و  $\mathbf{I}$  تانسور متقارن مرتبه چهارم همانی است. بنابراین، کرنش کل به صورت (۲۰) است:

$$\bar{\epsilon} = v_0 \epsilon^{(0)} + v_1 \epsilon^{(1)} = \epsilon^0 + v_1 \epsilon^* \quad (20)$$

بنابراین، رابطه‌ی تنش-کرنش کامپوزیتی که در آن راستای تقویت‌کننده‌ها با یکدیگر یکسان و رفتار ماتریس الاستوپلاستیک و اینکلوژن‌ها رفتار الاستیک دارند، با رابطه‌ی (۲۱) قابل بیان است:

$$\bar{\sigma} = v_0 \sigma^{(0)} + v_1 \sigma^{(1)} \quad (21)$$

که  $\sigma^{(0)} = \mathbf{C}^{(0)} : \epsilon^{(0)}$  و  $\sigma^{(1)} = \mathbf{C}^{(1)} : \epsilon^{(1)}$ ، رابطه‌ی (۲۱)، میانگین تنش حجمی را به میانگین کرنش حجمی مربوط می‌سازد. با توجه به اینکه، جهت نانولوله‌ها در این کامپوزیت به صورت اتفاقی است، بنابراین لازم است رابطه‌ی (۲۱) به گونه‌ای نوشته شود که از تنش و کرنش، مجدداً روی جهت‌های مختلف میانگین‌گیری شود. برای نمایش اپراتور میانگین‌گیری جهت‌ی از یک کمیت از نماد  $\langle \rangle$  استفاده می‌شود (مرجع [۳۰] را ببینید). رابطه‌ی میانگین‌گیری شده‌ی تنش و کرنش به صورت (۲۲) است:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\epsilon} \rangle &= \langle v_0 \epsilon^{(0)} + v_1 \epsilon^{(1)} \rangle \\ \langle \bar{\sigma} \rangle &= \langle v_0 \sigma^{(0)} + v_1 \sigma^{(1)} \rangle \end{aligned} \quad (22)$$

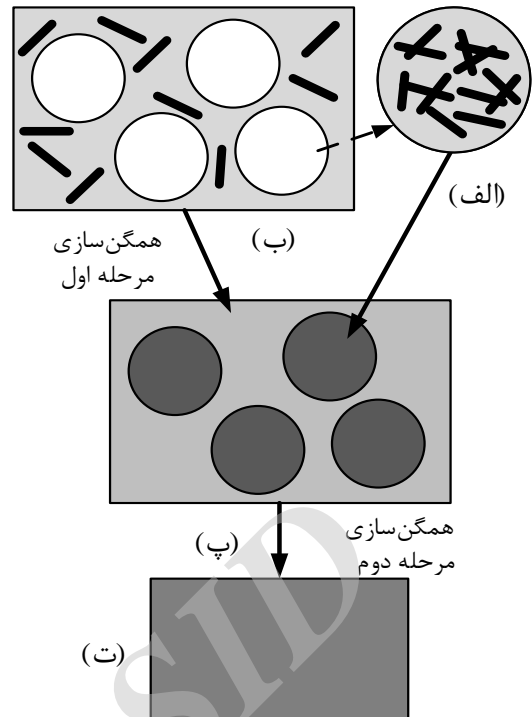
رفتار کامپوزیت حاوی الیاف با توزیع تصادفی، با استفاده از رابطه‌ی (۲۳) قابل بیان است:

$$\langle \bar{\epsilon} \rangle = \bar{\mathbf{C}} : \langle \bar{\sigma} \rangle \quad (23)$$

که

$$\mathbf{C}_s = \langle v_0 \mathbf{C}^{(0)} + v_1 \mathbf{C}^{(1)} : \mathbf{A}^{(1)} \rangle \langle v_0 \mathbf{I} + v_1 \mathbf{A}^{(1)} \rangle^{-1} \quad (24)$$

ماتریس سفتی مؤثر کامپوزیت است. با استفاده از نگارش ویت، می‌توان عملیات موردنیاز برای استخراج منحنی تنش-کرنش را به سادگی انجام داد. ولی فرم بسته‌ی این رابطه با استفاده از نگارش والپول [۳۰] قابل تعیین است. برای آشنایی با فرم بسته‌ی مولفه‌های ماتریس  $\mathbf{C}_s$  به مرجع [۳۰] مراجعه



شکل ۲ نمایش مراحل اول و دوم همگن‌سازی

ماده‌ی مقایسه‌ی خطی [۲۸] به گونه‌ای انتخاب می‌شود که تنش آن با تنش ماکروکامپوزیت برابر باشد (شکل ۳). در این صورت برای ماده مقایسه می‌توان نوشت:

$$\epsilon^0 = \mathbf{C}_0^s^{-1} \bar{\sigma} \quad (12)$$

که  $\bar{\sigma}$  و  $\epsilon^0$ ، به ترتیب مدول سکانت، تنش و کرنش ماده‌ی مقایسه است. مطابق روش موری-تاناکا، میانگین تنش و کرنش فاز ماتریس و ماده مقایسه با هم برابر نبوده و به اندازه‌ی  $\bar{\epsilon}$  و  $\bar{\sigma}$  با هم اختلاف دارند. بر این اساس، تنش میانگین ماتریس در ماکروکامپوزیت به صورت (۱۳) قابل بیان است:

$$\sigma^{(0)} = \bar{\sigma} + \bar{\sigma} = \mathbf{C}_0^s \epsilon^{(0)} = \mathbf{C}_0^s (\epsilon^0 + \bar{\epsilon}) \quad (13)$$

به طور مشابه، اختلاف میانگین تنش و کرنش درون اینکلوژن و ماتریس به اندازه‌ی اغتشاش‌های  $\sigma^{pt}$  و  $\epsilon^{pt}$  با هم اختلاف دارند. اکنون با استفاده از اصل اینکلوژن معادل اشلی [۱۶] و با توجه به فرض خطی بودن رفتار نانوله‌ها (که در اینجا همان فاز (۱) است) می‌توان نوشت:

$$\sigma^{(1)} = \bar{\sigma} + \bar{\sigma} + \sigma^{pt} = \mathbf{C}_1 : \epsilon^{(1)} = \mathbf{C}_1 : (\epsilon^0 + \bar{\epsilon} + \epsilon^{pt}) \quad (14)$$

که  $\mathbf{C}_1$  و  $\epsilon^{(1)}$ ، کرنش و مدول سفتی فاز اینکلوژن و  $\epsilon^*$  کرنش تبدیل معادل اشلی<sup>۱</sup> است. با توجه به مسئله اشلی [۱۶]، می‌توان نوشت:

$$\epsilon^{pt} = \mathbf{S}_0^s \epsilon^* \quad (15)$$

با توجه به اینکه  $\bar{\sigma}$  باید مساوی  $\bar{\sigma} = v_0 \sigma^{(0)} + v_1 \sigma^{(1)}$  باشد، نتیجه می‌شود:

$$\bar{\sigma} = -v_1 \sigma^{pt} \rightarrow \bar{\epsilon} = -v_1 (\mathbf{S} - \mathbf{I}) : \epsilon^* \quad (16)$$

با استفاده از معادله‌های (۱۴)، (۱۵) و (۱۶) می‌توان  $\epsilon^*$  را برحسب  $\epsilon^{(0)}$  نوشت:

$$\epsilon^* = -[\mathbf{S} + (\mathbf{C}_1 - \mathbf{C}_0^s)^{-1} : \mathbf{C}_0^s]^{-1} : \epsilon^{(0)} \quad (17)$$

<sup>1</sup> Perturbations

<sup>2</sup> Eshelby's equivalent transformation strain

$$\begin{aligned} \varepsilon_{kk}^* &= -[(\kappa_1 - \kappa_0) / p_s] \varepsilon_{kk}^* \\ \varepsilon_{ij}^{p(1)} + \varepsilon_{ij}^* &= -[(\mu_1 - \mu_0^s) / q_s] \varepsilon_{kk}^* + (\mu_1 / q_s) \varepsilon_{ij}^{p(1)} \end{aligned} \quad (31)$$

که

$$\begin{aligned} p_s &= (v_1 + v_0 \alpha_0^s) (\kappa_1 - \kappa_0) + \kappa_0 \\ q_s &= (v_1 + v_0 \beta_0^s) (\mu_1 - \mu_0^s) + \mu_0^s \end{aligned} \quad (32)$$

برای ساده‌تر شدن روابطی که در ادامه ارائه می‌گردد، متغیرهای جدید معرفی می‌گردد:

$$\begin{aligned} a_0^s &= [\alpha_0^s (\kappa_1 - \kappa_0)] / p_s, & a_1^s &= \kappa_1 / p_s \\ b_0^s &= [\beta_0^s (\mu_1 - \mu_0^s) + \mu_0^s] / q_s, & b_1^s &= \mu_1 / q_s \end{aligned} \quad (33)$$

با استفاده از معادله‌های (31) در (28) و (26)، کرنش میانگین ماتریس به‌صورت رابطه‌ی (34) قابل بیان است:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{kk}^{(0)} &= a_0^s \varepsilon_{kk}^0 \\ \varepsilon_{ij}^{(0)} &= b_0^s \varepsilon_{ij}^0 + v_1 (1 - \beta_0^s) b_1^s \varepsilon_{ij}^{p(1)} \end{aligned} \quad (34)$$

همچنین برای اینکلوژن می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{kk}^{(1)} &= (\kappa_0 / p_s) \varepsilon_{kk}^0 \\ \varepsilon_{ij}^{(1)} &= (\mu_0^s / q_s) \varepsilon_{ij}^0 + (v_1 + v_0 \beta_0^s) b_1^s \varepsilon_{ij}^{p(1)} \end{aligned} \quad (35)$$

تنش هیدرواستاتیک و انحرافی ماتریس با استفاده معادله‌های (13) و (25) به‌صورت

$$\begin{aligned} \sigma_{kk}^{(0)} &= a_0^s \bar{\sigma}_{kk} \\ \sigma_{ij}^{(0)} &= b_0^s \bar{\sigma}_{ij} + 2v_1 (1 - \beta_0^s) b_1^s \mu_0^s \varepsilon_{ij}^{p(1)} \end{aligned} \quad (36)$$

و برای اینکلوژن به‌صورت (37) است:

$$\begin{aligned} \sigma_{kk}^{(1)} &= a_1^s \bar{\sigma}_{kk} \\ \sigma_{ij}^{(1)} &= b_1^s \bar{\sigma}_{ij} - 2v_0 (1 - \beta_0^s) b_1^s \mu_0^s \varepsilon_{ij}^{p(1)} \end{aligned} \quad (37)$$

با توجه به روابط (37)، رابطه‌ی تنش-کرنش ماکروکامپوزیت به‌صورت است:

همانطور که مشخص است، مجهولات رابطه‌ی (38) کرنش پلاستیک فاز اینکلوژن  $\varepsilon_{ij}^{p(1)}$ ، ضریب برش سکانت فاز ماتریس  $\mu_0^s$  و مقدار مولفه‌های تانسور اشلیبی به‌ازای ضریب پی‌آسون سکانت (یعنی  $\alpha_0^s$  و  $\beta_0^s$ ) است.

### ۶- فرایند استخراج منحنی تنش-کرنش

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{kk} &= 3\kappa_0 \left\{ 1 + \frac{v_1 (\kappa_1 - \kappa_0)}{v_0 \alpha_0^s (\kappa_1 - \kappa_0) + \kappa_0} \right\} \bar{\varepsilon}_{kk} \\ \bar{\sigma}_{ij} &= 2\mu_0^s \left\{ \left[ 1 + \frac{v_1 (\mu_1 - \mu_0^s)}{v_0 \beta_0^s (\mu_1 - \mu_0^s) + \mu_0^s} \right] \bar{\varepsilon}_{ij} \right. \\ &\quad \left. - \frac{c_1 \mu_1}{v_0 \beta_0^s (\mu_1 - \mu_0^s) + \mu_0^s} \varepsilon_{ij}^{p(1)} \right\} \end{aligned} \quad (38)$$

روابط ارائه‌شده در قسمت ۵ کاملاً کلی است و با استفاده از آن‌ها می‌توان تنش و کرنش کامپوزیت و فازهای تشکیل‌دهنده‌ی آن را تعیین کرد. در یک نگاه کلی سه مرحله‌ی مختلف برای استخراج منحنی تنش-کرنش مورد نیاز است که عبارتند از: (۱) تغییرشکل الاستیک، (۲) تسلیم تک‌فاز؛ که ممکن است به دو صورت (آ) ابتدا ماتریس تسلیم شود یا (ب) ابتدا اینکلوژن تسلیم شود و (۳) هر دو فاز ماتریس و اینکلوژن دچار تغییرشکل پلاستیک شود. در ادامه به نحوه‌ی مواجهه با موارد یادشده پرداخته می‌شود.

### ۶-۱- تغییرشکل الاستیک

نانوکامپوزیت تا قبل از رسیدن به وضعیت تسلیم، رفتار الاستیک دارد و بنابراین  $\varepsilon_{ij}^{p(1)} = 0$  است. در این صورت به‌سادگی می‌توان رابطه‌ی تنش-کرنش (38) را مورد استفاده قرار داد. این مرحله تا جایی ادامه می‌یابد که  $\sigma_y^{(0)} / b_0$  یا  $\sigma_y^{(0)} / b_0$  به تنش تسلیم ماکروکامپوزیت برسد. لازم به‌ذکر است

گردد. لازم به ذکر است که تانسورهای  $\mathbf{A}^{(1)}$  و  $\mathbf{C}^{(1)}$  به جهت نانولوله بستگی دارد و برای بررسی تأثیر زاویه، باید از دوران‌های نشان‌داده‌شده در شکل ۴ استفاده کرد [31]. با استخراج منحنی تنش-کرنش ماتریس جدید و اینکلوژن (شکل ۲) جدید و برازش خواص آن‌ها بر مدل وچ، داده‌های موردنیاز برای مرحله‌ی دوم همگن‌سازی در دسترس است (همگن‌سازی از (پ) به (ث)). با توجه به سادگی روابط مربوط به رفتار الاستوپلاستیک کامپوزیت حاوی اینکلوژن کروی در ماتریس همگن، روابط آن به‌صورت فرم بسته ارائه می‌گردد.

در ادامه، باید خواص مؤثر کامپوزیتی که اینکلوژن‌های آن کروی بوده و ماتریس و اینکلوژن رفتار الاستوپلاستیک دارند، استخراج شود. مجدداً، ماده‌ی مقایسه به‌صورت خطی در نظر گرفته می‌شود. در این صورت معادله‌های (12) و (13) برای این حالت هم برقرار است.

علاوه‌براین، با استفاده از اصل اینکلوژن معادل اشلیبی و با فرض اینکه کرنش پلاستیک درون اینکلوژن برابر  $\varepsilon^{p(1)}$  باشد، می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{(1)} &= \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}^{pt} = \mathbf{C}_1 : (\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)}) \\ &= \mathbf{C}_1 : (\boldsymbol{\varepsilon}^0 + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{pt} - \boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)}) \\ &= \mathbf{C}_0^s : (\boldsymbol{\varepsilon}^0 + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{pt} - \boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \end{aligned} \quad (25)$$

با توجه به مسئله‌ی اشلیبی [29]، می‌توان نوشت:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{pt} = \mathbf{S}_0^s : (\boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (26)$$

با توجه به مسئله‌ی اشلیبی [16]، می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_0^s &= (\alpha_0^s, \beta_0^s), & \alpha_0^s &= \frac{1}{3} \left( \frac{1 + \nu_0^s}{1 - \nu_0^s} \right), \\ & & \beta_0^s &= \frac{2}{15} \left( \frac{4 - 5\nu_0^s}{1 - \nu_0^s} \right) \end{aligned} \quad (27)$$

$\alpha_0^s$  مولفه‌ی هیدرواستاتیک و  $\beta_0^s$  مولفه‌ی انحرافی تانسور اشلیبی است. مولفه‌های تانسور اشلیبی برای اینکلوژن‌های استوانه‌ای در مرجع [30] ارائه شده است. علاوه‌براین، رابطه‌های (16) و (20) به‌صورت روابط (28) و (29) بازنویسی می‌شوند:

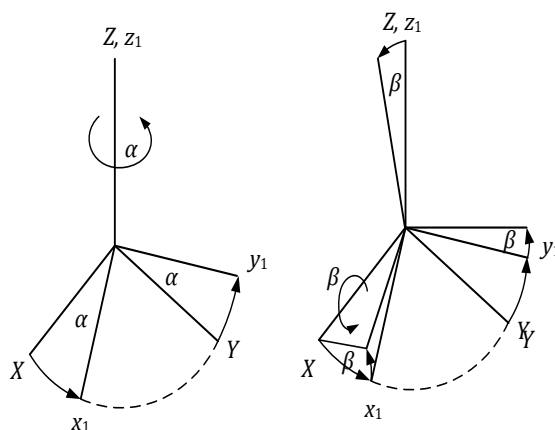
$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = -v_1 \boldsymbol{\sigma}^{pt} \rightarrow \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = -v_1 (\mathbf{S} - \mathbf{I}) : (\boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (28)$$

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = v_0 \boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} + v_1 \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} = \boldsymbol{\varepsilon}^0 + v_1 (\boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (29)$$

که  $\boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)}$  کرنش پلاستیک فاز (1) است و  $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} = \boldsymbol{\varepsilon}^0 + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  و  $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} = \boldsymbol{\varepsilon}^0 + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{pt}$  با استفاده از رابطه‌ی (29) بالا نتیجه می‌شود:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)} + \boldsymbol{\varepsilon}^* = -[(\mathbf{C}_1 - \mathbf{C}_0^s) : (v_1 \mathbf{I} + v_0 \mathbf{S}_0^s) + \mathbf{C}_0^s]^{-1} : [(\mathbf{C}_1 - \mathbf{C}_0^s) : \boldsymbol{\varepsilon}^0 - \mathbf{C}_1 : \boldsymbol{\varepsilon}^{p(1)}] \quad (30)$$

با فرض تراکم‌ناپذیری می‌توان معادله‌ی (30) را به بخش‌های هیدرواستاتیک و انحرافی نوشت:



شکل ۴ دوران‌های مورد استفاده برای تانسورهای  $\mathbf{C}_i$  و  $\mathbf{A}$

$$\begin{aligned} \sigma_Y^{0(0)} + \left( \sigma_Y^{\infty(0)} - \sigma_Y^{0(0)} \right) \left[ 1 - \exp \left( - \frac{\varepsilon_e^{p(0)}}{\varepsilon_p^{\infty(0)}} \right) \right] \\ = b_0^s \bar{\sigma}_e + 3\mu_0^s (1 - \beta_0^s) v_1 b_1^s \varepsilon_e^{p(1)} \\ \sigma_Y^{0(1)} + \left( \sigma_Y^{\infty(1)} - \sigma_Y^{0(1)} \right) \left[ 1 - \exp \left( - \frac{\varepsilon_e^{p(1)}}{\varepsilon_p^{\infty(1)}} \right) \right] \\ = b_1^s \bar{\sigma}_e - 3\mu_0^s (1 - \beta_0^s) v_0 b_1^s \varepsilon_e^{p(1)} \end{aligned} \quad (46)$$

با توجه به معادله‌های (۴۶)، می‌توان یک  $\varepsilon_e^{p(0)}$  در نظر گرفته و با استفاده از معادله‌ی ساختاری فاز (۰) مقدار ضرایب  $b_0^s$ ،  $b_1^s$ ،  $\mu_0^s$  و  $\beta_0^s$  را تعیین کرد، سپس با حل دو معادله‌ی (۴۶) مقادیر  $\bar{\sigma}_e$  و  $\varepsilon_e^{p(1)}$  را مشخص کرد. با تعیین این مقادیر، با استفاده از معادله‌ی (۴۴) می‌توان کرنش کل کامپوزیت  $\bar{\varepsilon}_e$  را تعیین و منحنی تنش-کرنش را ترسیم کرد.

### ۷- کلوخه شدن

وجود نیروی واندروالس بین نانولوله‌های کربنی باعث جذب آن‌ها به سمت یکدیگر و کلوخه شدن می‌شود. بررسی‌های آزمایشگاهی مرجع [۳۲] نشان می‌دهد که اگر کسر حجمی نانولوله‌ها از ۷.۵٪ بیشتر شود، تعداد قابل توجهی از نانولوله‌ها متراکم می‌شوند. این پدیده موجب ناهمگن شدن توزیع نانولوله‌ها در داخل ماتریس و افت سفتی نانوکامپوزیت می‌شود [۱۵]. افزایش کسر حجمی نانولوله کربنی موجب افزایش ویسکوزیته نانوکامپوزیت می‌گردد و این امر موجب افزایش تمایل نانولوله‌ها به تشکیل توده‌های متراکم می‌شود. تأثیر این پدیده با استفاده از رزین‌های دارای ویسکوزیته پائین و استفاده از روش پراکنده‌سازی با امواج مافوق صوت<sup>۱</sup> کاهش می‌یابد، اما باز هم در بخش‌هایی از نانوکامپوزیت توده‌های متراکم وجود دارد.

از سوی دیگر، به دلیل کم بودن سفتی خمشی نانولوله‌ها که ناشی از قطر کم و طول زیاد آن‌ها است، نانولوله‌ها در داخل ماتریس و توده‌های متراکم خمیده می‌شود [۱۵] که تصاویر SEM نیز موید این پدیده است (شکل ۵). براساس این مشاهده، شی و همکاران [۳۳] یک مدل دو پارامتری ارائه کرده‌اند و با استفاده از آن تأثیر کلوخه شدن نانولوله‌ها را بر مدول یانگ مورد بررسی قرار دادند. مدل مذکور، در ادامه توضیح داده می‌شود. به دلیل کم بودن سفتی خمشی نانولوله‌ها که ناشی از قطر کم و طول زیاد آن‌ها است، نانولوله‌ها در داخل ماتریس و توده‌های متراکم خمیده می‌شود [۱۵] که تصاویر SEM نیز موید این پدیده است. براساس این مشاهده، شی و همکاران [۳۳] یک مدل دو پارامتری ارائه کرده‌اند و با استفاده از آن تأثیر کلوخه شدن نانولوله‌ها را بر مدول یانگ مورد بررسی قرار دادند. مدل مذکور، در ادامه توضیح داده می‌شود.

در این مدل، فرض می‌شود که نانولوله‌ها در قسمت‌هایی از نانوکامپوزیت تجمع پیدا کرده‌اند به طوری که شکل هندسی این بخش‌ها به صورت کره‌هایی با حجم  $V_{inc}$  باشد، این فرض یک فرض ساده‌کننده است که دلیل آن وجود جواب تحلیلی تانسور اشلبی برای مسئله‌ی کره در محیط بی‌نهایت است. همچنین بخشی از نانولوله‌ها که فرض می‌شود توزیع یکنواختی داشته باشد، در بیرون از کره‌ها واقع شده و حجم آن‌ها برابر  $V_r^m$  باشد. در این صورت حجم کل نانولوله‌ها در نانوکامپوزیت برابر  $V_r = V_r^{inc} + V_r^m$  بوده و بنابراین  $c_r^m + c_r^{inc} = 1$  است که  $c_r^m = V_r^m / V_r$  و  $c_r^{inc} = V_r^{inc} / V_r$  به ترتیب کسر حجمی نانولوله‌های درون ماتریس و کره‌ها است. بنابراین، اگر کل حجم نانوکامپوزیت برابر  $V$  باشد، کسر حجمی نانولوله در نانوکامپوزیت برابر

تنش تسلیم ماکروکامپوزیت به‌سادگی و با داشتن خواص الاستیک و تنش تسلیم پلیمر قابل محاسبه است.

### ۲-۶- تسلیم تک‌فاز

در این حالت یکی از فازهای کامپوزیت تسلیم شده و تغییرشکل پلاستیک پیدا می‌کند. روش مواجهه برای این حالت‌ها در ادامه شرح داده می‌شود.

### ۱-۲-۶- تسلیم ماتریس

در این صورت  $\varepsilon_{ij}^{p(1)} = 0$  و بنابراین رابطه‌ی (۳۸) قابل استفاده است. پارامترهای  $\mu_0^s$ ،  $\alpha_0^s$  و  $\beta_0^s$  مجهول و وابسته به خواص ماتریس هستند. بنابراین، برای تعیین منحنی تنش-کرنش، با در نظر گرفتن یک  $\varepsilon_e^{p(0)}$  و تعیین تنش معادل از مدل وچ، می‌توان این کمیت‌ها را با روابط در بخش ۲-۶ محاسبه نمود.

### ۲-۲-۶- تسلیم اینکلوزن

در این حالت، ماتریس در وضعیت الاستیک و  $\mu_0^s = \mu_0$  و  $\alpha_0^s = \alpha_0$  و  $\beta_0^s = \beta_0$  است. علاوه‌براین  $\bar{\varepsilon}_e^p = v_1 b_1 \varepsilon_e^{p(1)}$  بنابراین

$$\varepsilon_e^p = v_1 b_1 \varepsilon_e^{p(1)} \quad (39)$$

با جایگزینی رابطه‌ی (۳۹) در (۳۶)، تنش انحرافی اینکلوزن به‌صورت (۴۰) قابل بیان است:

$$\sigma^{(1)'} = b_1 \bar{\sigma}' - 2\mu_0 (1 - \beta_0) (v_0 / v_1) \bar{\varepsilon}_e^p \quad (40)$$

با فرض اینکه اینکلوزن در قانون جریان هکنی،  $\sigma^{(1)'} = \left( 3\bar{\varepsilon}_e^{p(1)} / 2\sigma_e^{(1)} \right) \sigma'$  صادق باشد، نتیجه می‌شود:

$$\bar{\varepsilon}_e^p = \lambda \sigma', \quad \lambda = \frac{3 b_1 \bar{\varepsilon}_e^{p(1)}}{2 \sigma_e^{(1)} + 3\mu_0 (1 - \beta_0) (v_0 / v_1) \bar{\varepsilon}_e^{p(1)}} \quad (41)$$

با جایگزینی رابطه‌ی (۴۱) در (۴۰)، و با توجه به اینکه  $\bar{\varepsilon}_e^p = \frac{2}{3} \lambda \bar{\sigma}_e$  تنش موثر اینکلوزن به‌صورت (۴۲) است:

$$\sigma_e^{(1)} = b_1 \bar{\sigma}_e - 3\mu_0 (1 - \beta_0) (v_0 / v_1) \bar{\varepsilon}_e^{p(1)} \quad (42)$$

با توجه به رابطه‌ی (۴۲) و مدل وچ، نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_e = \frac{1}{b_1} \left\{ \sigma_Y^{0(1)} + \left( \sigma_Y^{\infty(1)} - \sigma_Y^{0(1)} \right) \left[ 1 - \exp \left( - \varepsilon_e^{p(1)} / \varepsilon_p^{\infty(1)} \right) \right] \right. \\ \left. + 3\mu_0 (1 - \beta_0) (v_0 / v_1) \bar{\varepsilon}_e^{p(1)} \right\} \end{aligned} \quad (43)$$

برای اجرای این مرحله می‌توان یک  $\varepsilon_e^{p(1)}$  در نظر گرفت، سپس با استفاده از رابطه‌ی (۳۹)، مقدار کرنش پلاستیک معادل کامپوزیت و با جایگزینی در معادله‌ی (۴۳)، مقدار تنش وارد بر کامپوزیت تعیین می‌گردد.

### ۳-۶- تسلیم دوفاز

این مرحله زمانی اتفاق می‌افتد که  $\sigma_y^{(0)} / b_0 = \sigma_y^{(1)} / b_1$  باشد. مشابه قبل می‌توان رابطه‌ی (۴۴) را ثابت کرد [۲۹]:

$$v_1 b_1^s \varepsilon_e^p = \bar{\varepsilon}_e - \frac{2}{3} \left( \frac{1}{\mu_s'} - \frac{1}{2\mu} \right) \bar{\sigma}_e \quad (44)$$

علاوه‌براین،

$$\begin{aligned} \sigma_e^{(0)} = b_0^s \bar{\sigma}_e + 3\mu_0^s (1 - \beta_0^s) v_1 b_1^s \varepsilon_e^{p(1)} \\ \sigma_e^{(1)} = b_1^s \bar{\sigma}_e - 3\mu_0^s (1 - \beta_0^s) v_0 b_1^s \varepsilon_e^{p(1)} \end{aligned} \quad (45)$$

معادلات بالا باید در معادله‌ی ساختاری اجزای تشکیل‌دهنده‌ی کامپوزیت صادق باشد، بنابراین می‌توان نوشت:

<sup>۱</sup> Ultrasonic dispersion

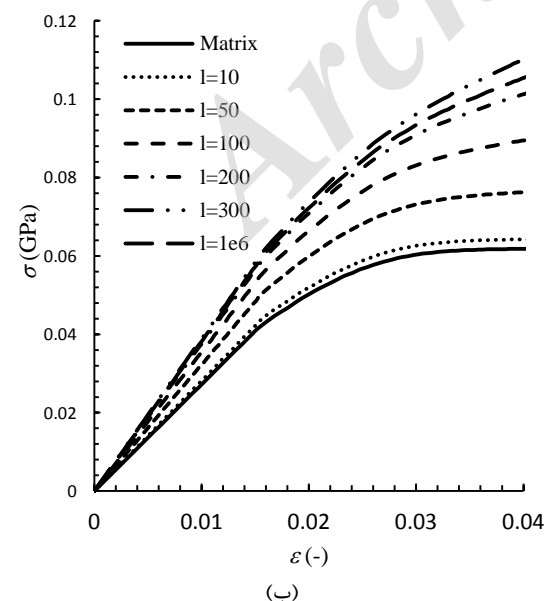
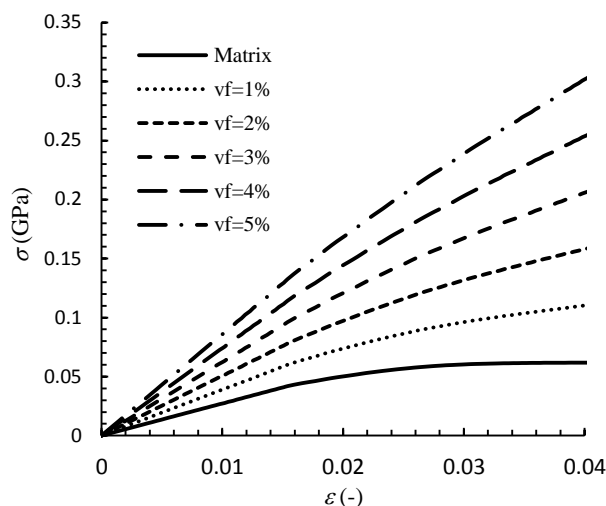
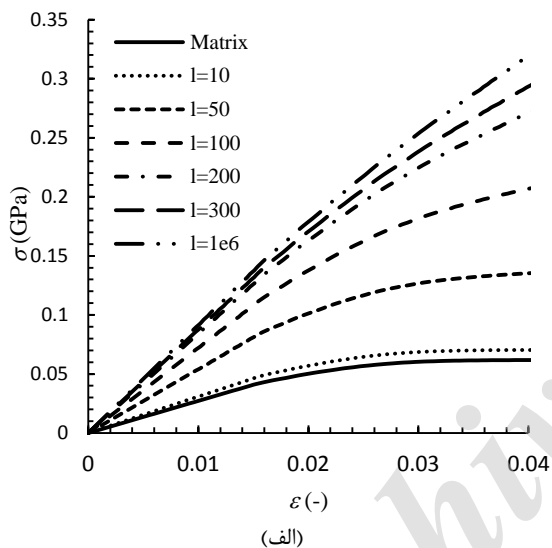




اختلاف قابل توجهی بین حالت فاقد پدیده‌ی کلوخه شدن و حالت‌هایی  $< 0.6$   $\xi$  است، وجود ندارد.

در حالت کلی تری که کلوخه شدن به صورت جزئی باشد، هر دو پارامتر  $\eta$  و  $\xi$  می‌توانند تغییر کنند. شکل ۱۱ (ب)، برای نمایش حالتی است که کسر حجمی ماکروکامپوزیت ۵٪ باقی بماند و  $\xi = 0.5$  باشد. در این حالت مشاهده می‌شود که با افزایش  $\xi$  منحنی‌ها به سمت پائین منتقل می‌شود. علاوه بر این، فاصله منحنی فاقد کلوخگی با  $\eta = 0.6$  بسیار اندک است.

در شکل ۱۲، تأثیر کسر حجمی بر منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت برای حالت  $\xi = 0.5$  و  $\eta = 0.1$  نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در نظر گرفتن پدیده‌ی کلوخه شدن منجر به کاهش مقدار تنش در کرنش‌های یکسان می‌شود و حتی به دلیل کلوخه شدن نانولوله‌ها، منحنی تنش-کرنش مربوط به کسر حجمی ۱۵٪ با منحنی فاقد پدیده‌ی کلوخه شدن برای کسر حجمی ۱۰٪، یکسان است. از سوی دیگر، مشاهده می‌شود که تحت شرایط یکسان ( $\eta$  و  $\xi$  یکسان)، با افزایش کسر حجمی، اختلاف منحنی‌های وضعیت کلوخه‌شده و کلوخه‌نشده بیشتر می‌شود.



شکل ۹ منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت (الف) تصادفی و (ب) تک‌جهته برای طول‌های مختلف نانولوله

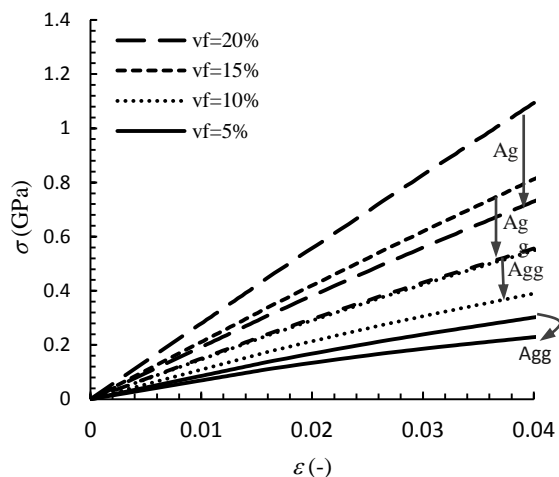
شکل ۸ مقایسه منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت در کسر حجمی‌های مختلف همان‌طور که مشاهده می‌شود، در حالت کلی با افزایش کسر حجمی منحنی‌ها به سمت بالا جابه‌جا شده که نشان‌دهنده آن است که با افزایش کسر حجمی، اثر تقویت‌کنندگی نانولوله‌ها (در صورت نبود کلوخه شدن) بیشتر می‌شود از سوی دیگر مشاهده می‌شود که شکل منحنی برای کسر حجمی‌های بزرگ افزایشی و صعودی است و قسمت تقریباً صاف مدل وُچ در آن مشاهده نمی‌شود که این امر به سفتی زیاد نانوله نسبت داده می‌شود.

#### ۸-۲- تأثیر طول نانولوله‌ها

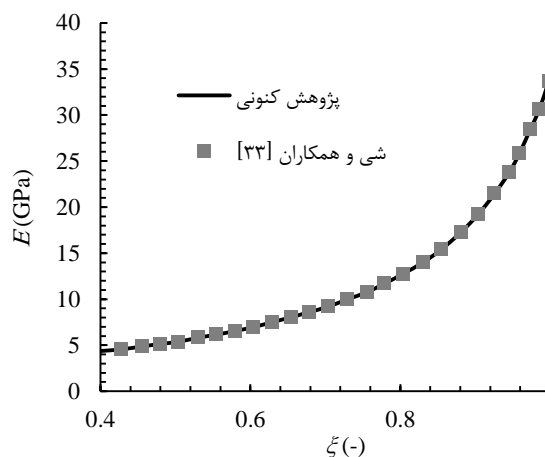
در شکل ۹ (الف) و (ب)، منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت دارای توزیع تک‌جهته و تصادفی، برای طول‌های مختلف و کسر حجمی ۱٪ نشان داده شده است. همان‌طور که از این شکل‌ها مشخص است، استفاده از نانولوله‌هایی که طول آن‌ها کمتر از ۱۰ nm است، تأثیر چندانی بر تقویت ماده‌ی زمینه ندارد. همچنین با افزایش طول نانولوله منحنی‌های تنش-کرنش، برای طول‌های بزرگ‌تر از ۲۵۰ nm به حالت اشباع می‌رسد و همان‌طور که در شکل مشخص است، اختلاف منحنی مربوط به طول  $1 \times 10^6$  nm با منحنی ۳۰۰ nm اندک است. نتایج بررسی نشان می‌دهند که نرخ افزایش این اختلاف، برای طول‌های بزرگ‌تر از ۳۰۰ nm (نسبت به طول‌های کوچک‌تر) اندک است. همچنین، مقایسه دو منحنی نشان می‌دهد که وابستگی منحنی تنش-کرنش به طول نانولوله‌ها در حالت جهت‌گیری تصادفی نسبت به جهت‌گیری تک‌جهته، به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد.

#### ۸-۳- کلوخه شدن

برای اطمینان از جواب‌های کد متلب، نتایج حاصل از محاسبه‌ی مدول یانگ با داده‌های مرجع شی و همکاران [۳۳] در شکل ۱۰ مقایسه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج از دقت قابل قبولی برخوردار است. برای بررسی کلوخه شدن، ابتدا حالتی در نظر گرفته می‌شود که تمامی نانولوله‌ها کلوخه شوند. در این صورت  $\eta = 1$  و تمامی نانولوله‌ها در درون کره‌ها توزیع شده و ماتریس فاقد نانولوله است. شکل ۱۱ (الف)، منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت را به‌ازای کسر حجمی (نانولوله‌ها در ماکروکامپوزیت) ۵٪ برای حالت کلوخه شدن کامل برای مقادیر مختلف  $\xi$  نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، کلوخه شدن نانولوله‌ها تنزل سفتی نانوکامپوزیت می‌شود. به‌طوری‌که با کاهش کسر حجمی کره‌ها  $\xi$  منحنی‌های تنش-کرنش به سمت پائین انتقال پیدا می‌کند. علاوه بر این،



شکل ۱۲ تأثیر کلوخه شدن روی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت، در کسر حجمی‌های مختلف



شکل ۱۰ مقایسه‌ی نتایج محاسبه‌ی مدول یانگ در تحقیق حاضر با مرجع [۳۳]

### ۹- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

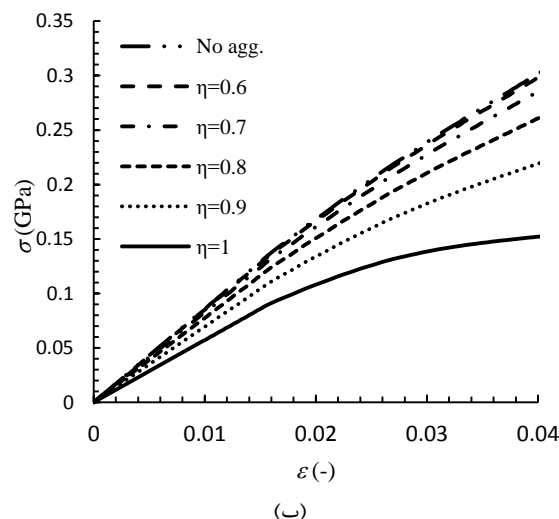
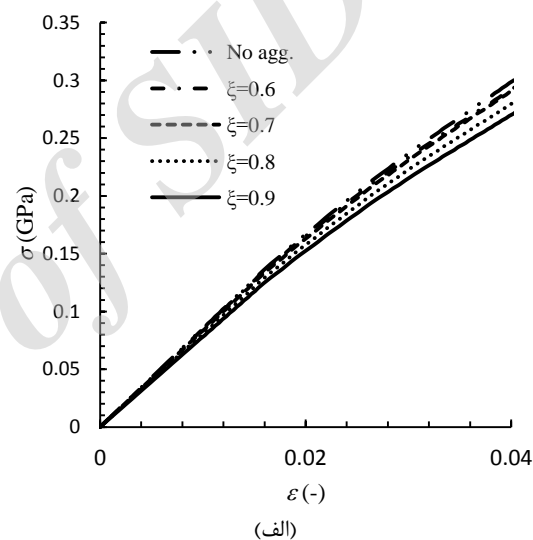
در این پژوهش، خواص الاستوپلاستیک نانوکامپوزیت پلیمری‌ای که در آن نانولوله‌ها به صورت تک‌جهته و تصادفی توزیع شده است، مورد بررسی قرار گرفت. در ابتدا با استفاده از مدل اجزای محدود المان حجمی نمونه، خواص نانوکامپوزیت استنتاج گردید. سپس خواص تکرشسته معادل از طریق مدل اجزای محدود استخراج گردیده است. با توجه به ساختار شبکه‌ای نانولوله، استفاده مستقیم از خواص آن فرضیات مورد استفاده در روابط میکرومکانیک را نقض می‌کند. بنابراین، در مرحله‌ی اول نانوله با یک تکرشسته‌ی معادل توپر جایگزین شده است. در نهایت با استفاده از روش موری-تاناکا تأثیر زاویه قرارگیری نانولوله (نسبت به ماتریس) نسبت به راستای بار، مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج نشان داد که توزیع متقارن محوری<sup>۱</sup>، تأثیر بسیار اندکی بر رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت دارد ولی تأثیر زاویه‌ی نانولوله با محور z قابل توجه است. نکته مهم آن است که این تأثیر به بازه‌ی ۰ تا ۵۰ درجه محدود بوده و پس از آن تأثیر زاویه بسیار اندک می‌شود. بررسی تأثیر طول نانولوله بر سفتی نانوکامپوزیت مشخص کرد که تقویت نانوکامپوزیت با طول‌های ۱۰ nm تا ۳۰۰ nm اثر بیشتری دارد و در طول‌های کمتر از ۱۰ nm، نانولوله توان تقویتی کمی داشته و در مقادیر بزرگ‌تر از ۳۰۰ نانومتر، اثر تقویت‌کنندگی مضاعف مشاهده نشد. از سوی دیگر با صرف نظر از کلوخه شدن، افزایش کسر حجمی منجر به بهبود خواص تقویت‌کنندگی می‌شود ولی با در نظر گرفتن عامل کلوخه شدن، مشخص گردید که کلوخه شدن تأثیر بسزایی بر تنزل خواص تقویت‌کنندگی دارد و این ویژگی حتی ممکن است افزایش کسر حجمی را تا حد زیادی کم‌تأثیر یا بی‌تأثیر کند.

### ۱۰- مراجع

- [1] Shima, H. and Sato, M., "Elastic and Plastic Deformation of Carbon Nanotubes," First ed., Pan Stanford Publishing, Boca Raton, pp. 187-208, 2013.
- [2] Moon, C. K., Lee, J.-O., Cho, H. H. and Kim, K. S., "Effect of diameter and surface treatment of fiber on interfacial shear strength in glass fiber/epoxy and HDPE," Applied Polymer Science., Vol. 45, pp. 443-450, 1992.

<sup>۱</sup> Axisymmetric



شکل ۱۱ نمودار تنش-کرنش نانوکامپوزیت کلوخه‌شده برای حالت (الف)  $\eta = 1$  (ب)  $\xi = 0.5$

- [24] Shokrieh M. M. and Rafiee, R., "Prediction of mechanical properties of an embedded carbon nanotube in polymer matrix based on developing an equivalent long fiber," *Mechanics Research Communications*, Vol. 37, No.1, pp. 235-240, 2010.
- [25] Sakhaee-Pour, A., Ahmadian, M. T. and Naghdabadi, R., "Vibrational analysis of single-layered graphene sheets," *Nanotechnology*, Vol. 19, No. 8, pp.200-210, 2008, 085702.
- [26] Borja, R. I., "Plasticity Modeling & Computation", First edition., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 31-58, 2013.
- [27] Khan A. S. and Huang, S., "Continuum Theory of Plasticity" John Wiley and Sons, New York, Cambridge, pp. 119-180, 1995.
- [28] Gross, D. and Seelig, T., "Fracture Mechanics with an Introduction to Micromechanics" Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 217-287, 2011.
- [29] Weng, G. J. "The overall elastoplastic stress-strain relations of dual-phase metals." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 38, No 3, pp. 419-441, 1990.
- [30] Qiu, Y. P. and Weng, G. J., "On the application of mori-tanaka's theory involving transversely isotropic spheroidal," *International Journal of Engineering Science*, Vol. 28, No. 11, pp. 1121-1137, 1990.
- [31] Ginsberg, J., "Engineering Dynamics", Second ed., Cambridge University Press, pp. 91-172, 2008.
- [32] Stephan, C., Nguen, T., Chappelle, M. and Lefrant, S., "Characterization of single-walled carbon nanotubes-PMMA composites," *Synthetic Metals*, Vol. 108, No. 2, pp. 139-149, 2000.
- [33] Shi, D.-L., Feng, X.-Q., Huang, Y. Y., Hwang, K.-C. and Gao, H., "The effect of nanotube waviness and agglomeration on the elastic property of carbon nanotube-reinforced composites," *Engineering Materials and Technology*, Vol. 126, No.1, pp. 250-257, 2004.
- [34] Gojny, F., Wichmann, M., 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, No. 15, pp. 2363-71, 2004.
- [35] Frankland, S. J. V., Harikb, V. M., Odegard, G. M., Brenner, D. W. and Gates, T. S., "The stress-strain behavior of polymer-nanotube composites from molecular dynamics simulation," *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, pp. 1655-1661, 2003.
- [36] Yang, S., Yu, S., Ryu, J., Cho, J.-M., Kyoung, W., Han, D.-S., "Nonlinear multiscale modeling approach to characterize elastoplastic behavior of CNT/polymer nanocomposites considering the interphase and interfacial imperfection," *International Journal of Plasticity*, Vol. 41, No.1, pp. 124-146, 2013.
- [37] Karimi, M., Montazeri, A., and Ghajar, R., "On the elasto-plastic behavior of CNT-polymer nanocomposites," *Composite Structures*, Vol. 160, No.1, pp.782-791, 2017.
- [38] Mohammadpour, E., Awang, M., Kakooei, S. and Akil, H. Md, "Modeling the tensile stress-strain response of carbon nanotube/polypropylene nanocomposites using nonlinear representative volume element," *Materials and Design*, Vol. 58, No.1, pp. 36-42, 2014.
- [3] Bao, S. P. and Tjong, S. C., "Mechanical behaviors of polypropylene/carbon nanotube nanocomposites: The effects of loading rate and temperature," *Materials Science and Engineering A*, Vol. 485, No. 1-2, pp. 508-516, 2008.
- [4] 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, No. 15-16, pp. 2300-2313, 2005.
- [5] Rafiee R. and Maleki Moghadam, R., "On the modeling of carbon nanotubes: a critical review," *Composites Part B: Engineering*, Vol. 56, pp. 435-449, 2014.
- [6] Tserpes, K. I., Papanikos, P., Labeas, G., and Pantelakis, S. G., "Multi-scale modeling of tensile behavior of carbon nanotube-reinforced composites," *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, Vol. 49, pp. 51-60, 2008.
- [7] Li, C. and Chou, T.-W. "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, pp. 2487-2499, 2003.
- [8] Shokrieh, M. M. and Rafiee, R., "On the tensile behavior of an embedded carbon nanotube in polymer matrix with non-bonded interphase region," *Composite Structures*, Vol. 92, pp. 647-652, 2010.
- [9] Shokrieh, M. M. and Rafiee, R., "Investigation of nanotube length effect on the reinforcement efficiency in carbon nanotube based composites," *Composite Structures*, Vol. 92, pp. 2415-2420, 2010.
- [10] Montazeri, A., and Naghdabadi, R., "Investigation of the interphase effects on the mechanical behavior of carbon nanotube polymer composites by multiscale modeling," *Applied Polymer Science*, Vol. 117, pp. 361-367, 2010.
- [11] Montazeri, A. and Naghdabadi, R. "Study the effect of viscoelastic matrix model on the stability of CNT-polymer composites by multiscale modeling," *Polymer Composites*, Vol. 30, pp. 1545-1551, 2009.
- [12] Joshi P. and Upadhyay, S. H. "Analysis of alignment effect on carbon nanotube layer in nanocomposites," *Physica E*, Vol. 66, pp. 221-227, 2015.
- [13] Huang, J. and Rodrigue, D., "The effect of carbon nanotube orientation and content on the mechanical properties of polypropylene based composites," *Materials and Design*, Vol. 55, pp. 653-663, 2014.
- [14] Huang, J., and Rodrigue, D., "Equivalent continuum models of carbon nanotube reinforced polypropylene composites." *Materials and Design*, Vol 50, pp. 936-945, 2013.
- [15] Buryachenko, V., "Micromechanics of Heterogeneous Materials," First ed., Springer Science & Business Media, pp. 571-606, 2007.
- [16] Qu J. and Cherkaoui, M., *Fundamentals of micromechanics of solids*: John Wiley & Sons, 2006.
- [17] Zare, Y. and Garmabi, H., "Attempts to simulate the modulus of polymer/carbon nanotube nanocomposites and future trends," *Polymer Reviews*, Vol. 54, No. 3, pp. 377-400, 2014.
- [18] Bernardo, L. F. A., Amaro, A. P. B. M., Pinto, D.G., and Lopes, S. M. R., "Modeling and simulation techniques for polymer Nanoparticle Composites - A review," *Computational Materials Science*, Vol. 118, pp. 32-46, 2016.
- [19] 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.
- [20] Odegard, G. M., Gates, T. S. , Wisea, K. E., Parka, C., and Siochi, E. J., "Constitutive modeling of nanotube-reinforced polymer composites," *Composites Science and Technology*, Vol. 63, pp. 1671-1687, 2003.
- [21] Fisher, F. T., Bradshaw, R. D. and Brinson, L. C., "Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites-I: Modulus predictions using effective nanotube properties," *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, pp. 1689-1703, 2003.
- [22] Meguid, S. A., Wernik, J. M., and Cheng, Z. Q., "Atomistic-based continuum representation of the effective properties of nano-reinforced epoxies," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47, pp. 1723-1736, 2010.
- [23] Georgantzinos, S. K., Giannopoulos, G. I. and Anifantis, N. K., "On the coupling of axial and shear deformations of single-walled carbon nanotubes and graphene a numerical study," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Nanoengineering and Nanosystems*, Vol. 224, No.1, p. 1740349911412874, 2011.

Archive of SID