

Numerical Modeling and Experimental Study of Elastic-Plastic Behavior of Carbon Nanotubes Reinforced Nanocomposites of PA6/NBR Using a Microfinite Element Model

Mir Hamid Reza Ghoreishy*, Ghasem Naderi, and Masoud Mansour

Department of Rubber Processing and Engineering, Faculty of Processing, Iran Polymer and Petrochemical Institute, P.O. Box: 14975-112, Tehran, Iran

Received: 22 January 2014, accepted: 26 May 2014

ABSTRACT

A theoretical and experimental study was conducted on the mechanical behavior of nanocomposites based on PA6/NBR thermoplastic elastomer reinforced by single wall carbon nanotubes (SWNTs). The selected samples include 60 and 40% NBR with 0.5, 1.0 and 1.5% SWNT. The modeling methodology was based on the use of two-dimensional "representative volume elements" (RVE). The Abaqus/Standard code was employed to carry out the non-linear finite element calculations. Plane stress elements were selected for discretization of the domain. Linear elastic and isotropic hardening elastic-plastic models were utilized to describe the mechanical behaviors of the carbon nanotubes and polymer matrix, respectively. The samples were simultaneously prepared using melt mixing method in a laboratory internal mixer. Different orientations including regular in both longitudinal and transverse directions and random were selected for the nanotubes in the matrix. Also, two structural forms including hollow and solid for the carbon nanotubes were chosen. The highest and lowest predicted moduli were obtained from models with regular orientation in longitudinal and transverse directions, respectively. On the other hand, comparison between the predicted elastic modulus and elastic-plastic behaviors of the samples with their corresponding experimental data revealed that the random orientation in conjunction with hollow structural form gives the best results. Moreover, the selected material model for the thermoplastic elastomer i.e., isotropic hardening can precisely describe the mechanical behavior in both tension and compression modes. It is also concluded that the main source of error in this modeling methodology can be attributed to the effects of interface between polymer and nanotubes and orientation in perpendicular directions.

Keywords:

nanocomposite,
carbon nanotube,
modeling,
RVE,
finite element method

(*)To whom correspondence should be addressed.

E-mail: m.h.r.ghoreishy@ippi.ac.ir

مدل‌سازی عددی و بررسی تجربی رفتار کشسان - پلاستیک نانوکامپوزیت‌های PA6/NBR تقویت شده با نانولوله‌های کربنی به کمک میکرومدل اجزای محدود

میرحمید رضا قریشی*، قاسم نادری، مسعود منصور

تهران، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، پژوهشکده فرایند، گروه فرایند و مهندسی لاستیک،
صندوق پستی ۱۱۲-۱۴۹۷۵

دریافت: ۹۲/۱۱/۲، پذیرش: ۹۳/۳/۵

مجله علوم و تکنولوژی پلیمر،
سال بیست و هفتم، شماره ۵،
صفحه ۴۲۱-۴۰۹، ۱۳۹۳
ISSN: 1016-3255
Online ISSN: 2008-0883

چکیده

در این پژوهش، رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت‌های ساخته شده برپایه لاستیک گرمانرم پلی‌آمید ۶ و کائوچوی آکریلونیتریل بوتادی‌ان (PA6/NBR) تقویت شده با نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره به‌طور نظری و تجربی بررسی شد. دو ترکیب ۴۰٪ و ۶۰٪ کائوچو همراه با سه ترکیب ۱، ۰/۵ و ۱/۵ نانولوله کربنی برای ساخت نمونه‌ها انتخاب شدند. مدل‌سازی برپایه به‌کارگیری روش اجزای حجمی نماینده دوبعدی انجام شد. محاسبات به روش اجزای محدود غیرخطی در محیط نرم‌افزار Abaqus/Standard انجام شد. از مدل‌های مکانیکی کشسان خطی و کشسان - پلاستیک با سخت‌شدگی همسان به ترتیب برای بیان رفتار مکانیکی نانولوله کربنی و ماتریس پلیمری استفاده شد. نمونه‌های واقعی نیز به‌طور هم‌زمان به روش اختلاط مذاب درون مخلوط‌کن داخلی ساخته شدند. داده‌های مربوط به این مدل‌ها از آزمون‌های تجربی مربوط معین شدند. مدل‌سازی به شکل دوبعدی تنش صفحه‌ای در دو حالت کششی و فشاری همراه با آرایش‌های مختلف برای نانولوله کربنی انجام شد. افزون بر این، دو حالت توپر و توخالی برای ذرات نانولوله کربنی در نظر گرفته شد. مقایسه بین مدل‌های کشسانی و نیز رفتار کشسان - پلاستیک پیش‌بینی شده به کمک مدل با نتایج تجربی به‌دست‌آمده از آزمون‌های کششی و فشاری روی نمونه‌های ساخته شده، حاکی از دقت زیاد و صحت مدل‌سازی است. در این پژوهش مشخص شد، آرایش ذرات نانولوله کربنی اتفاقی بوده و رفتار کشسان - پلاستیک نانوکامپوزیت نیز به شکل سخت‌شونده همسان است. همچنین نشان داده شد، اثر فصل مشترک بین ذرات نانولوله کربنی و ماتریس همراه با آرایش ذرات در بعد سوم منبع اصلی خطا در مدل است.

واژه‌های کلیدی

نانوکامپوزیت،
نانولوله کربنی،
مدل‌سازی،
RVE،
روش اجزای محدود

مقدمه

نانولوله‌های کربنی یکی از دگرشکل‌های کربن است که در ۱۹۹۱ کشف شدند. این نانولوله‌ها از لوله‌های توخالی کربن، که به شکل استوانه آرایش‌یافته، تشکیل شده‌اند. این مواد به دو گروه کلی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره (SWCNT) و چنددیواره (MWCNT) دسته‌بندی می‌شوند. نانولوله کربنی تک‌دیواره از یک استوانه توخالی تشکیل شده، در حالی که نوع چنددیواره از چند استوانه کربنی هم‌محور تودرتو با قطرهای متفاوت تشکیل شده است. طول و قطر نانولوله‌های کربنی چنددیواره در مقایسه با نوع تک‌دیواره بسیار متفاوت بوده و در نتیجه خواص آنها نیز بسیار متفاوت است. نانولوله‌های کربنی چنددیواره قطری به اندازه چند ده نانومتر دارند. در حالی که نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره فقط قطری برابر با ۱ nm تا ۲ nm دارند [۱،۲]. نسبت طول به قطر در نانولوله‌های کربنی بسیار زیاد است. همین مسئله سبب شده است تا وقتی از آنها به عنوان تقویت‌کننده، حتی در مقادیر بسیار کم، در ماتریس‌های پلیمری استفاده شود، بتوانند استحکام زیادی را در نانوکامپوزیت‌ها ایجاد کنند. ضریب کشسانی یا مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره در حدود ۱ TPa و استحکام کششی آنها به مراتب بیشتر از فولاد و در حدود ۲۰۰ GPa است، در حالی که چگالی آنها ۶ برابر کمتر از فولاد است [۳،۴].

به دلیل همین خواص بسیار مطلوب، از مهم‌ترین کاربردهای این نانولوله‌ها، ساخت نانوکامپوزیت‌هاست. از میان آنها، امروزه بیشترین توجه به نانوکامپوزیت‌های پایه پلیمری معطوف شده که برای دستیابی به اهداف خاص از قبیل استحکام بسیار زیاد، مقاومت کششی زیاد، کاهش وزن، پایداری گرمایی، افزایش مقاومت شیمیایی و رسانایی الکتریکی استفاده می‌شوند. از مهم‌ترین مواد پلیمری که امروزه استفاده از نانولوله‌های کربنی در آنها مورد توجه قرار گرفته است، لاستیک‌های گرمانرم‌اند [۵-۸]. این مواد به دلیل داشتن ترکیبی از خواص لاستیکی نظیر مانایی فشاری کم، انعطاف‌پذیری زیاد، مقاومت در برابر خستگی، مقاومت گرمایی و سهولت فراورش پلاستیک‌های گرمانرم به روش اکستروژن و قالب‌گیری تزریقی بسیار مورد توجه‌اند [۹،۱۰]. از این رو، تقویت خواص فیزیکی و مکانیکی این مواد با استفاده از نانوپرکننده‌ها مانند نانولوله‌های کربنی زمینه بسیاری از پژوهش‌ها در حوزه این دسته از مواد را تشکیل می‌دهد. پیش‌بینی رفتار مکانیکی به‌ویژه تعیین ضرایب کشسانی نانوکامپوزیت‌ها از مباحث چالش‌برانگیز و در حال توسعه بوده و مطالعات زیادی در این زمینه انجام شده است. استفاده از مدل‌سازی ریاضی در کنار مطالعات تجربی که به‌طور عمده روی اندازه‌گیری خواص مکانیکی و یافتن ارتباط آن با ریزساختار نانوکامپوزیت متمرکزند، می‌تواند بسیار

مفید باشد و به کمک محاسبات رایانه‌ای از نیاز به انجام آزمون‌های هزینه‌بر بکاهد.

تاکنون، مطالعات زیادی روی مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌های برپایه نانولوله کربنی انجام شده که بیشتر آنها معطوف به بررسی اثر پارامترهای ساختاری این نانوذرات نظیر موجی و صاف‌بودن نانولوله کربنی و رفتار سطح مشترک زیر بار بر خواص کشسانی این مواد بوده است [۱۱-۱۳]. پژوهش انجام شده توسط Hernández-Pérez و همکاران [۱۲] درباره اثر سطح مشترک بر خواص کشسانی کامپوزیت‌های برپایه نانولوله کربنی نشان داد، سطح مشترک خواص این دسته از مواد را تحت تأثیر قرار می‌دهد. با وجود تعداد بسیار زیاد این ذرات، در اکثر این مطالعات فقط یک ذره نانولوله کربنی در مدل‌سازی‌ها در نظر گرفته شده است [۱۴-۱۶].

Huang و همکاران [۱۷،۱۸] با استفاده از روشی که شامل انتخاب یک سلول واحد تعیبه شده بود و اولین بار برای پیش‌بینی خواص مکانیکی کامپوزیت‌های پایه فلزی استفاده شد [۱۹]، توانستند مدول یانگ و رفتار کشسانی - پلاستیک پلی‌آمید ۶ (PA6) اصلاح شده با ذرات لاستیک را پیش‌بینی کنند. از روش‌های معتبر که در پژوهش‌های گذشته برای تحلیل مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها استفاده شده است، به‌کارگیری اجزای حجمی نماینده (representative volume element, RVE) است [۲۰،۲۱]. این اجزا، که کوچک‌ترین واحد تکرار شونده ماده‌اند، در واقع نماینده کل سامانه هستند. بنابراین، اجزای حجمی تحلیل شده و خواص حاصل از آنها به کل سامانه نسبت داده می‌شود. استفاده از مدل‌های RVE برای پیش‌بینی خواص مکانیکی که مبتنی بر تحلیل‌های اجزای محدود است، در پژوهش‌های گذشته بیشتر برای پیش‌بینی خواص کشسانی نانوکامپوزیت‌های پایه پلیمری استفاده شده است [۱۳،۲۲،۲۳]. به‌تازگی Zhang و همکاران [۲۴] با شبیه‌سازی مولکولی بارگذاری را در نانوکامپوزیت برپایه پلی‌اتیلن به همراه نانولوله کربنی و گرافن مطالعه کردند. آنها توانستند، چگونگی توزیع بار و نیرو را بین فازهای مختلف با هدف تعیین ناحیه شکست در این دسته از نانوکامپوزیت‌ها پیش‌بینی کنند. از آنجا که تاکنون پژوهشی روی رفتار کشسانی - پلاستیک نانوکامپوزیت‌ها با ماتریس لاستیک گرمانرم زیر بارهای کششی و فشاری انجام نشده است، بنابراین در کار پژوهشی حاضر با استفاده از اجزای حجمی نماینده دوبعدی در مقیاس میکرو براساس سازوکار پیوسته و روش حل اجزای محدود در نرم‌افزار Abaqus مدول کشسانی و رفتار کشسانی - پلاستیک مواد حاضر، زیر بارگذاری‌های مختلف و نیز اثر پارامترهای مختلف از جمله آرایش و جهت‌گیری ذرات نانولوله کربنی در ماتریس لاستیک گرمانرم بررسی و نتایج

جدول ۱- فرمول‌بندی آمیزه‌ها.

SWNT (wt./)	NBR (wt./)	PA6 (wt./)	کد آمیزه
۰	۶۰	۴۰	PN60S0
۰/۵	۶۰	۳۹/۵	PN60S5
۱	۶۰	۳۹	PN60S10
۱/۵	۶۰	۳۸/۵	PN60S15
۰	۴۰	۶۰	PN40S0
۰/۵	۴۰	۵۹/۵	PN40S5
۱	۴۰	۵۹	PN40S10
۱/۵	۴۰	۵۸/۵	PN40S15

داخلی نوع Brabender که دمای آن 240°C و سرعت آن 80 rpm بود، ریخته شد تا ذوب شود. پس از آن، نانولوله کربنی به آن اضافه شد تا جذب PA6 شود، گرانیوی آن افزایش یافته و اختلاف گرانیوی آن با کائوچوی NBR کاهش یابد. پس از 2 min ، گشتاور ثابت شده و کائوچوی NBR اضافه شد. پس از گذشت 8 min که گشتاور مجدداً ثابت شد، مواد از مخلوط‌کن خارج شدند [۴،۲۵]. این آمیزه‌ها طبق روش گفته شده براساس فرمول‌بندی جدول ۱ تهیه شدند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در پژوهش حاضر دو ماتریس با ترکیب درصد‌های متفاوت تهیه شده که در جدول ۱ آمده است. شایان ذکر است، پژوهشی جداگانه روی فرایند ساخت و بررسی خواص این دسته از نانوکامپوزیت‌ها توسط گروه پژوهشی حاضر در حال انجام است که نتایج آن جداگانه منتشر می‌شود.

مدل‌سازی

اجزای حجمی نماینده (RVE)

همان‌طور که در بخش پیش‌تر گفته شد، مدل‌سازی بر مبنای انتخاب یک اجزای حجمی نماینده (RVE) از بهترین روش‌ها در مدل‌سازی میکرومکانیکی نانوکامپوزیت‌ها و تحلیل آنها در شرایط مختلف است. روش مدل‌سازی اتخاذ شده در کار حاضر مشابه روندی است که Liu و Chen ارائه کردند [۱۳]. در این روش، اجزای حجمی نماینده انتخاب و ذرات نانولوله کربنی درون ماتریس پلیمری کاملاً محکم و بدون لغزش در نظر گرفته شدند. با توجه به آرایش‌های متفاوتی که ذرات نانولوله کربنی ضمن اضافه‌شدن به ماتریس لاستیک گرمانرم می‌توانند به خود بگیرند، دو آرایش منظم و اتفاقی برای آنها در نظر گرفته شد. هر چند در حالت واقعی آرایش اتفاقی ارجح است، با وجود این در شبیه‌سازی، دو مدل مختلف اجزای حجمی نماینده

مدل‌سازی در مقیاس میکرو با نتایج تجربی در مقیاس ماکرو مقایسه و تحلیل شدند. مهم‌ترین ویژگی و نوآوری این پژوهش را، که برای اولین بار انجام می‌شود، در مقایسه با سایر فعالیت‌های مشابه انجام شده، می‌توان در مدل‌سازی رفتار مکانیکی لاستیک گرمانرم پلی‌آمید ۶ و کائوچوی NBR با ترکیب درصد‌های مختلف به همراه نانولوله‌های کربنی، بررسی اثر آرایش ذرات نانولوله کربنی به دو روش تجربی و نظری، استفاده از مدل کشسان - پلاستیک با سخت‌شوندگی همسان و مقایسه داده‌های به دست آمده با نتایج تجربی درباره نانوکامپوزیت ساخته شده دانست. هدف اصلی پژوهش حاضر این است که نشان دهد، چگونه نتایج شبیه‌سازی خواص مکانیکی مواد مزبور در مقیاس میکرو در حالت‌های کششی و فشاری در انطباق خوبی با نتایج تجربی در مقیاس ماکروست.

تجربی

مواد

مواد مصرفی برای ساخت ماتریس لاستیک گرمانرم عبارت از PA6 با نام تجاری Akulon®F30B محصول کشور هلند با چگالی $1/313\text{ g/cm}^3$ و دمای ذوب 220°C و کائوچوی آکریلونیتریل بوتادیان (NBR) با نام تجاری Kosyn-KNB35L محصول کشور کره با چگالی $1/394\text{ g/cm}^3$ و 34% آکریلونیتریل و گرانیوی مونی ۴۱ در 100°C است. نانولوله کربنی استفاده شده در این پژوهش نیز ساخت پژوهشگاه صنعت نفت ایران از نوع تک‌دیواره با مدول یانگ حدود 1 TPa بود.

دستگاه‌ها

برای بررسی خواص مکانیکی و تعیین تجربی ضرایب کشسانی از دو آزمون کششی و فشاری استفاده شد. این دو آزمون با دستگاه Instron مدل ۶۰۲۵ مطابق با استاندارد ASTM D 638 و سرعت کشش 10 mm/min برای آزمون کششی و استاندارد ASTM D 695 و سرعت اعمال نیروی $0/3\text{ mm/min}$ برای آزمون فشاری انجام شد.

روش‌ها

آمیزه‌سازی

برای ساخت نانوکامپوزیت، ابتدا PA6 به مدت 24 h در دمای 80°C در گرم‌خانه خلأ قرار گرفت تا کاملاً خشک شود. سپس، این ماده که نسبت به کائوچوی NBR گرانیوی کمتری داشت، درون مخلوط‌کن

مدل‌سازی نانولوله کربنی

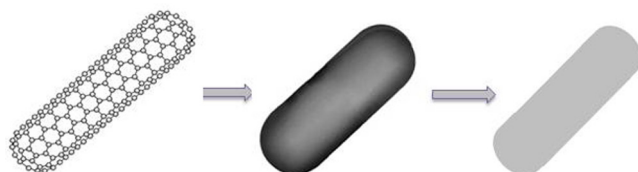
نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره سیلندرهای بلندی هستند که حداقل یک انتهای آنها با یک نیم‌کره با ساختار فولرن کروی مسدود شده است. در این مطالعه، به دلیل اینکه از مدل‌سازی دوبعدی استفاده شد، نانولوله کربنی مطابق شکل ۲ و با طول محدود فرض شد. نانولوله کربنی با مدول یانگ معادل ۱ TPa، نسبت پواسون ۰/۳، طول ۱۰۰ nm، قطر خارجی آن ۱۰ nm و شعاع نیم‌کره بالا و پایین ۵ nm برای تمام مدل‌سازی‌ها در نظر گرفته شد. در ضمن، رفتار نانولوله کربنی در تمام حالت‌ها کشسان فرض شد (شکل ۲) [۱۳].

نحوه ساده‌سازی نانولوله کربنی با تصویرکردن حالت سه‌بعدی به حالت دوبعدی در صفحه با فرض پیوسته‌بودن ساختار و بسته‌بودن دو سر آن در مدل‌سازی در شکل ۲ نشان داده شده است.

نانولوله‌های کربنی از لوله‌های کربنی توخالی ساخته شده‌اند، اما به دلیل انتخاب مدل دوبعدی که از برش حالت سه‌بعدی به دست آمده است، در مدل‌سازی آن، مطابق شکل ۳، این ذرات به دو شکل توپر و توخالی شبیه‌سازی شدند تا اثر هر دو حالت بررسی شود. در حالت توخالی شعاع داخلی استوانه و نیز شعاع داخلی نیم‌دایره بالایی و پایینی ۴/۶ nm در نظر گرفته شد.

مدل‌سازی ماتریس

همان‌طور که پیش‌تر عنوان شد، رفتار ماتریس از نوع کشسان - پلاستیک در نظر گرفته شد. برای مدل‌سازی مکانیکی، رفتار ماده در دو بخش مجزای کشسان و پلاستیک شبیه‌سازی می‌شود. مدل‌سازی بخش کشسان تنها با داشتن مدول کشسان و نسبت پواسون و در نظر گرفتن رفتار کشسان خطی تا پیش از نقطه تسلیم انجام می‌شود. اما، برای مدل‌سازی رفتار پلاستیک ماتریس یعنی پس از شروع نقطه تسلیم مدل‌های متفاوتی تاکنون ارائه شده [۲۷] که در این پژوهش از نظریه سخت‌شوندگی (hardening) استفاده شده است. به طور کلی، اگر ماده از نوع پلاستیک کامل (perfect plastic) باشد، در این حالت پس از رسیدن به نقطه تسلیم به ازای تنش ثابت، کرنش تا پارگی (بدون افزایش تنش) افزایش می‌یابد. در پژوهش حاضر، رفتار پلاستیک ماتریس براساس نظریه سخت‌شوندگی همسان شبیه‌سازی



شکل ۲- ساده‌سازی نانولوله کربنی سه‌بعدی به حالت دوبعدی.

برپایه توزیع منظم و اتفاقی نانولوله‌های کربنی و به شکل دوبعدی از برش زدن حالت سه‌بعدی در نرم‌افزار Abaqus طراحی و پس از اعمال شرایط مرزی زیر بارگذاری قرار گرفتند (شکل ۱).

برای مدل‌سازی نانوذرات در مقیاس میکرو، دو دیدگاه دینامیک مولکولی و دیدگاه پیوسته وجود دارد [۲۶]. در دیدگاه دینامیک مولکولی در مدل‌سازی ذرات نانولوله کربنی، پیوند بین اتم‌ها در شبیه‌سازی در نظر گرفته می‌شود. اما این مدل‌سازی، نیازمند در نظر گرفتن تعداد بسیار زیادی از اتم‌ها و نیز استفاده از فرمول‌های پیچیده است که محاسبات در مقیاس نانو را به شدت افزایش می‌دهد. کسر وزنی ذرات نانولوله کربنی در نانوکامپوزیت حاضر حدود ۱٪ بوده و در مقایسه با ماتریس خیلی کمتر است، بنابراین، در مطالعه اخیر از دیدگاه پیوسته برای مدل‌سازی استفاده شده است که در آن ذرات نانولوله کربنی درون ماتریس پلیمری به‌طور پیوسته فرض می‌شوند. پیش از طراحی RVE، مجموعه‌ای از فرضیه‌ها برای ساده‌کردن مدل‌سازی و کاهش زمان محاسبات در نظر گرفته شدند:

- ۱- ذرات نانولوله کربنی کاملاً محکم به ماتریس چسبیده‌اند. این بدین معنی است که از لغزش ذرات نانولوله در ماتریس صرف‌نظر شده است.
- ۲- ذرات نانولوله کربنی به دو شکل توپر و توخالی در مدل‌سازی فرض شدند.

۳- ذرات نانولوله کربنی صاف و هم‌اندازه در نظر گرفته شدند.

۴- ماتریس پلیمری که آلیاژ لاستیک و پلاستیک است، به شکل تک‌فاز فرض شده و خواص آن به‌طور مستقیم از اندازه‌گیری تجربی به دست آمده است.

۵- رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت مستقل از زمان در نظر گرفته شده است.



(الف)



(ب)

شکل ۱- برش صفحه‌ای از مدل سه‌بعدی و شبکه‌بندی آن: (الف) مدل منظم و (ب) مدل اتفاقی.

در این معادله، Y تنش تسلیم در کشش تک محوری است. بر این اساس قانون سخت شونده گی (معادله ۱) به شکل معادله (۳) در خواهد آمد:

$$f_0(\sigma_{ij}, K_i) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2} - Y - K_i = 0 \quad (3)$$

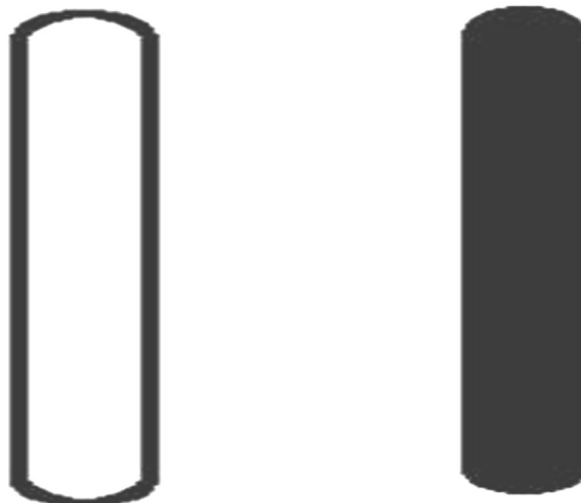
این معادله، با توجه به شرایط بارگذاری و تعریف پارامتر سخت شونده گی که می تواند ثابت یا متغیر باشد، حل می شود. به عنوان مثال، اگر تنش از نوع صفحه ای باشد، معادله (۳) به شکل معادله (۴) ساده می شود:

$$K_i^2 = \sigma_1^2 - \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2^2 \quad (4)$$

روش مدل سازی اتخاذ شده در پژوهش حاضر بدین ترتیب است که تمام اجزا از جمله ذرات نانولوله کربنی به شکل مدل محیط پیوسته با خواص معادل مدل شده است. ابتدا، ابعاد مدل براساس درصد حجمی ذرات نانولوله کربنی در مقیاس میکرو معین می شود. پس از طراحی مدل، رفتار مکانیکی ذرات نانولوله کربنی به حالت کشسان در نظر گرفته شده و مدول کشسانی و نسبت پواسون آن به نرم افزار داده می شود. از طرف دیگر، رفتار مکانیکی ماتریس به شکل کشسان - پلاستیک بیان می شود.

برای تعیین داده های رفتار مکانیکی، ابتدا نمونه بدون ذرات تقویت کننده ساخته شده و سپس رفتار تنش- کرنش آن با آزمون مربوط معین می شود. به دنبال آن داده ها در دو بخش وارد می شوند. در بخش اول، مدول کشسانی و نسبت پواسون ماتریس وارد می شود. اما در بخش دوم که پس از رسیدن به نقطه تسلیم است، مقادیر کرنش پلاستیک و تنش به شکل جدول از داده های تنش - کرنش استخراج و به مدل اعمال می شوند. شایان ذکر است، لاستیک گرمانرم NBR/PA6 ساخته شده در این پژوهش ساختاری دوفازی دارد، ولی در عین حال این دو فاز کاملاً سازگارند. اما، به سه دلیل ماتریس پلیمری در مدل سازی یک پارچه در نظر گرفته شد. اول اینکه جداسازی این دو فاز در داخل مدل شاید به ظاهر کاری ساده به نظر می رسد، اما در نظر گرفتن فصل مشترک و انتخاب و اعمال سازوکاری که بتواند به خوبی از عهده انتقال مکانیکی تنش بین این دو فاز برآید، خود موضوع پژوهشی جداگانه است که در این کار از آن صرف نظر شده است.

نکته دیگر اینکه در نظر گرفتن جداگانه دو فاز پلیمری موجب بزرگ شدن اندازه مدل اجزای محدود شده که به دنبال خود دشواری در اجرای برنامه را سبب می شود. نکته سوم اینکه داده های مورد نیاز برای بیان رفتار ماتریس پلیمری در نانوکامپوزیت به طور مستقیم از



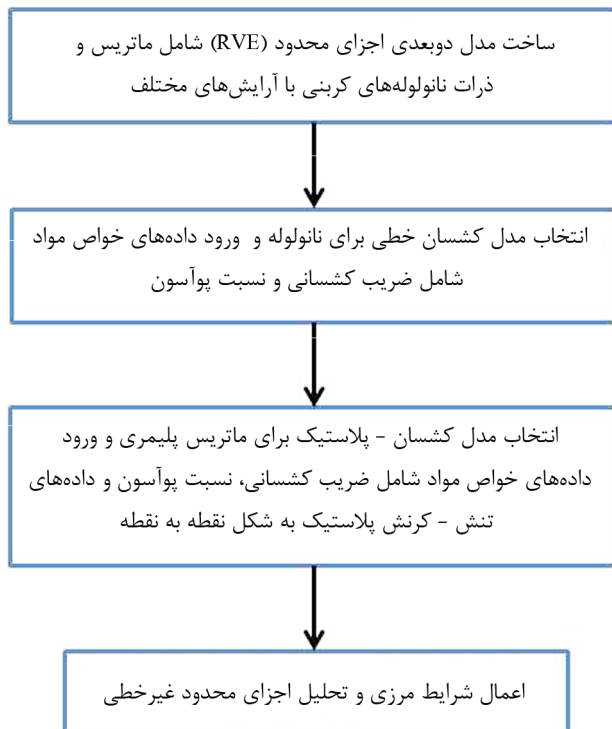
شکل ۳- حالت های مختلف نانولوله کربنی در مدل سازی: (الف) توپر و (ب) توخالی.

شده است که ساده ترین و در عین حال پرکاربردترین نظریه بیان کننده رفتار تنش - کرنش ماده در ناحیه پلاستیک است. این نظریه بیان می کند، در جسمی که زیر بارگذاری قرار گرفته است، پس از نقطه تسلیم به دلیل نرم تر شدن ماده، تنش به طور یکنواخت با سرعت کمتری نسبت به کرنش افزایش می یابد. در حالت کلی که بارگذاری در سه جهت انجام می شود، باید تنش های اصلی را در نظر گرفت. طبق نظریه سخت شونده گی همسان، تنش های اصلی پس از رخ دادن تسلیم به طور یکنواخت در سه جهت نسبت به کرنش افزایش می یابند. اگر تابع f معیاری از تنش تسلیم باشد، به گونه ای که به ازای $f = 0$ تسلیم رخ دهد، در این حالت قانون سخت شونده گی براساس تابع f که معیار بیان کننده سخت شونده گی نوع همسان در فضای تنش های اصلی است، به شکل معادله (۱) بیان می شود [۲۷]:

$$f(\sigma_{ij}, K_i) = f_0(\sigma_{ij}) - K_i = 0 \quad (1)$$

در این معادله، σ_{ij} مؤلفه های تنش، K_i پارامتر سخت شونده گی و تابع f_0 معیاری از سطح تسلیم اولیه است. در پژوهش حاضر، سطح تسلیم از نوع Von Mises در نظر گرفته شده است. در نتیجه، سطح تسلیم اولیه که از تنش های اصلی تشکیل شده است، براساس تابع f به شکل معادله (۲) نوشته می شود:

$$f_0(\sigma_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2} - Y \quad (2)$$



شکل ۵- الگوریتم چهارمرحله‌ای استفاده شده در این پژوهش برای شبیه‌سازی نانوکامپوزیت.

داده‌های به‌دست آمده با نتایج حاصل از مدل‌سازی مقایسه و بررسی شدند. شایان ذکر است، نتایج به‌دست آمده براساس تنش و کرنش اسمی ارائه شدند که به ترتیب از تقسیم نیرو به سطح مقطع اولیه و تقسیم جابه‌جایی به طول اولیه تعریف می‌شوند. شکل ۵ نمودار جریان الگوریتم به‌کار برده شده در این پژوهش را نشان می‌دهد که چهار مرحله دارد.

نتایج و بحث

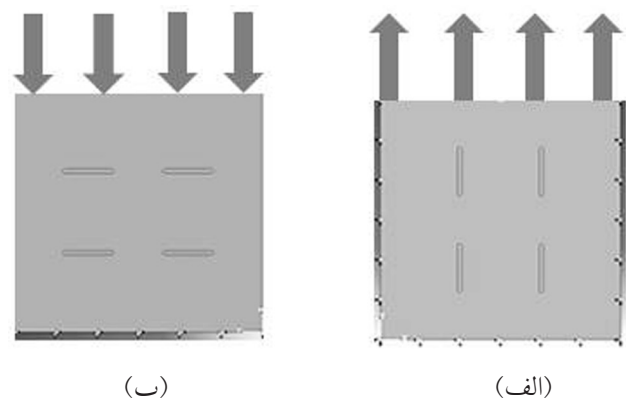
حالت کششی

نمودار تنش برحسب کرنش اسمی در حالت کششی برای نمونه‌های حاوی ۶۰٪ کائوچوی NBR و ترکیب درصدی مختلف نانولوله‌کربنی (نمونه‌های PN60S5، PN60S10 و PN60S15) که از مدل‌های منظم با آرایش طولی، عرضی و مدل اتفاقی به روش اجزای محدود به‌دست آمده‌اند، به همراه داده‌های تجربی مربوط در شکل‌های ۶ تا ۸ نشان داده شده‌اند. برای هر مدل نیز دو حالت برای نانولوله کربنی شامل حالت توخالی و توپر در نظر گرفته شد. به روش مشابه در شکل‌های ۹ تا ۱۱ نیز نمودارهای گفته شده برای نمونه‌های

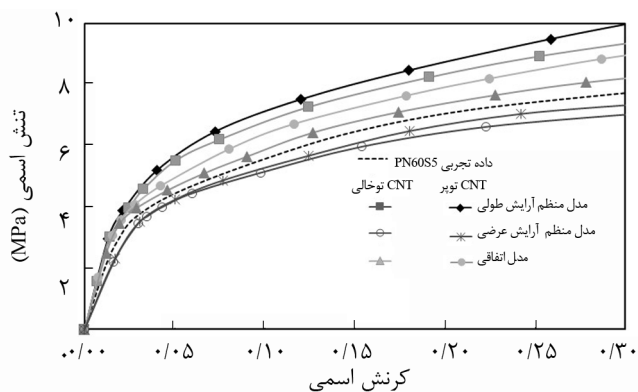
رفتار مکانیکی لاستیک گرم‌انرم بدون نانولوله کربنی استخراج شد. در این حالت، لاستیک گرم‌انرم بدون تقویت‌کننده تک‌فاز و یک‌پارچه است. بنابراین، از آنجا که رفتار آن در مقیاس ماکروسکوپی معین شده بود، فرض یک‌پارچه بودن ماتریس پلیمری صحیح است.

اجزای استفاده شده برای ماتریس و نانولوله کربنی هر دو از نوع تنش صفحه‌ای هستند. روش حل غیرخطی و شبکه اجزای محدود انتخابی از نوع مثلثی شش‌گره‌ای مرتبه دوم بوده و با انتگرال‌گیری کاهش یافته است. برای تعیین تعداد اجزا و نیز توزیع چگالی شبکه اجزای محدود از روش شبکه‌بندی انطباقی (adaptive meshing) استفاده شد. با توجه به اینکه مقادیر مختلفی از نانولوله‌های کربنی (مطابق جدول ۱) در نظر گرفته شدند، بنابراین مدل‌های اجزای محدود با تعداد اجزا و گره‌های مختلف برای هر نمونه ساخته شد.

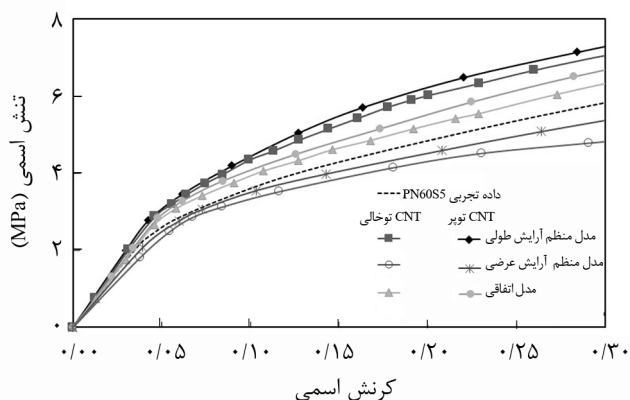
به‌عنوان مثال، برای مقدار ۱٪ در دو حالت منظم و اتفاقی در شکل ۱ نشان داده شده است. شایان ذکر است، در حالت کششی داده‌های آزمون کششی و در حالت فشاری داده‌های آزمون فشاری به مدل‌های انتخابی نسبت داده شدند. افزون بر این در مدل اتفاقی، بارگذاری تابعی از آرایش‌یافتگی ذرات نانولوله کربنی نیست. به عبارت بهتر، بار وارد شده را می‌توان در هر جهتی به مدل اعمال کرد. اما در طراحی مدل منظم، با توجه به نحوه قرارگرفتن ذرات نانولوله کربنی که می‌تواند به دو شکل عرضی و طولی باشد، بار نیز در دو جهت طولی و عرضی به مدل اعمال شد. شکل ۴ به‌طور نمونه دو حالت از چهار حالت ممکن را نشان می‌دهد. همچنین، در حالت فشاری به دلیل انتخاب مدل دوبعدی برای جلوگیری از خمیدگی مدل زیر بار اعمالی درجات آزادی آن در جهت عمود بر بارگذاری بسته شده است. در پژوهش حاضر، آزمون‌های کششی و فشاری انجام شده و



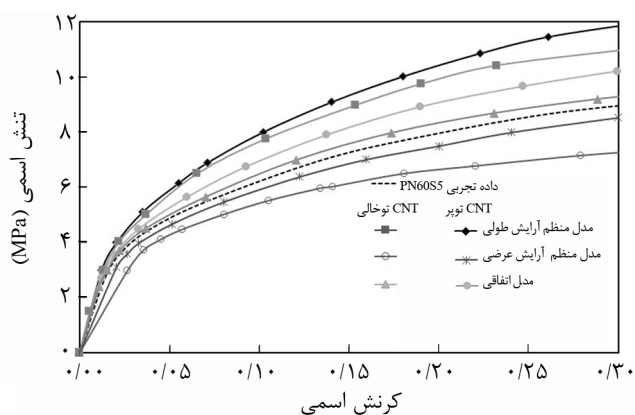
شکل ۴- نحوه قرارگرفتن ذرات نانولوله کربنی نسبت به بار اعمالی فرضی در مدل منظم: (الف) بارگذاری کششی و آرایش طولی و (ب) بارگذاری فشاری و آرایش عرضی.



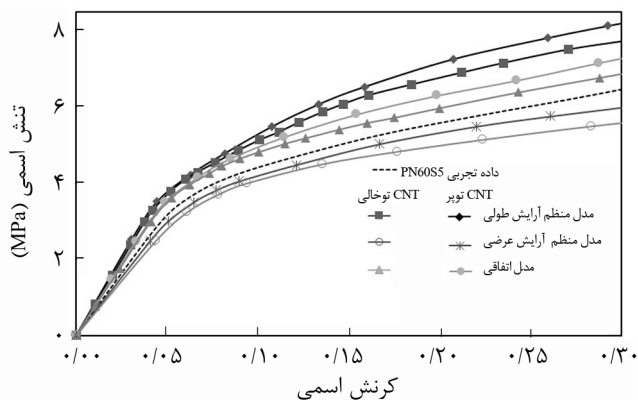
شکل ۹- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت کششی برای نانوکامپوزیت شامل ۴۰٪ کائوچوی NBR و ۰/۵٪ نانولوله کربنی.



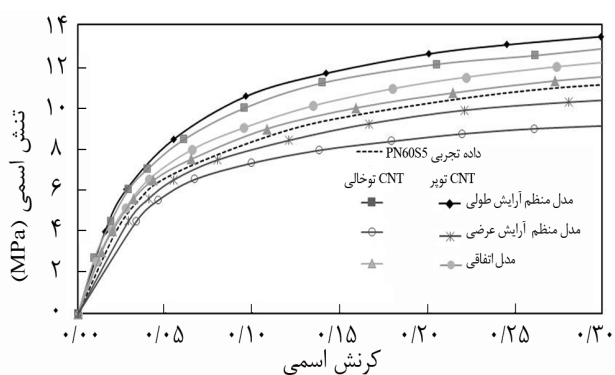
شکل ۶- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت کششی برای نانوکامپوزیت شامل ۶۰٪ کائوچوی NBR و ۰/۵٪ نانولوله کربنی.



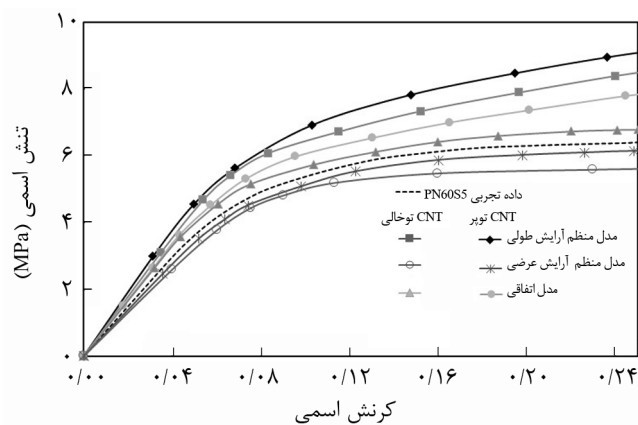
شکل ۱۰- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت کششی برای نانوکامپوزیت شامل ۴۰٪ کائوچوی NBR و ۱٪ نانولوله کربنی.



شکل ۷- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت کششی برای نانوکامپوزیت شامل ۶۰٪ کائوچوی NBR و ۱٪ نانولوله کربنی.



شکل ۱۱- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت کششی برای نانوکامپوزیت شامل ۴۰٪ کائوچوی NBR و ۱/۵٪ نانولوله کربنی.



شکل ۸- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت کششی برای نانوکامپوزیت شامل ۶۰٪ کائوچوی NBR و ۱/۵٪ نانولوله کربنی.

جدول ۲- مقادیر مدول های تجربی و پیش بینی شده نمونه ها در حالت کششی برحسب MPa.

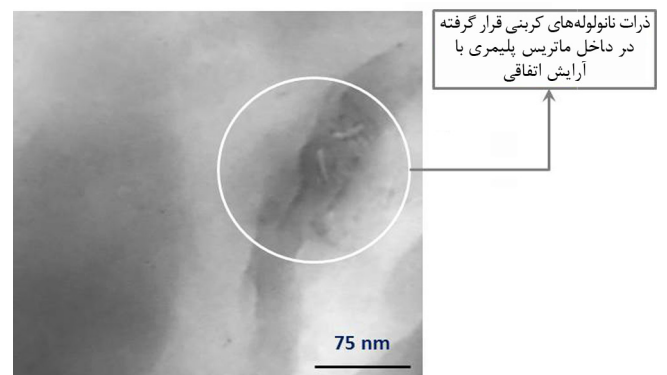
آمیزه	تجربی	مدل اتفاقی نانولوله کربنی		مدل منظم آرایش طولی نانولوله کربنی		مدل منظم آرایش عرضی نانولوله کربنی	
		توپر	توخالی	توپر	توخالی	توپر	توخالی
PN60S5	۵۷/۵	۶۱/۵	۵۹/۶	۷۱/۰۱	۶۹	۵۵/۸	۵۱/۹
PN60S10	۶۷	۷۰/۵	۶۸/۳	۷۷/۲۵	۷۵/۰۱	۶۱	۵۵/۲
PN60S15	۷۴/۶	۷۸	۷۶	۸۵/۲	۸۳	۶۹/۷	۶۲
PN40S5	۳۱۰/۱	۳۱۹	۳۱۵	۳۲۹	۳۲۶/۳	۳۰۶	۳۰۱/۰۱
PN40S10	۳۵۶	۳۶۳/۷	۳۶۲/۱	۳۷۱/۷۱	۳۶۸/۷۱	۳۴۵/۶	۳۳۶
PN40S15	۳۸۵/۵	۴۹۸/۳	۳۹۱/۸	۴۰۹	۴۰۵/۳۲	۳۷۱	۳۶۲/۷۱

طولی به آن اعمال می شود. از طرف دیگر، مدل منظم با آرایش عرضی نظیر کامپوزیت الیاف بلند است که نیرو در جهت عرضی به آن اعمال می شود، در نتیجه کمترین مدول را پیش بینی می کند.

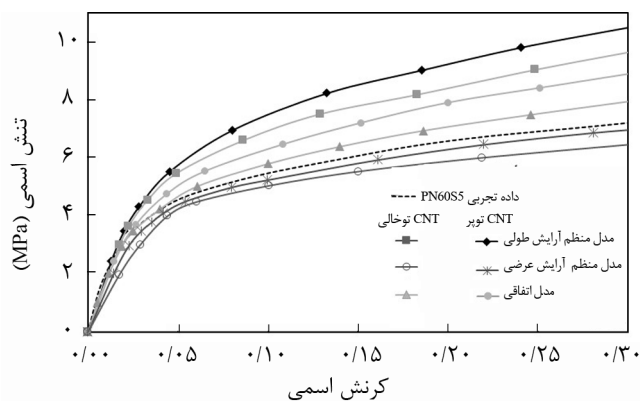
برای مدل با آرایش اتفاقی نیز مدول پیش بینی شده بین دو حالت منظم با آرایش طولی و عرضی قرار می گیرد. این موضوع بیانگر آن است که رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت به دلیل مختلف بودن جهت الیاف متأثر از رفتار مکانیکی در هر دو جهت طولی و عرضی است. مقایسه بین داده های مربوط به مدول های پیش بینی شده با مقادیر تجربی حاکی از آن است که نزدیک ترین مقدار پیش بینی شده مربوط به مدل های با آرایش اتفاقی نانولوله است. نگاهی کوتاه به روش ساخت این نانوکامپوزیت به خوبی بیان می کند که توزیع این ذرات در داخل ماتریس پلیمری فقط می تواند اتفاقی باشد، زیرا هیچ نوع سازوکار اعمال آرایش یافتگی به کار برده نشده است. برای تأیید بهتر این مطلب، تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری تهیه شده از نمونه مدنظر در شکل ۱۲ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، ذرات نانولوله کربنی در جهت های مختلف قرار گرفته اند که تأییدی بر اتفاقی بودن آرایش آنهاست. از بین دو مدل با آرایش اتفاقی که در آنها نانولوله کربنی به شکل های توپر و توخالی در نظر گرفته شده اند، مدل برپایه فرض توخالی بودن پیش بینی دقیق تری از مدول دارد. این موضوع نشان دهنده آن است که فرض توخالی بودن ذرات نانولوله کربنی به واقعیت نزدیک تر از حالت توپر است.

پس از اتمام ناحیه خطی که پایان حالت کشسانی است، رفتار پلاستیک آغاز می شود. نمودار تغییرات تنش برحسب کرنش در این ناحیه که از مدل با آرایش اتفاقی توخالی در هر سه ترکیب درصد نانولوله به دست آمده اند، بیشترین انطباق را با حالت تجربی دارند. این نیز بیانگر و تأییدکننده آرایش اتفاقی نانولوله کربنی در نمونه های

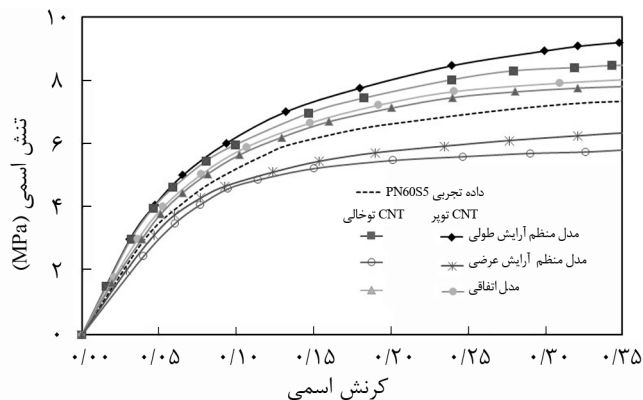
حاوی ۴۰٪ کائوچوی NBR و ترکیب درصدهای مختلف نانولوله کربنی (نمونه های PN40S5، PN40S10 و PN40S15) نشان داده شده اند. همچنین، مدول کشسانی به دست آمده از هر مدل به همراه داده تجربی مربوط به آن در جدول ۲ آمده است. این مدول های کشسانی از شیب اولیه نمودار تنش برحسب کرنش محاسبه شدند. همان طور که مشاهده می شود و نیز انتظار می رود، افزایش مقدار نانولوله در نانوکامپوزیت موجب افزایش مدول کشسانی می شود. بیشترین افزایش مدول مربوط به مدل منظم با آرایش طولی و در مقابل کمترین افزایش مربوط به مدل منظم با آرایش عرضی است. مدول (و نیز رفتار تنش برحسب کرنش) پیش بینی شده با مدل اتفاقی بین دو حالت منظم با آرایش طولی و عرضی قرار می گیرد. این پیش بینی کاملاً منطبق بر رفتار مکانیکی مورد انتظار است. در حالت منظم با آرایش طولی به دلیل زیاد بودن نسبت طول به قطر نانولوله بیشترین افزایش مدول حاصل می شود. به عبارت بهتر، در این حالت ذرات نانولوله کربنی همانند الیاف بلند عمل می کند که نیرو در جهت



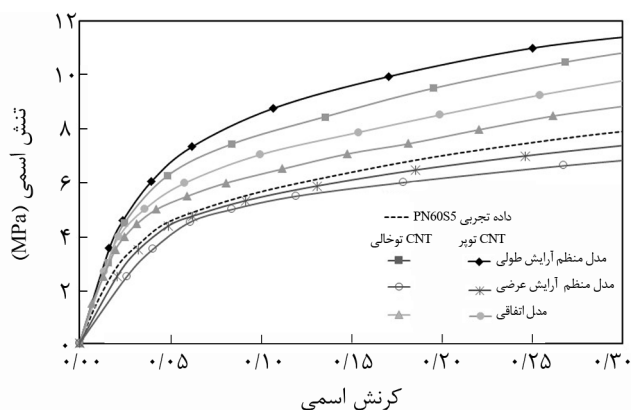
شکل ۱۲- تصویر TEM از نانوکامپوزیت ساخته شده که نشان دهنده آرایش اتفاقی ذرات نانولوله کربنی است.



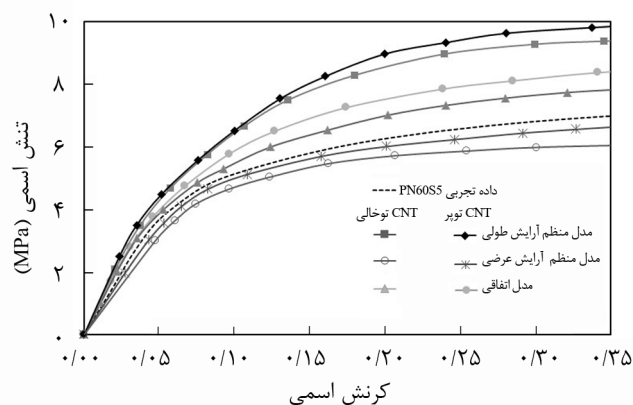
شکل ۱۶- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت فشاری برای نانوکامپوزیت شامل ۴۰٪ کائوچوی NBR و ۰/۵٪ نانولوله کربنی.



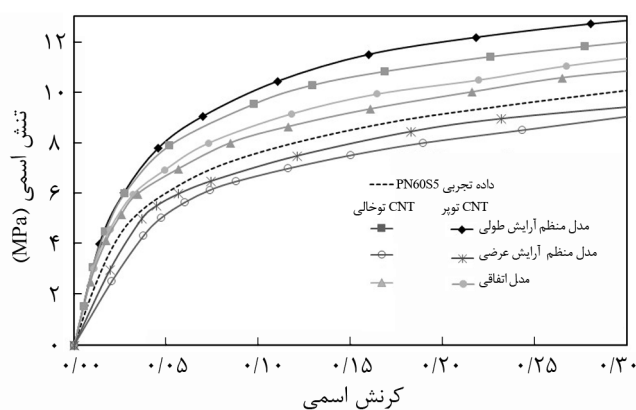
شکل ۱۳- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت فشاری برای نانوکامپوزیت شامل ۶۰٪ کائوچوی NBR و ۰/۵٪ نانولوله کربنی.



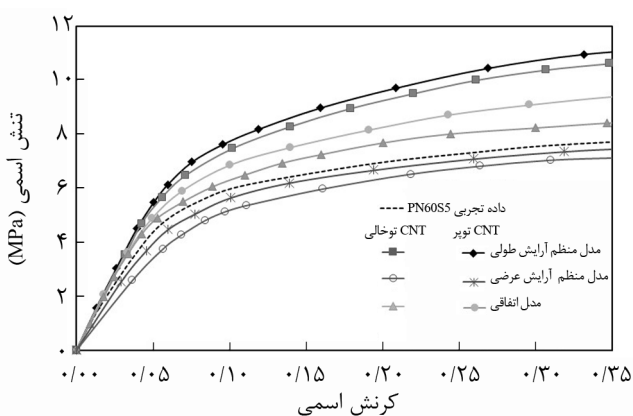
شکل ۱۷- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت فشاری برای نانوکامپوزیت شامل ۴۰٪ کائوچوی NBR و ۱٪ نانولوله کربنی.



شکل ۱۴- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت فشاری برای نانوکامپوزیت شامل ۶۰٪ کائوچوی NBR و ۱٪ نانولوله کربنی.



شکل ۱۸- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت فشاری برای نانوکامپوزیت شامل ۴۰٪ کائوچوی NBR و ۱/۵٪ نانولوله کربنی.



شکل ۱۵- نمودار تنش - کرنش تجربی و پیش بینی شده با مدل در حالت فشاری برای نانوکامپوزیت شامل ۶۰٪ کائوچوی NBR و ۱/۵٪ نانولوله کربنی.

جدول ۳- مقادیر مدول های تجربی و پیش بینی شده نمونه ها در حالت فشاری بر حسب MPa.

مشخصه	تجربی	مدل اتفاقی نانولوله کربنی		مدل منظم آرایش طولی نانولوله کربنی		مدل منظم آرایش عرضی نانولوله کربنی	
		توپر	توخالی	توپر	توخالی	توپر	توخالی
PN60S5	۸۰/۳	۹۰/۵	۸۵	۹۵/۷۱	۹۳/۸۵	۷۲/۹	۶۸/۴۵
PN60S10	۹۰/۱	۹۹/۵	۹۶/۶۵	۱۰۶/۶۵	۱۰۴/۰۱	۸۵/۰۵	۷۳/۵۵
PN60S15	۱۰۹/۶۵	۱۱۸/۳۵	۱۱۳/۳	۱۲۱/۵	۱۲۰	۱۰۱/۲۵	۹۲/۸
PN40S5	۴۲۹/۲۵	۴۳۶/۶	۴۳۲/۵	۴۳۹/۲۵	۴۳۶/۰۲	۴۱۶/۵	۴۰۹/۰۱
PN40S10	۴۷۹/۹	۴۹۰	۴۸۶	۵۰۰/۴۹	۴۹۷/۳۲	۴۶۵	۴۵۸
PN40S15	۵۷۲	۵۸۱/۵	۵۷۷/۸	۵۹۲/۶۵	۵۸۸/۹	۵۵۳	۵۴۲/۵

در محاسبات نادیده گرفته شود و در نتیجه مقدار مدول پیش بینی شده بیشتر از مقدار واقعی به دست آید. دومین نکته اثر فصل مشترک بین ذرات نانولوله کربنی و ماتریس پلیمری است. در حالی که مطالعات و مشاهدات حاکی از اثر فصل مشترک ذرات نانولوله کربنی بر خواص مکانیکی است [۱۲]. در کار حاضر این اثر در نظر گرفته نشده که می تواند بر خواص پیش بینی شده اثر بگذارد. بدیهی است، با توسعه بیشتر مدل به حالت سه بعدی و در نظر گرفتن اثر سرخوردگی ذرات نانولوله کربنی در داخل ماتریس می توان از این خطاها کاست. هر چند که با همین نوع مدل سازی نیز دقت کاملاً قابل قبولی برای پیش بینی رفتار مکانیکی به دست می آید.

نتیجه گیری

در این پژوهش، رفتار کشسانی - پلاستیک نانوکامپوزیت های ساخته شده بر پایه لاستیک گرمانرم PA6/NBR در ترکیب درصدهای مختلف نانولوله کربنی با به کارگیری اجزای حجمی نماینده دوبعدی مبتنی بر دیدگاه مکانیک پیوسته به روش اجزای محدود در نرم افزار Abaqus شبیه سازی شدند. سپس، داده های به دست آمده با نتایج آزمون های کششی و فشاری در حالت ماکروسکوپی مقایسه و بررسی شدند. نتایج آزمون های ایستا نظیر کششی و فشاری نشان داد، افزودن ذرات نانولوله کربنی به ماتریس لاستیک گرمانرم مدول کشسانی و استحکام کششی این نانوکامپوزیت را در حالت های کششی و فشاری افزایش می دهد. این تقویت کنندگی را می توان به برهم کنش فصل مشترک ماتریس پلیمری و نانولوله کربنی در حالت اختلاط مذاب و نیز مدول زیاد نانولوله کربنی نسبت داد. از سوی دیگر، نتایج به دست آمده از

ساخته شده است. همچنین، افزایش تدریجی تنش بر حسب کرنش اندازه گیری شده پس از رسیدن به نقطه تسلیم (آغاز مرحله پلاستیک) نیز بیانگر آن است که مدل انتخابی کشسان پلاستیک از نوع سخت شونده گی همسان در مدل سازی، انتخاب صحیح و مناسبی بوده است.

حالت فشاری

همانند قبل در شکل های ۱۳ تا ۱۵ نمودار تنش بر حسب کرنش در حالت فشاری برای نمونه های حاوی ۶۰٪ کائوچوی NBR و ترکیب درصدهای مختلف نانولوله کربنی (نمونه های PN60S5، PN60S10 و PN60S15) که از مدل های منظم با آرایش طولی، عرضی و مدل اتفاقی به روش اجزای محدود به دست آمده اند، به همراه داده های تجربی مربوط آورده شده اند. به روش مشابه در شکل های ۱۶ تا ۱۸ نیز نمودارهای پیش گفته برای نمونه های حاوی ۴۰٪ کائوچوی NBR و ترکیب درصدهای مختلف نانولوله کربنی (نمونه های PN40S5، PN40S10 و PN40S15) نشان داده شده اند. در هر دو حالت نیز نانولوله کربنی به دو شکل توپر و توخالی فرض شده است. مقایسه بین نمودارهای تنش بر حسب کرنش و مدول کشسانی پیش بینی شده (جدول ۳) به خوبی مؤید قابلیت مدل اجزای محدود با آرایش اتفاقی است. نکته مهمی که هنگام مقایسه مدول های تجربی و مدل سازی در تمام نمونه ها مشاهده می شود، بیشتر بودن نسبی مدول پیش بینی شده نسبت به مقادیر تجربی است. علت اصلی این موضوع در دو عامل نهفته است. اول اینکه آرایش اتفاقی ذرات نانولوله در حالت واقعی به شکل سه بعدی است، در حالی که در مدل دوبعدی امکان در نظر گرفتن اثر آرایش ذرات در بعد سوم وجود ندارد. این موضوع باعث می شود تا کاهش مدول ناشی از انحراف آرایش در جهت عمود بر صفحه

نشان داد، مدل‌های RVE دوبعدی انتخابی در نرم افزار Abaqus با وجود اعمال فرضیات ساده‌کننده که انجام محاسبات را کاهش می‌دادند، می‌توانند رفتار کشسانی - پلاستیک نانوکامپوزیت مطالعه شده را به خوبی پیش‌بینی کنند.

داده‌های تجربی با نتایج به دست آمده از مدل‌سازی‌های رایانه‌ای در حالت‌های مختلف از انطباق خوبی برخوردار بودند. بهترین انطباق مربوط به مدل اتفاقی است که در آن آرایش ذرات نانولوله کربنی به طور اتفاقی در نظر گرفته شده بودند. در ضمن نتایج شبیه‌سازی‌ها

مراجع

- Iijima S., Carbon Nanotubes: Past, Present, and Future, *Physica B: Condensed Matter*, **323**, 1-5, 2002.
- Srivastava D., Cho K., and Wei C., Nanomechanics of Carbon Nanotubes and Composites, *Appl. Mech. Rev.*, **56**, 215-230, 2003.
- Yu M.F., Fundamental Mechanical Properties of Carbon Nanotubes: Current Understanding and the Related Experimental Studies, *J. Eng. Mater. Technol.*, **126**, 271-278, 2004.
- Chen P., Kim H.S., and Jin H.J., Preparation, Properties and Application of Polyamide/Carbon Nanotube Nanocomposites, *Macromol. Res.*, **17**, 207-217, 2009.
- Ajayan P.M., Schadler L.S., and Braun P.V., *Nanocomposite Science and Technology*, Wiley-VCH, 2006.
- Tjong S.C., Structural and Mechanical Properties of Polymer Nanocomposites, *Mater. Sci. Eng., R: Reports*, **53**, 73-197, 2006.
- Hay J. and Shaw S., A Review of Nanocomposites, www.nano.org.uk, 2000.
- Ray S.S. and Okamoto M., Polymer/Layered Silicate Nanocomposites: A Review from Preparation to Processing, *Prog. Polym. Sci.*, **28**, 1539-1641, 2003.
- Kear K.E., *Developments in Thermoplastic Elastomers* (Rapra Review Reports), Smithers Rapra, 2003.
- Cruz S.M.F.D., Characterization of Nano-Reinforced Thermoplastic Elastomers, repositorium.sdum.uminho.pt, 2009.
- Ashrafi B. and Hubert P., Modeling the Elastic Properties of Carbon Nanotube Array/Polymer Composites, *Compos. Sci. Technol.*, **66**, 387-396, 2006.
- Hernández-Pérez A. and Avilés F., Modeling the Influence of Interphase on the Elastic Properties of Carbon Nanotube Composites, *Comp. Mater. Sci.*, **47**, 926-933, 2010.
- Liu Y.J. and Chen X.L., Evaluations of the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites Using a Nanoscale Representative Volume Element, *Mech. Mater.*, **35**, 69-81, 2003.
- Khalili S.M.R. and Haghbin A., The Effect of Nanotube Specifications on Multi-Scale Modeling of Nanocomposites, *Appl. Mech. Mater.*, **110**, 1237-1244, 2012.
- 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, *Mech. Res. Commun.*, **37**, 235-240, 2010.
- Xiao S. and Hou W., Studies of Size Effects on Carbon Nanotubes' Mechanical Properties by Using Different Potential Functions, *Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures*, **14**, 9-16, 2006.
- Dong M. and Schmauder S., Modeling of Metal Matrix Composites by a Self-Consistent Embedded Cell Model, *Acta Materialia*, **44**, 2465-2478, 1996.
- Huang J., Ulrich W., Schmauder S., and Geier S., Micro-Mechanical Modelling of Young's Modulus of Semi-Crystalline Polyamide 6 (PA 6) and Elastomer Particle-Modified-PA 6, *Comp. Mater. Sci.*, **50**, 1315-1319, 2011.
- Huang J., Schmauder S., Weber U., and Geier S., Micromechanical Modelling of the Elastoplastic Behaviour of Nanodispersed Elastomer Particle-Modified PA6, *Comp. Mater. Sci.*, **52**, 107-111, 2012.
- Selmi A., Friebel C., Doghri I., and Hassis H., Prediction of the Elastic Properties of Single Walled Carbon Nanotube Reinforced Polymers: A Comparative Study of Several Micromechanical Models, *Compos. Sci. Technol.*, **67**, 2071-2084, 2007.
- Hu H., Onyebueke L., and Abatan A., Characterizing and Modeling Mechanical Properties of Nanocomposites-Review and Evaluation, *J. Minerals Mater. Characterization Eng.*, **9**,

- 275-319, 2010.
22. Chen X. and Liu Y., Square Representative Volume Elements for Evaluating the Effective Material Properties of Carbon Nanotube-Based Composites, *Comp. Mater. Sci.*, **29**, 1-11, 2004.
23. Liu Y., Nishimura N., and Otani Y., Large-Scale Modeling of Carbon-Nanotube Composites by a Fast Multipole Boundary Element Method, *Comp. Mater. Sci.*, **34**, 173-187, 2005.
24. Zhang Y., Zhuang X., Muthu J., Mabrouki T., Fontaine M., Gong Y., and Rabczuk T., Load Transfer of Graphene/Carbon Nanotube/Polyethylene Hybrid Nanocomposites by Molecular Dynamics Simulation, *Compos., Part B: Eng.*, **63**, 27-33, 2014.
25. Mahallati P., Arefazar A., and Naderi G., Thermal and Morphological Properties of Thermoplastic Elastomer Nanocomposites Based on PA6/NBR, *Iran. J. Chem. Eng.*, **8**, 56-65, 2011.
26. Han J., Globus A., Jaffe R., and Deardorff G., Molecular Dynamics Simulations of Carbon Nanotube-Based Gears, *Nanotechnology*, **8**, 95, 1997.
27. Dunne F. and Petrinic N., *Introduction to Computational Plasticity*, New York, Oxford University, 2005.