



مطالعه رفتار پرکولیشن خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانوذرات با استفاده از مدل سازی میکرومکانیکی سه بعدی

رضا انصاری خلخالی^{1*}، محمدکازم حسنزاده اghdam²، علی مشکور²

1- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت
2- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت
* رشت، صندوق پستی 3756، r_ansari@guilan.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 17 اسفند 1393
پذیرش: 29 فروردین 1394
ارائه در سایت: 19 اردیبهشت 1394

کلید واژگان:

نانوذره

پرکولیشن

فاز میانی

میکرومکانیک

خواص مکانیکی نانوکامپوزیت

چکیده

بهبود چشمگیر خواص مکانیکی پلیمرهای تقویت شده با نانوذرات در درصدهای حجمی نسبتاً کم، سبب شده است که استفاده از نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری افزایش یابد. وجود ناحیه فاز میانی بین نانوذرات و زمینه پلیمری دلیل اصلی افزایش خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها است. در این تحقیق، با استفاده از یک مدل میکرومکانیکی بر مبنای سلول واحد، رفتار پرکولیشن خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانوذرات مورد بررسی قرار می‌گیرد. المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت از سه فاز شامل نانوذرات، زمینه پلیمری و فاز میانی تشکیل می‌شود. هندسه المان حجمی نانوکامپوزیت به $C \times r \times h$ نانوسلول در سه بعد تقسیم شده و حالت توزیع نانوذرات در زمینه بصورت اتفاقی است. اثرات ناحیه فاز میانی شامل ضخامت و مدول الاستیک و هندسه نانوذرات بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت تشریح می‌شود. نتایج مدل‌سازی نشان می‌دهد که با کاهش اندازه نانوذرات یا با افزایش نسبت منظر فاز تقویت، درصد حجمی بحرانی نانوکامپوزیت کاهش می‌یابد. نتایج پیش‌بینی شده با مدل میکرومکانیکی حاضر در تطابق خوبی با نتایج مدل‌های میکرومکانیکی دیگر می‌باشند. نتایج گزارش شده در این تحقیق می‌تواند برای مدل‌سازی و طراحی بهینه نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذرات با بالاترین صرفه اقتصادی مورد استفاده قرار بگیرد.

Study on the percolation behavior of the mechanical properties of nanoparticle reinforced polymer nanocomposites using three-dimensional micromechanical modeling

Reza Ansari Khalkhali*, Mohammad Kazem Hassanzadeh Aghdam, Ali Mashkor

Department of Mechanical Engineering, Guilan University, Rasht, Iran.
* P.O.B. 3756 Rasht, Iran, r_ansari@guilan.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 08 March 2015
Accepted 18 April 2015
Available Online 09 May 2015

Keywords:
Nanoparticle
Percolation
Interphase
Micromechanics
Nanocomposite Mechanical Property

ABSTRACT

Significant improvements in mechanical properties of polymers reinforced with nanoparticles at relatively low volume fractions have caused the use of polymer nanocomposites to increase. The main reason for the increase in mechanical properties of nanocomposites is the presence of an interphase region between the nanoparticles and polymer matrix. In this work using a unit cell-based micromechanical model, the percolation behavior of the mechanical properties of nanoparticle reinforced polymer nanocomposites is investigated. The Representative Volume Element (RVE) of nanocomposites consists of three phases including nanoparticles, polymer matrix and interphase. The RVE is extended to $C \times r \times h$ nano-cells in three dimensions and the state of dispersion of nanoparticles into matrix is random. Effects of interphase region including its thickness and elastic modulus and nanoparticle geometry on the percolation behavior of the nanocomposite are studied. Results show that with decreasing the nanoparticle size or increasing aspect ratio of nanoparticle, critical volume fractions decrease. The predicted results of the present micromechanical model are in good agreement when compared with results of the other micromechanical model. The results reported herein could be useful to guide the modeling and optimal design of nanocomposite reinforced by nanoparticles with the highest economic interest.

1- مقدمه

طراحی مواد با بالاترین خواص، اغلب جدید و چند منظوره¹ باشد، مورد توجه بسیاری از محققان و مهندسان قرار گرفته است [1-4]. افزودن درصد حجمی نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری به دلیل اینکه بستری را فراهم می‌سازند که

1- Multi-Functional

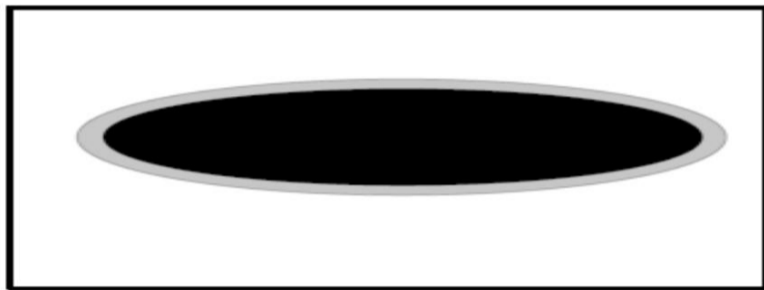
Please cite this article using:

R. Ansari Khalkhali, M. K. Hassanzadeh Aghdam, A. Mashkor, Study on the percolation behavior of the mechanical properties of nanoparticle reinforced polymer nanocomposites using three-dimensional micromechanical modeling, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 6, pp. 376-382, 2015 (In Persian)

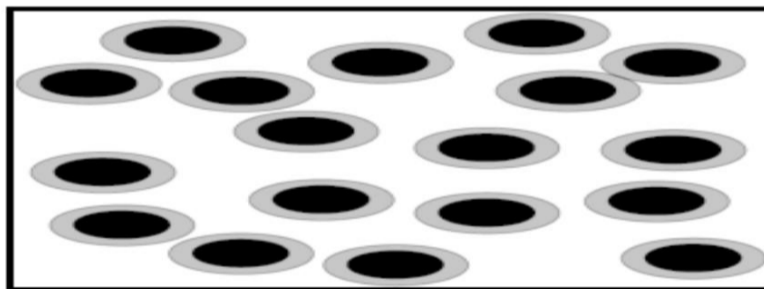
برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

کلی شامل دو قسمت می‌باشد. اگر درصد حجمی فاز تقویت کمتر از درصد حجمی بحرانی باشد، کامپوزیت هادی نبوده ولی چنانچه درصد حجمی فاز تقویت بیشتر از درصد حجمی بحرانی باشد، هدایت الکتریکی کامپوزیت بشدت افزایش می‌یابد. برای استخراج درصد حجمی بحرانی، از شبیه‌سازی ریزساختار کامپوزیت‌ها استفاده می‌شود [21].

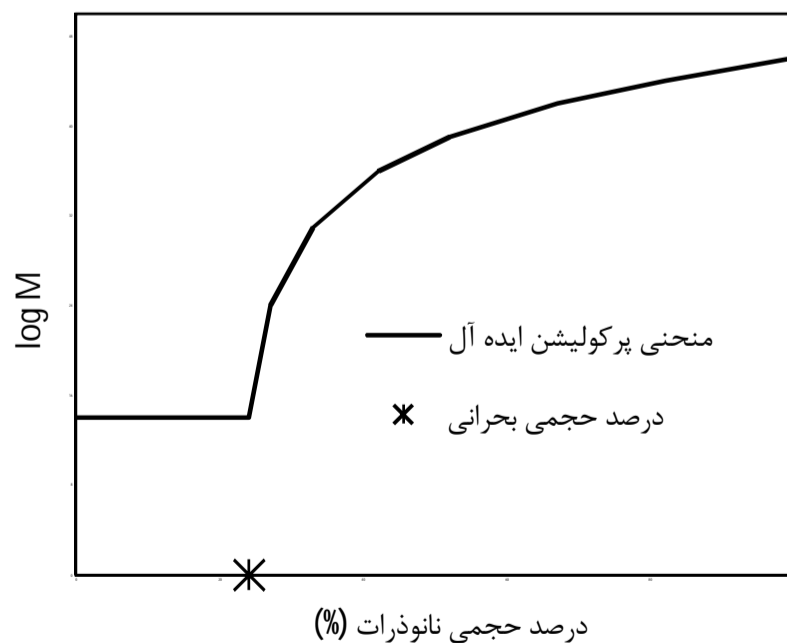
از مدل‌های میکرومکانیکی تحلیلی مانند مدل‌های سلول واحد⁸ [6,12,21]، مدل موری-تاناکا⁹ [18,24]، مدل خودسازگار¹⁰ [25] و مدل‌های میکرومکانیکی المان محدود [16,17,26] جهت استخراج خواص مؤثر نانوکامپوزیت‌ها استفاده می‌شود. تحقیقات قبلی کارایی و مفید بودن مدل‌های میکرومکانیکی را در استخراج رفتار نانوکامپوزیت‌ها نشان داده است. توزیع نانوذرات در زمینه پلیمری که نقش مهمی بر پاسخ نانوکامپوزیت‌ها دارد، بصورت اتفاقی می‌باشد [27]. مطالعات قبلی نشان داده است که تجمع نانوذرات¹¹ موجب کاهش سفتی نانوکامپوزیت می‌شود. این در حالی است که توزیع یکنواخت نانوذرات در زمینه پلیمری خواص مکانیکی نانوکامپوزیت را به مقدار زیادی افزایش می‌دهد [3,28]. از طرفی در برخی از مدل‌سازی‌ها حالت توزیع نانوذرات را بصورت منظم در نظر می‌گیرند که دور



شکل 1 توزیع میکروذرات احاطه شده با فاز میانی در زمینه



شکل 2 توزیع نانوذرات احاطه شده با فاز میانی در زمینه



شکل 3 منحنی پرکولیشن ایده‌آل و درصد حجمی بحرانی [22]

کمی از نانوذرات¹ به پلیمر موجب می‌شود که خواص مکانیکی، مغناطیسی، حرارتی و الکتریکی پلیمرها بطور قابل توجهی افزایش یابد [5,6]. از طرفی با توجه به درصد حجمی کم نانوذرات در زمینه پلیمری، نانوکامپوزیت تولید شده دارای وزن پایین‌تری در مقایسه با کامپوزیت‌هایی که فاز تقویت آن در مقیاس میکرو بوده، است [7]. از جمله کاربردهای اصلی نانوکامپوزیت‌ها می‌توان به صنایع هوافضا، نظامی، وسایل ورزشی، بسته‌بندی، پوشش‌دهی و تولید قطعات اتومبیل اشاره کرد [8].

مطالعات قبلی نشان داده است که دو عامل ناحیه فاز میانی² که احاطه کننده نانوذرات [9-11] بوده و تراکم زیاد نانوذرات بر واحد حجم [12]، تأثیر بسیار مهمی بر خواص مؤثر نانوکامپوزیت‌ها دارند. ناحیه فاز میانی دارای خواص مکانیکی مشخص، به‌ویژه سفتی، در محدوده خواص بین زمینه پلیمری و نانوذرات است. اندازه فاز میانی تأثیر بسیار کمی بر خواص مؤثر کامپوزیت‌هایی که فاز تقویت آن در مقیاس میکرو هستند، دارد. اما زمانی که فاز تقویت در مقیاس نانو قرار می‌گیرد، اثرات فاز میانی که ناشی از واکنش شیمیایی بین نانوذرات و زمینه پلیمری است، بسیار مهم می‌باشد. در یک درصد حجمی معین، تراکم تعداد نانوذرات با توجه به ابعاد کوچکتر آن در قیاس با میکرو ذرات به مراتب بیشتر است. از طرفی نسبت سطح تماس بین نانوذرات و زمینه به حجم فاز تقویت در مقیاس نانو بالاست. این عوامل موجب می‌شود که فاز میانی در نانوکامپوزیت‌ها یکی از فاکتورهای کلیدی و مهم در تعیین خواص مؤثر این مواد باشد. در شکل‌های 1 و 2 به ترتیب فاز تقویت در مقیاس میکرو و نانو که توسط فاز میانی احاطه شده و دارای درصد حجمی یکسان بوده، نشان داده می‌شود. با توجه به اهمیت فاز میانی در مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌ها مطالعات متعددی با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی³ [13-15] و روش‌های میکرومکانیکی⁴ شامل المان محدود و تحلیلی [16-18] در این زمینه انجام شده است.

نتایج آزمایشگاهی نشان داده است که با افزایش درصد حجمی نانوذرات، در یک درصد حجمی بحرانی⁵ خواص مکانیکی نانوکامپوزیت بطور قابل توجهی افزایش می‌یابد [19-21]. به این درصد حجمی بحرانی، آستانه پرکولیشن⁶ می‌گویند. در واقع رفتار پرکولیشن بدین مفهوم است که یک درصد حجمی بحرانی برای نانوذرات وجود دارد که بعد از آن خواص مؤثر نانوکامپوزیت بطور قابل توجهی افزایش می‌یابد. در مهندسی از تئوری پرکولیشن بطور گسترده برای مدل‌سازی هدایت الکتریکی⁷ کامپوزیت‌ها استفاده می‌شود.

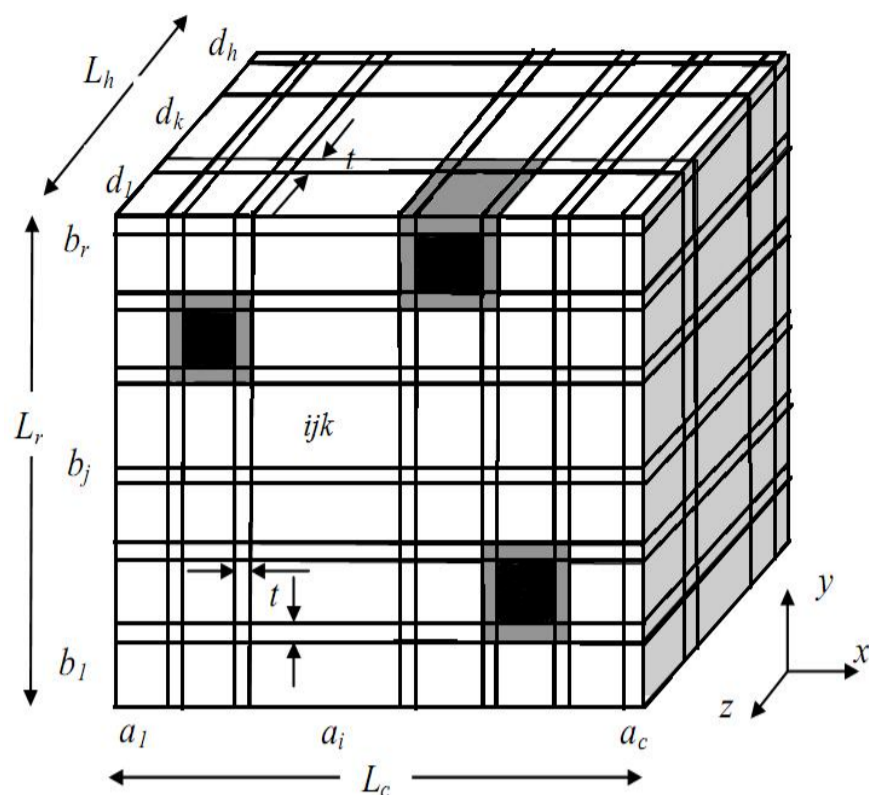
هدایت الکتریکی کامپوزیت‌ها معمولاً بصورت رابطه (1) مدل می‌شود [23,22].

$$\sigma = \sigma_0 \left(\frac{\varphi - \varphi_0}{1 - \varphi_0} \right)^b, \quad \varphi > \varphi_0 \quad (1)$$

که در این رابطه σ هدایت الکتریکی کامپوزیت، φ و φ_0 به ترتیب درصد حجمی و درصد حجمی بحرانی فاز تقویت، σ_0 هدایت الکتریکی فاز تقویت و b توان هدایت است. نکته اساسی در این رابطه دانستن آستانه پرکولیشن یا درصد حجمی بحرانی (φ_0) می‌باشد. شکل 3 منحنی پرکولیشن ایده‌آل را نشان می‌دهد [22]. در شکل 3، M خاصیت مؤثر کامپوزیت است که در برابر درصد حجمی فاز تقویت رسم شده است. هدایت الکتریکی کامپوزیت‌ها بطور

- 1- Nanoparticles
- 2- Interphase
- 3- Molecular Dynamics Simulation
- 4- Micromechanical Modeling
- 5- Critical Volume Fraction
- 6- Percolation Threshold
- 7- Electrical Conductivity

8- Unit Cell
9- Mori-Tanaka
10- Self-Consistent Method
11- Agglomeration of Nanoparticles



شکل 4 المان حجمی نماینده با توزیع اتفاقی نانوذرات

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^h \sum_{j=1}^r d_k b_j \sigma_x^{1jk} &= S_x L_r L_h \\ \sum_{k=1}^h \sum_{i=1}^c d_k a_i \sigma_y^{i1k} &= S_y L_c L_h \\ \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^c b_j a_i \sigma_z^{ij1} &= S_z L_r L_c \end{aligned} \quad (2)$$

از تعادل تنش‌های نرمال در سطوح مشترک هر دو سلول مجاور می‌توان رابطه (3) را نوشت:

$$\begin{aligned} \sigma_x^{1jk} &= \sigma_x^{ijk} \quad (i > 1) \\ \sigma_y^{i1k} &= \sigma_y^{ijk} \quad (j > 1) \\ \sigma_z^{ij1} &= \sigma_z^{ijk} \quad (k > 1) \end{aligned} \quad (3)$$

فرض اتصال کامل بین اجزای سازنده المان حجمی نانوکامپوزیت، نانوذرات، فاز میانی و زمینه پلیمری، در نظر گرفته می‌شود. بنابراین تغییر مکان المان نماینده در یک جهت برابر مجموع تغییر مکان سلول‌های یک ردیف در همان جهت است، پس می‌توان رابطه (4) را نوشت:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^c a_i \varepsilon_x^{i11} &= \sum_{i=1}^c a_i \varepsilon_x^{ijk} = L_c \bar{\varepsilon}_x \quad (j \times k \neq 1) \\ \sum_{j=1}^r b_j \varepsilon_y^{1j1} &= \sum_{j=1}^r b_j \varepsilon_y^{ijk} = L_r \bar{\varepsilon}_y \quad (i \times k \neq 1) \\ \sum_{k=1}^h d_k \varepsilon_z^{11k} &= \sum_{k=1}^h d_k \varepsilon_z^{ijk} = L_h \bar{\varepsilon}_z \quad (i \times j \neq 1) \end{aligned} \quad (4)$$

که کرنش میکرو در سلول ijk و $\bar{\varepsilon}_i$ کرنش ماکرو را نشان می‌دهد. معادله ساختاری الاستیسیته سه بعدی برای سلول ijk به صورت رابطه (5) نوشته می‌شود:

$$\varepsilon^{ijk} = S^{ijk} \sigma^{ijk} \quad (5)$$

که S^{ijk} ماتریس نرمی الاستیک است. با جایگزینی معادله (5) در معادله (4) و با استفاده از معادلات (2) و (3)، یک سیستم دستگاه معادلات خطی با $rc + rh + hc$ معادله با همین تعداد مجهول بدست می‌آید.

$$[A]_{m \times m} \{\sigma\}_{m \times 1} = \{F\}_{m \times 1} \quad (m = ch + rh + rc) \quad (6)$$

که $[A]$ ماتریس ضرایب، $\{\sigma\}$ و $\{F\}$ نیز به ترتیب بردار تنش و نیرو

از واقعیت می‌باشد. مطالعات قبلی نشان داده است که توزیع اتفاقی نانوذرات در زمینه پلیمری به نتایج تجربی نزدیکتر است [6]. با توجه به تحقیقات انجام شده در حوزه نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری، تاکنون مطالعه‌ای درخصوص اثرات هندسه نانوذرات و اثرات فاز میانی بر رفتار پرکولیشن نانوذرات انجام نشده است.

در این پژوهش، به منظور بررسی رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری از مدل میکرومکانیکی سلول واحد ساده شده¹ استفاده می‌شود [6,29,30]. برای این مدل تحلیلی میکرومکانیکی که بر پایه روش سلول واحد بنا شده است، به منظور توزیع اتفاقی نانوذرات در زمینه یک المان حجمی نماینده² نانوکامپوزیت با $c \times r \times h$ نانوسلول در نظر گرفته می‌شود. این المان حجمی نماینده از سه فاز نانوذرات، زمینه پلیمری و فاز میانی بین نانوذرات/زمینه پلیمری، تشکیل شده است. خواص فاز میانی متمایز از زمینه پلیمری و نانوذرات بوده که با یک ضخامت مشخص سطح خارجی نانوذرات را پوشش می‌دهد. رفتار هر سه فاز بصورت همگن و ایزوتروپ مدل می‌شود. از طرفی شرایط اتصال کامل بین آنها منظور می‌شود. اثرات هندسه نانوذرات شامل نسبت منظر و اندازه‌ی نانوذرات بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار می‌گیرد. همچنین اثرات فاز میانی شامل ضخامت و خواص مکانیکی آن بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت مورد مطالعه قرار می‌گیرد. نتایج گزارش شده در این تحقیق می‌تواند برای طراحی بهینه و ساخت قطعاتی که از نانوکامپوزیت‌های پلیمری بهره می‌گیرند، استفاده شود.

2- مدل میکرومکانیکی

برای استخراج خواص الاستیک نانوکامپوزیت، از مدل میکرومکانیکی سه‌بعدی سلول واحد ساده شده استفاده می‌شود [6,29,30]. همان‌طور که شکل 4 نشان می‌دهد المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت که در این مدل میکرومکانیکی در نظر گرفته می‌شود، از یک سلول واحد چهارگوش³ که شامل مجموعه‌ای از زیرسلول⁴ می‌باشد، تشکیل شده است. این سلول واحد شامل $c \times r \times h$ نانوسلول می‌باشد. هر یک از این زیرسلول‌ها نماینده یک فاز تشکیل دهنده نانوکامپوزیت است. این المان حجمی شامل سه فاز نانوذرات، زمینه پلیمری و فاز میانی احاطه‌کننده نانوذرات است. رفتار هر سه فاز بصورت الاستیک خطی در نظر گرفته می‌شود. انتخاب تعداد دلخواه زیرسلول به منظور توزیع اتفاقی نانوذرات در زمینه پلیمری یکی از مزایای بسیار مهم این مدل میکرومکانیکی است.

المان حجمی نماینده دارای طول ضلع L_h در جهت محور z ، طول ضلع L_c در جهت محور x و طول ضلع L_r در جهت محور y است. اگر i متغیر شمارنده در جهت x ، j در جهت y و k در جهت z باشد، هر سلول با نام ijk شناخته می‌شود و طول هر یک از سلول‌ها در جهت x با a_i ، در جهت y با b_j و در جهت z با d_k مشخص می‌شود.

فرض می‌شود که تغییرات مؤلفه‌های جابجایی داخلی هر سلول المان حجمی نماینده بصورت خطی باشند [6]. همچنین فرض می‌شود که تنش‌های نرمال وارده بر المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت هیچگونه تنش برشی داخلی آن ایجاد نمی‌کند و بالعکس. از معادله تعادل تنش‌های میکرو (σ_i^{ijk}) در سلول‌ها و تنش‌های ماکرو (S_i) اعمالی در مرز المان نماینده رابطه (2) بدست می‌آید:

1- Simplified Unit Cell Model
2- Representative Volume Element
3- Rectangular Repeating Unit Cell
4- Sub-Cell

می‌باشند.

همان‌طور که گفته شد معادله (6) یک سیستم دستگاه معادلات خطی را بدست می‌دهد. با تشکیل ماتریس ضرایب که ناشی از هندسه و خواص مواد المان حجمی می‌باشد و اعمال تنش ماکرو که بردار نیرو را بدست می‌دهد، می‌توان تنش‌های میکرو را در هر زیرسلول با تقسیم بردار نیرو بر ماتریس ضرایب در نرم‌افزار متلب محاسبه کرد. با استفاده از معادله ساختاری الاستیسیته سه بعدی برای هر زیرسلول می‌توان کرنش‌های میکرو را بدست آورد. با استفاده از معادله (4) می‌توان کرنش ماکرو را محاسبه نمود. با تقسیم تنش ماکرو بر کرنش ماکرو می‌توان مدول الاستیک نانوکامپوزیت را بدست آورد. تمامی محاسبات جبری فوق در نرم‌افزار متلب انجام شده است.

3- نوع نانوکامپوزیت

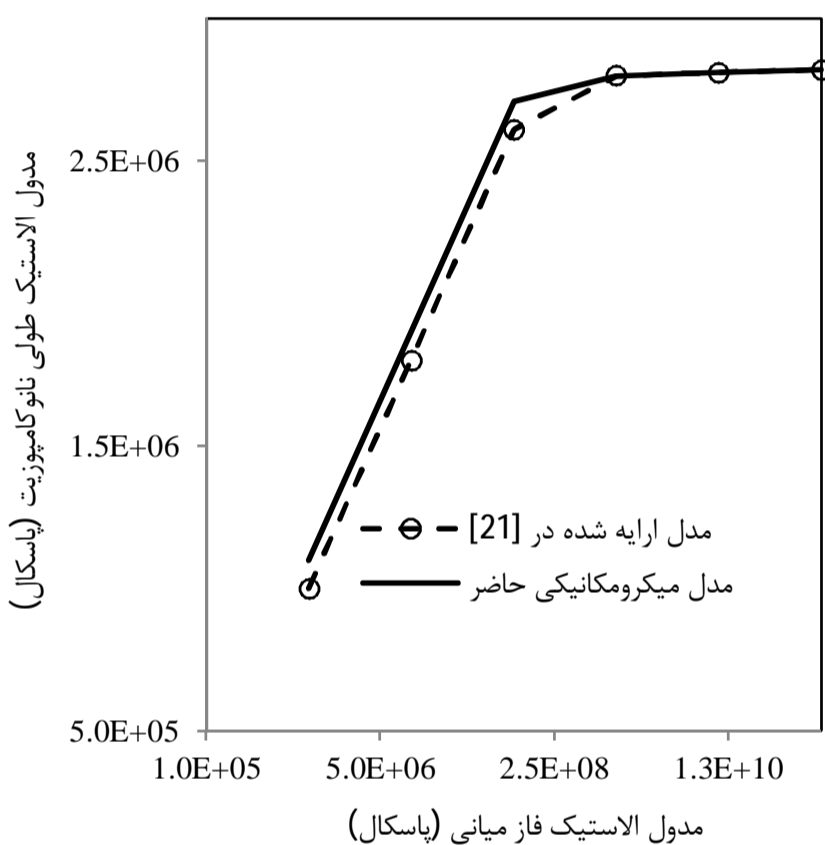
سیستم نانوکامپوزیت در نظر گرفته شده در این پژوهش شامل نانوذرات طلا به عنوان فاز تقویت در زمینه پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسین¹ می‌باشد. قطر نانوذرات 30 نانومتر در نظر گرفته می‌شود. خواص مکانیکی این دو ماده در جدول 1 آمده است [12,21]. نسبت پواسون فاز میانی نیز برابر نسبت پواسون زمینه در نظر گرفته می‌شود. ضخامت فاز میانی نیز برابر 15 نانومتر، نصف قطر نانوذرات، منظور می‌شود. طول نانوذرات طلا 450 نانومتر در نظر گرفته شده است. نسبت منظر² نانوذرات که بصورت تقسیم طول بر قطر تعریف می‌شود، در این مطالعه برابر 15 منظور شده است. درصد حجمی نانوذرات 5% منظور می‌شود.

4- نتایج و بحث

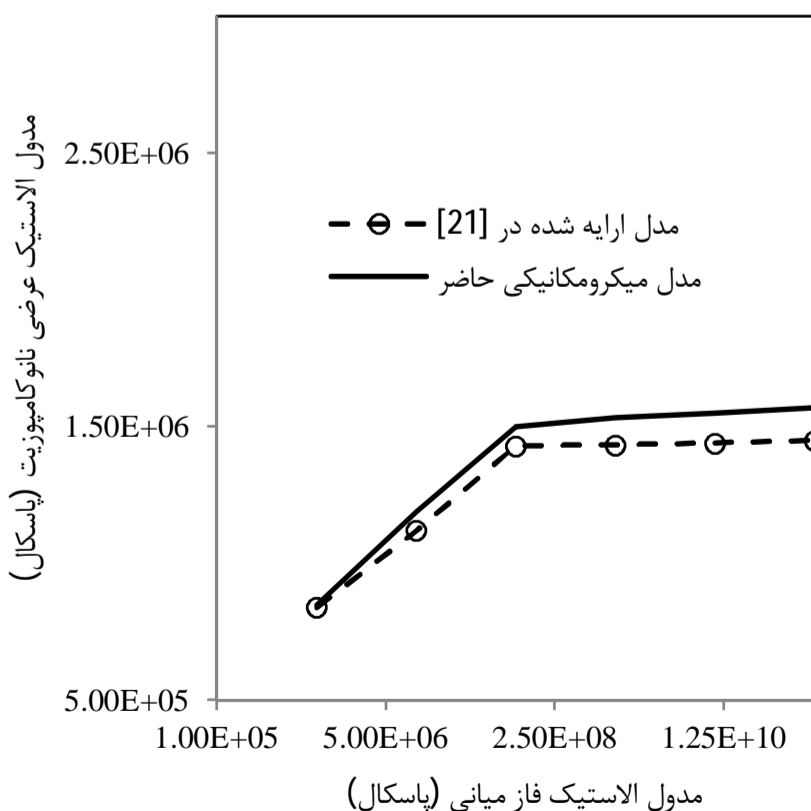
با استفاده از مدل میکرومکانیکی تحلیلی ارائه شده در بخش 2، خواص مؤثر الاستیک نانوکامپوزیت بررسی می‌شود. به منظور توزیع اتفاقی نانوذرات طلا در زمینه پلیمری المان حجمی نماینده به $40 \times 40 \times 40$ زیرسلول گسترش می‌یابد. فرایند توزیع تصادفی زیرسلول‌ها در المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت با توزیع یکنواخت پیوسته در کد متلب مورد توجه قرار گرفته است. بدین صورت که تعداد نانوذرات با توجه به تعداد زیرسلول‌های المان نماینده، ابعاد و درصد حجمی آن تعیین می‌شود. سپس اعدادی بدون تکرار با توزیع یکنواخت که نشان دهنده زیرسلول نانوذره می‌باشد، در کد متلب انتخاب می‌شوند.

اثرات مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت در جهت طولی و عرضی به ترتیب در شکل‌های 5 و 6 نشان داده شده است. نتایج پیش‌بینی شده با مدل حاضر با نتایج مدل میکرومکانیکی ارائه شده در [21] مقایسه شده است. همان‌طور که شکل‌های 5 و 6 نشان می‌دهند نتایج پیش‌بینی شده با مدل حاضر بسیار نزدیک به نتایج مدل میکرومکانیکی ارائه شده در [21] است. مدل سلول واحد ساده شده ارائه شده در این مطالعه و روش ارائه شده در [21] (روش سلولی³)، مدلهایی بر اساس روش سلول واحد هستند. معادلات میکرومکانیکی [21] ریاضیات پیچیده‌تری نسبت به مدل ارائه شده در این تحقیق دارد [31,32]. روش سلولی توسط ابودی با استفاده از تئوری پیوستگی مرتبه بالا⁴ برای استخراج پاسخ الاستیک-ویسکوپلاستیک کامپوزیت‌های الیاف بلند در [32] ارائه شد. همچنین این مدل توسط ابودی با استفاده از تئوری پیوستگی مرتبه اول برای استخراج

خواص الاستیک کامپوزیت‌های تقویت شده با الیاف کوتاه و میکرو ذرات بکار گرفته شده است [31]. جزئیات بیشتر در خصوص این مدل را می‌توان در مراجع [31-34] یافت. اما مطالعات قبلی در خصوص کامپوزیت‌های تقویت شده الیافی در مقیاس میکرو نشان داده است که با وجود سادگی مدل میکرومکانیکی حاضر نتایج این دو مدل بسیار بهم نزدیک می‌باشند [35]. برخی از تحقیقات دیگر در مقیاس نانو و میکرو نیز نشان داده است که نتایج پیش‌بینی شده با مدل حاضر بسیار نزدیک و گاهی منطبق به داده‌های آزمایشگاهی [36,6] می‌باشد. بنابراین از جمله مزیت‌های این مدل می‌توان از یک جهت به سادگی و درک آسان روابط آن اشاره کرد و از طرف دیگر به پیش‌بینی‌های بسیار دقیق این مدل توجه داشت. با توجه به شکل‌های 5 و 6 برای مدول الاستیک فاز میانی یک مقدار آستانه‌ای وجود دارد که با افزایش بیشتر مدول الاستیک آن، مدول الاستیک نانوکامپوزیت تغییر چندانی نمی‌کند.



شکل 5 تأثیر مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک طولی نانوکامپوزیت



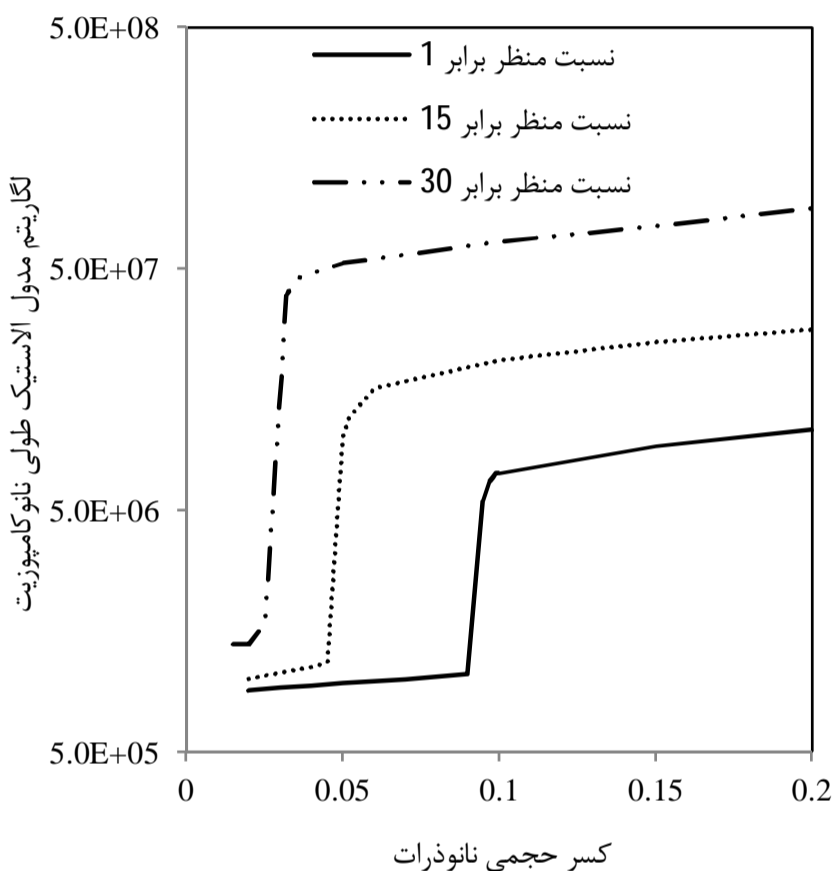
شکل 6 تأثیر مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک عرضی نانوکامپوزیت

1- Polydimethylsiloxane
2- Aspect Ratio
3- Method of Cell
4- High Order Continuum Theory

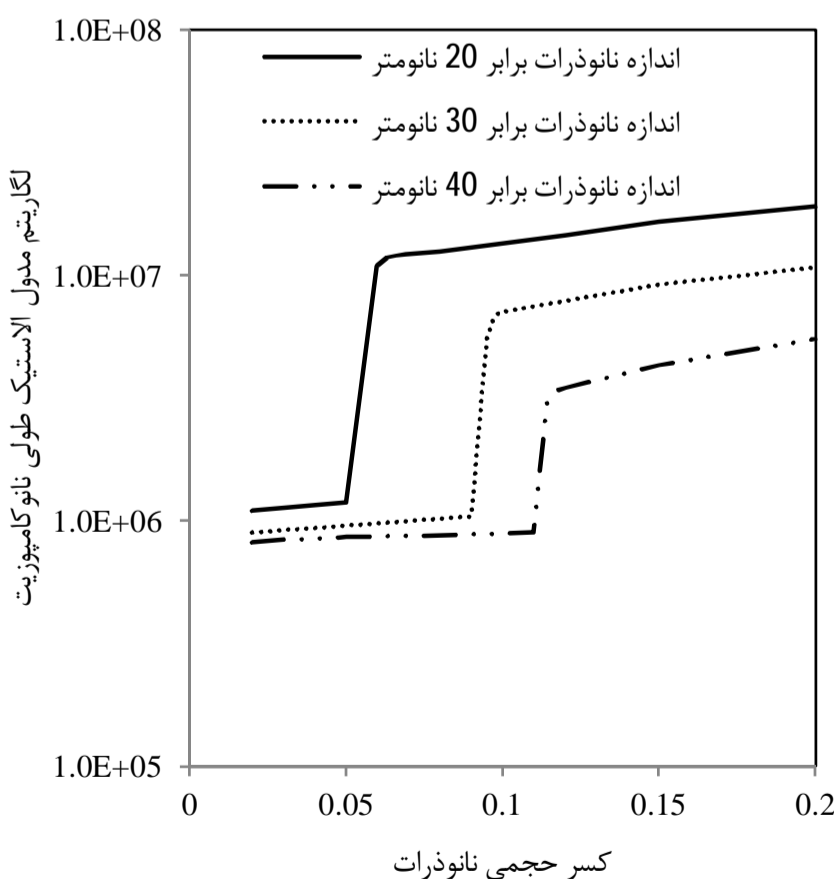
شده است.

در شکل 10 اثرات مدول الاستیک فاز میانی بر رفتار پرکولیشن سیستم نانوکامپوزیت مورد نظر بررسی شده است. بدین منظور برای مدول الاستیک فاز میانی مقادیر 0/001، 0/1، 10 و 100 گیگاپاسکال در نظر گرفته می‌شود. در این بررسی قطر و نسبت منظر نانوذرات به ترتیب 30 نانومتر و 15 در نظر گرفته می‌شود. با توجه به شکل 10 افزایش بیش از حد مدول الاستیک فاز میانی تأثیر چندانی بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت ندارد. به عبارت دیگر برای مدول الاستیک فاز میانی یک مقدار آستانه‌ای وجود دارد.

در شکل 11 اثرات ضخامت فاز میانی بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت زمینه پلیمری مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور برای ضخامت فاز میانی مقادیر 10، 15 و 20 نانومتر در نظر گرفته می‌شود. نسبت منظر



شکل 8 تأثیر نسبت منظر نانوذرات بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت



شکل 9 تأثیر اندازه نانوذرات بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت. نسبت منظر نانوذرات برابر یک در نظر گرفته شده است.

جدول 1 خواص اجزای نانوکامپوزیت [12,21]

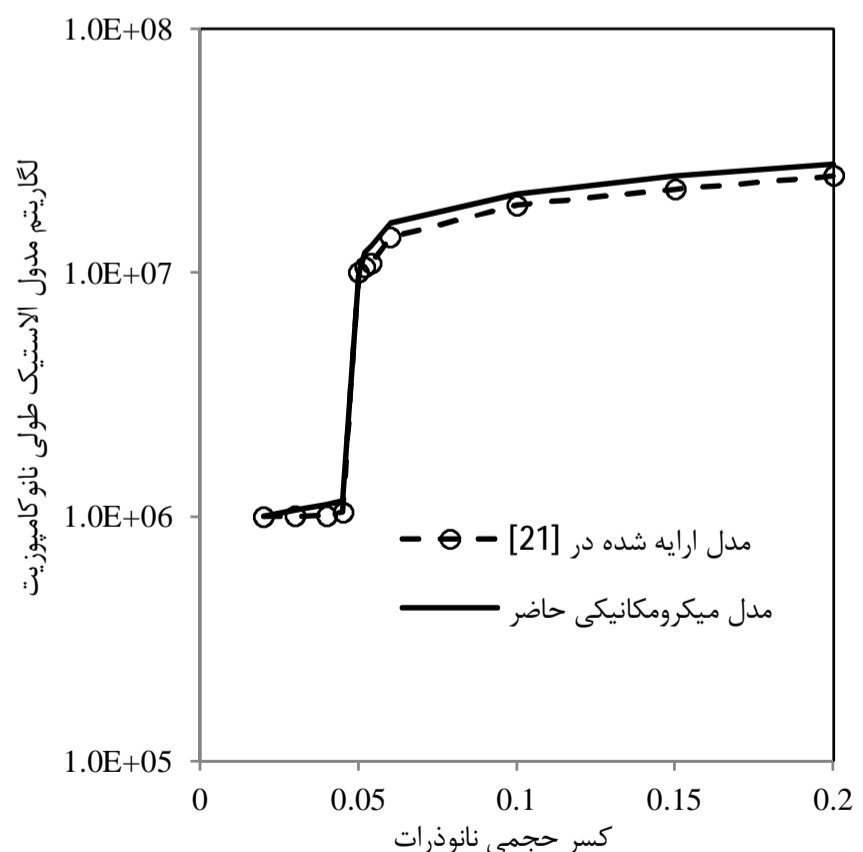
ماده	فاز تقویت	زمینه پلیمری
مدول یانگ (پاسکال)	78×10^9	750×10^3
نسبت پواسون	0/44	0/45

در شکل 7 رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت مشاهده می‌شود. با توجه به شکل 7 درصد حجمی بحرانی برای نانوکامپوزیت مورد بررسی با نسبت منظر 15 برابر 5% می‌باشد. از طرفی دیگر تطابق بسیار خوبی بین نتایج پیش‌بینی شده با مدل حاضر و مدل میکرومکانیکی ارایه شده در [21] مشاهده می‌شود. مدول الاستیک فاز میانی 0/25 گیگاپاسکال با توجه به شکل 5 منظور شده است. با توجه به شکل 7 اضافه کردن درصد حجمی بیشتری از نانوذرات تأثیر بسیار کمی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت دارد.

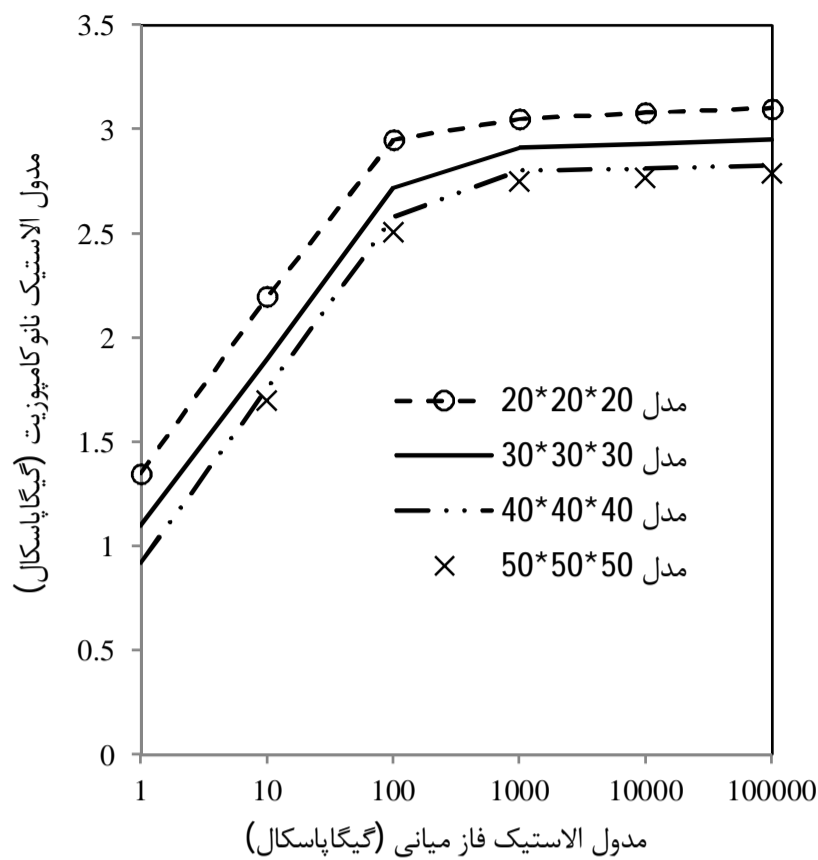
در شکل 8 اثرات نسبت منظر نانوذره بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت مشاهده می‌شود. مدول الاستیک فاز میانی 0/25 گیگاپاسکال در نظر گرفته شده است.

با توجه به شکل 8 با کاهش نسبت منظر درصد حجمی بحرانی برای نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد. برای نانوکامپوزیت تقویت شده با نانوذراتی که نسبت منظر آن یک است، آستانه پرکولیشن بیشترین مقدار را به خود اختصاص می‌دهد. با توجه به شکل 8 درصد حجمی بحرانی برای نانوکامپوزیت با نسبت منظر 1، 15 و 30 به ترتیب تقریباً برابر 5، 9 و 3/5% است.

در شکل 9 اثرات اندازه نانوذرات بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت بررسی شده است. نسبت منظر نانوذرات برابر 1 در نظر گرفته می‌شود. با توجه به شکل 9 با کاهش اندازه نانوذرات، درصد حجمی بحرانی نانوکامپوزیت کاهش می‌یابد. با توجه به شکل 9 درصد حجمی بحرانی برای نانوکامپوزیت با اندازه 20، 30 و 40 به ترتیب تقریباً برابر 6، 9 و 10% است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش بیشتر درصد حجمی نانوذرات، تغییرات در مدول الاستیک بسیار کم می‌باشد. بایستی توجه داشت که در این تحلیل برای اینکه نسبت منظر نانوذرات برابر یک باشد، اعداد قطر و طول نانوذرات برابر در نظر گرفته



شکل 7 لگاریتم مدول الاستیک طولی نانوکامپوزیت در برابر درصد حجمی نانوذرات با نسبت منظر 15

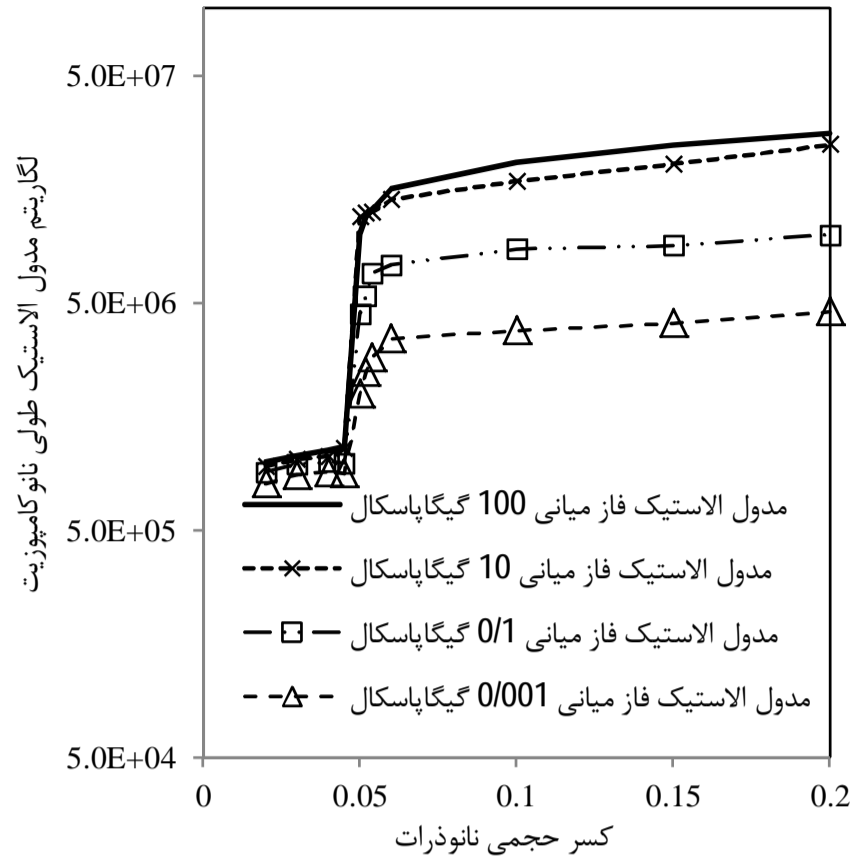


شکل 12 اثر تعداد زیرسلول‌های المان حجمی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت

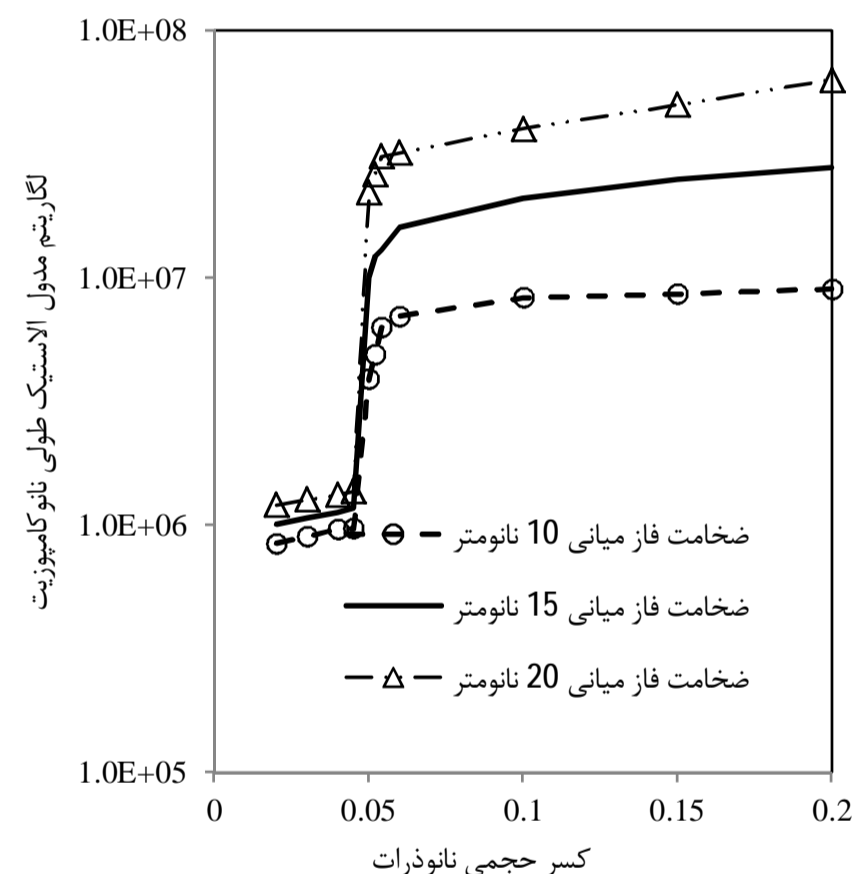
شد. برای مدل‌سازی و استخراج خواص مؤثر نانوکامپوزیت، یک المان حجمی نماینده از نانوکامپوزیت در نظر گرفته شد. این المان حجمی از سه فاز نانوذرات، زمینه پلیمری و فاز میانی بین نانوذرات و زمینه تشکیل شد. شرایط اتصال کامل بین هر سه فاز تشکیل دهنده المان حجمی منظور شد. رفتار هر سه فاز بصورت الاستیک خطی در نظر گرفته شد. نتایج مدل‌سازی میکرومکانیکی نشان داد که برای نانوکامپوزیت مورد نظر یک درصد حجمی بحرانی وجود دارد که خواص مؤثر مکانیکی آن بطور قابل توجهی افزایش می‌یابد. همچنین نتایج نشان داد که با افزایش نسبت منظر نانوذرات مقدار این درصد حجمی بحرانی کاهش می‌یابد. از طرفی دیگر با افزایش قطر نانوذرات، با ثابت ماندن نسبت منظر، مقدار درصد حجمی بحرانی نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد. اثرات ضخامت و مدول الاستیک فاز میانی نیز بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت زمینه پلیمری مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس نتایج پیش‌بینی شده با مدل میکرومکانیکی حاضر، یک مقدار آستانه‌ای برای مدول الاستیک فاز میانی وجود دارد که افزایش بیش از حد آن تأثیر چندانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت ندارد. اما برای ضخامت فاز میانی چنین مقدار آستانه‌ای وجود ندارد. نتایج مدل‌سازی میکرومکانیکی حاضر در تطابق بسیار خوبی با نتایج دیگر مدل‌های میکرومکانیکی شد.

6- مراجع

- [1] M. Mondali, M. R. Yousefi, Prediction a range for elastic modulus of CNT reinforced polymer composites using analytical method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 7, pp. 52-60, 2014. (In Persian)
- [2] H. Liu, L. C. Brinson, Reinforcing efficiency of nanoparticles: a simple comparison for polymer nanocomposites, *Composites Science and Technology*, Vol. 68, pp. 1502-1512, 2007.
- [3] F. Ashenai Ghasem, I. Ghasemi, S. Daneshpayeh, Mechanical and thermal properties of nanocomposites based on polypropylene/linear low density polyethylene/Titanium dioxide, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 3, pp. 103-109, 2014. (In Persian)
- [4] E. Kontou, G. Anthoulis, The effect of silica nanoparticles on the thermomechanical properties of polystyrene, *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 105, pp. 1723-1731, 2007.
- [5] C. Y. Wei, D. Shrivastava, K. Choi, Thermal expansion and diffusion coefficients of carbon nanotube-polymer composites, *Nano Letters*, Vol. 2, No. 6, pp. 647-650, 2002.



شکل 10 تأثیر مدول الاستیک فاز میانی بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت



شکل 11 تأثیر ضخامت فاز میانی بر رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت

نانوذرات نیز 15 می‌باشد. همان‌طور که شکل 11 نشان می‌دهد با افزایش بیشتر ضخامت فاز میانی، تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت در درصد حجمی بحرانی بیشتر خواهد شد.

اثر تعداد زیرسلول المان حجمی نماینده در شکل 12 نشان داده شده است. همان‌طور که شکل 12 نشان می‌دهد نتایج پیش‌بینی شده با تعداد زیرسلول 40*40*40 و 50*50*50 بسیار نزدیک می‌باشد که نشان دهنده همگرایی نتایج است.

5- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، مدل میکرومکانیکی سلول واحد ساده شده به منظور مطالعه رفتار پرکولیشن نانوکامپوزیت زمینه پلیمری تقویت شده با نانوذرات طلا ارایه

- [21] S. C. Baxter, C. T. Robinson, Pseudo-percolation: Critical volume fractions and mechanical percolation in polymer nanocomposites, *Composites Science and Technology*, Vol. 71, pp. 1273–1279, 2011.
- [22] J. Li, J-K. Kim, Percolation threshold of conducting polymer composites containing 3D randomly distributed graphite nanoplatelets *Composites Science and Technology*, Vol. 67, pp. 2114–2120, 2007.
- [23] V. Favier, H. Chanzy, J-Y. Cavaille, Polymer nanocomposites reinforced by cellulose whiskers, *Macromolecules*, Vol. 28, No. 18, pp. 6365–6367, 1995.
- [24] K. Li, X. L. Gao, A. K. Roy, Micromechanical modeling of viscoelastic properties of carbon nanotube-reinforced polymer composites, *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, Vol. 13, pp. 317–328, 2006.
- [25] K. Anoukou, F. Zairi, M. Nait-Abdelaziz, A. Zaoui, T. Messenger, J. M. Gloaguen, On the overall elastic moduli of polymer–clay nanocomposite materials using a self-consistent approach. Part I: Theory, *Composites Science and Technology*, Vol. 71, pp. 197–205, 2011.
- [26] B. Mortazavi, J. Bardon, S. Ahzi, Interphase effect on the elastic and thermal conductivity response of polymer nanocomposite materials: 3D finite element study, *Computational Materials Science*, Vol. 69, pp. 100–106, 2013.
- [27] S. Herasati, L. C. Zhang, H. H. Ruan, A new method for characterizing the interphase regions of carbon nanotube composites, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 51, pp. 1781–1791, 2014.
- [28] F. Ashenai Ghasemi, M. Eslami Farsani, Effect of nano-CaCO₃ on dynamic mechanical properties of Polypropylene, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 6, pp. 1-10, 2013. (In Persian)
- [29] M. K. Hassanzadeh Aghdam, M. J. Mahmoodi, Micromechanical damage analysis of short fiber titanium matrix composites under combined axial loading, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 4, pp. 86-97, 2013. (In Persian)
- [30] M. J. Mahmoodi, M. K. Hassanzadeh Aghdam, R. Ansari, Effects of interphase damage on the elastoviscoplastic behavior of general unidirectional metal matrix composites, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 3, pp. 95-105, 2015. (In Persian).
- [31] J. Aboudi, The Effective Moduli of Short-fiber Composites, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 19, pp. 693-707, 1983.
- [32] J. Aboudi, A continuum theory for fiber-reinforced elastic-viscoplastic composites, *International Journal of Engineering Science*, Vol. 20, No. 5, pp. 605–621, 1982.
- [33] J. Aboudi, M. J. Pindera, S. M. Arnold, Higher-order theory for functionally graded materials, *Composites Part B*, Vol. 30, pp. 777–832, 1999.
- [34] M. Ryvkin, J. Aboudi, A continuum approach to the analysis of the stress field in a fiber reinforced composite with a transverse crack, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, pp. 6826–6841, 2007.
- [35] M. M. Aghdam, A. Dezhsetan, Micromechanics based analysis of randomly distributed fiber reinforced composites using simplified unit cell model, *Composite Structures*, Vol. 71, pp. 327–332, 2005.
- [36] M. J. Mahmoodi, M. M. Aghdam, Damage Analysis of Fiber Reinforced Ti-alloy Subjected to Multi-Axial Loading—A Micromechanical Approach, *Materials Science and Engineering A*, Vol. 528, pp. 7983-7990, 2011.
- [6] R. Ansari, M. K. Hassanzadeh Aghdam, Effects of regular and random distribution of silica nanoparticles on the thermo-elastic and viscoelastic properties of polymer nanocomposites- Micromechanics-based analysis, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 1, pp. 99-107, 2015. (In Persian)
- [7] T. Ramanathan, H. Liu, L. C. Brinson, Functionalized SWNT/polymer nanocomposites for dramatic property improvement, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, Vol. 43, No. 17, pp. 2269–2279, 2005.
- [8] R. Zamani, Gh.H. Rahimi, M.H. Pol, Studies on the reinforcing effect of modified nanoclay on tensile and flexural properties of TETA- and F205-cured epoxy resins, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 10, pp. 9-16, 2014. (In Persian)
- [9] J. L. Tsai, S. H. Tzeng, Y. T. Chiu, Characterizing elastic properties of carbon nanotubes/polyimide nanocomposites using multi-scale simulation, *Composites Part B*, Vol. 41, pp. 106–115, 2010.
- [10] G. M. Odegard, T. C. Clancy, T. S. Gates, Modeling of the mechanical properties of nanoparticle/polymer composites, *Polymer*, Vol. 46, pp. 553–562, 2005.
- [11] M. M. Shokrieh, S. M. Mahdavi, Micromechanical model to evaluate the effects of dimensions and interphase region on the elastic modulus of CNT/polymer composites, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 11, No. 3, pp. 13-25, 2011. (In Persian)
- [12] J. S. Snipes, C. T. Robinson, S. C. Baxter, Effects of scale and interface on the three-dimensional micromechanics of polymer nanocomposites, *Journal of Composite Materials*, Vol. 45, pp. 2537-2546, 2011.
- [13] J. S. Smith, D. Bedrov, G. D. Smith, A molecular dynamics simulation study of nanoparticle interactions in a model polymer–nanoparticle composite, *Composites Science and Technology*, Vol. 63, pp. 1599–1605, 2003.
- [14] R. Ansari, S. Rouhi, S. Ajori, Elastic properties and large deformation of two-dimensional silicene nanosheets using molecular dynamics, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 65, pp. 64–70, 2014.
- [15] G. M. Odegard, T. C. Clancy, T. S. Gates, Modeling of the mechanical properties of nanoparticle/polymer composites, *Polymer*, Vol. 46, pp. 553–562, 2005.
- [16] A. Fereidoon, E. Saeedi, H. Hemmatian, Prediction of nanocomposite effective elastic moduli by finite element modeling in micro scale, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 5, pp. 91-101, 2013. (In Persian)
- [17] U. A. Joshi, S. C. Sharma, S. P. Harsha, Effect of carbon nanotube orientation on the mechanical properties of nanocomposites, *Composites Part B*, Vol. 43, pp. 2063–2071, 2012.
- [18] M. H. Yas, M. Heshmati, Dynamic analysis of functionally graded nanocomposite beams reinforced by randomly oriented carbon nanotube under the action of moving load, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 36, pp. 1371–1394, 2012.
- [19] W. Bauhofer, J. Z. Kovacs, A review and analysis of electrical percolation in carbon nanotubes, *Composites Science and Technology*, Vol. 69, pp. 1486–1498, 2009.
- [20] E. Logakis, P. Pissis, D. Pospiech, A. Korwitz, B. Krause, U. Reuter, P. Petra Potschke, Low electrical percolation threshold in poly (ethyleneterephthalate)/ multiwalled carbon nanotube composites, *European Polymer Journal*, Vol. 46, pp. 928–936, 2010.