مجله علوم و تکنولوژی پلیمر، سال بیستم،
شماره۲، صفحه ۱۹۵-۱۸۷، ۱۳۸۶
ISSN: 1016-3255

اثر عوامل ساختاری بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پلیمر ـ خاک‌رس

Effects of Structural Parameters on Mechanical Properties Polymer/Clay Nanocomposites

محمود مهرداد شکریه*، سید احسان سنبلستان
تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی مکانیک، صندوق پستی ۱۶۸۴۶/۱۳۱۱۴
دریافت: ۸۵/۵/۱، پذیرش: ۸۵/۸/۳۰

چکیده

امروزه نانوکامپوزیتها به عنوان موادی با خواص جالب توجه علاقه‌مندیهای زیادی را در زمینه مدل‌سازی ایجاد کرده‌اند. مدل‌سازی اجزای محدود یکی از روشهای مفید برای پیش‌بینی خواص کشسانی نانوکامپوزیتهای پلیمر ـ خاک‌رس محسوب می‌شود. در این پژوهش، با مطالعه ساختار مواد نانوکامپوزیت مدلی نزدیک به واقعیت ساخته شده است و با بکارگیری اجزا و شرایط مرزی مناسب در مدل خواص کشسانی نانوکامپوزیت مدل‌سازی شده است. عوامل ساختاری مختلفی که در خواص کشسانی نانوکامپوزیتها اثر بسزایی دارند، شامل نسبت حجمی، نسبت منظر خاک‌رس اصلاح‌شده، فاصله افقی بین ذرات و مقدار روی‌هم رفتگی ذرات به‌شکل توابعی از عوامل ساختاری تعریف شده‌اند و آثار آنها روی خواص کشسانی نانوکامپوزیت پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح شده بررسی شده است.

واژه‌های کلیدی

نانوکامپوزیت، خاک‌رس اصلاح شده، پلیمر، مدل‌سازی اجزای محدود، خواص مکانیکی

Key Words

nanocomposit, nanoclay, polymer, finit elements modeling, mechanical properties

مقدمه

مواد پلیمری اغلب به وسیله پرکننده‌ها برای اصلاح خواص مکانیکی تقویت می‌شوند. به تازگی کامپوزیتهای پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده علایق زیادی را در حوزه صنعت و پژوهش ایجاد کرده‌اند، زیرا این ترکیبات اغلب در مقایسه با پلیمرهای خالص، درشت‌کامپوزیتها یا ریزکامپوزیتهای معمولی خواص عالی نشان می‌دهند. اصلاحات در خواص شامل افزایش مدول، استحکام و مقاومت گرمایی و کاهش نفوذپذیری گاز، مقاومت در برابر اشتعال و افزایش زیست تخریب‌پذیری هستند[۱]. مورد مشهود در این مواد، افزایش خواص با مقدار

* مؤلف مسئول مکاتبات، پیام‌نگار: Shokrieh@iust.ac.ir

Archive of SID
www.SID.ir

ناچیزی تقویت‌کننده است، همچنین این افزایش خواص در اکثر مواقع باعث کاهش خواص در موارد دیگر نمی‌شود.

اولین بار در سال ۱۹۷۴ از لایه‌های خاک‌رس به عنوان تقویت‌کننده ایده‌ال استفاده شد[۲]. این کاربرد خاک‌رس به دلیل نسبت منظر بسیار زیاد ذرات آن و همچنین ضخامت نانوی آنها در مقایسه با اندازه ساختار زنجیر پلیمر بوده است. دو دهه بعد، گروه پژوهشی شرکت تویوتا طرح صنعتی و اقتصادی را برای ساخت کامپوزیت پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده ارائه کرد. ترغیب این گروه به این سو به دلیل دو برابر شدن مدول کششی و استحکام کامپوزیت نسبت به پلیمر تنها با استفاده از ۴/۷ درصد وزنی خاک‌رس اصلاح‌شده بود[۳].

هر چند که پژوهشهای مبتنی بر آزمایشها برای محاسبه رابطه خواص ـ ساختار نانوکامپوزیتها استفاده می‌شوند، ولی انجام آزمایشها و دستیابی به خواص کامپوزیتهای نانوساختاری از آن، روشهای فرایند و تجهیزات آزمایش پیشرفته‌ای را مطالبه می‌کند، که این موضوع هزینه‌های زیادی را در پی دارد. با توجه به این مطالب می‌توان به مفید بودن روشهای مدل‌سازی برای محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پلیمری پی‌برد [۴،۵].

مدل‌سازی مواد نانوکامپوزیت پلیمری در راستای محاسبه خواص این مواد، امکان بررسی عوامل مؤثر موجود در مسئله برای طراحی و توسعه ساختارهای نانوکامپوزیتی را در کاربردهای مهندسی فراهم می‌کند. خواص مکانیکی مواد نانوساختاری با انتخاب یک نوع از روشهای محاسباتی بدست می‌آید. دسته‌بندی و انواع این روشها قبلاً بررسی شده است[۶،۷].

در این مقاله، خواص مواد کامپوزیت پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده با فرض همسان بودن اجزا، به کمک مدل ریزمکانیک اجزای محدود بررسی شده است. پس از توضیح کلی در مورد روش مدل‌سازی، عوامل ریزساختاری مؤثر و نحوهٔ اثر آنها در مدل تعریف می‌شود. در نهایت، ارزیابی و مقایسه نتایج به دست آمده ارائه و چگونگی تغییرات خواص کشسانی با مقدار نسبت حجمی ماده پرکننده، نسبت منظر خاک‌رس اصلاح‌شده، فاصله افقی بین ذرات و ضریب روی‌هم رفتگی ذرات مطالعه شده است.

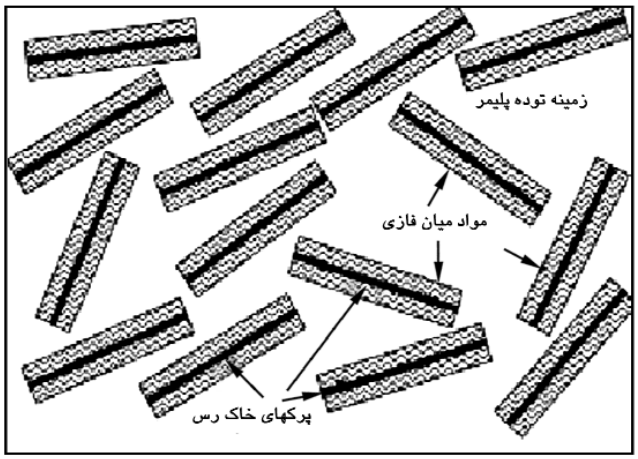
دیدکلی بر مدل

ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده با درصد وزنی کم، معمولاً اگر به طور مناسب در سراسر زمینه پخش شوند، سطحی فعال برای واکنشهای بین پلیمر و تقویت‌کننده ایجاد می‌کنند. بسته به رفتار متفاوت زمینه و نانوذرات خاک‌رس(طبیعی یا اصلاح شده) انواع مختلفی از کامپوزیتهای پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده به طور دینامیکی قابل دسترس هستند[۱]. در این پژوهش، خاک‌رس اصلاح‌شده از نوع لایه لایه شده کامل مورد مطالعه قرارگرفته است. درکامپوزیت با خاک‌رس اصلاح‌شده لایه لایه، لایه‌های خاک‌رس با ضخامت منحصر به فرد nm ۱ در محیط پیوسته زمینه پلیمری با فاصله بین لایه‌ای میانگین توزیع و جدا می‌شوند که این فاصله به غلظت خاک‌رس بستگی دارد. کامپوزیت با خاک‌رس اصلاح‌شده لایه لایه خواص بسیار عالی نسبت به زمینه خالص نشان می‌دهد. معمولاً کامپوزیتهای لایه‌ای نسبت به نوع جا داده شده با غلظت یکسان خاک‌رس اصلاح‌شده، خواص بهتری نشان می‌دهند [۸].

با فرض لایه لایه شدگی کامل، ذرات خاک‌رس تنها با موادی از یک جنس و خواص همگن رو به رو هستند. با توجه به نسبت منظر زیاد خاک‌رس اصلاح‌شده، هندسه آن اغلب به شکل صفحه‌ای، مستطیلی یا دمبلی در نظر گرفته می‌شود.

علاوه بر پراکنش متنوع ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده، یکی دیگر از پیچیدگیهای کامپوزیت پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده در مدل‌سازی، ایجاد ناحیه بین فازی در این مواد است (شکل۱). این ناحیه بین فازی ناشی از برهمکنش شیمیایی مولکولهای پلیمر با سطح ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده است که باعث تغییر فاز متمایز از پلیمر خالص می‌شود. اضافه شدن این فاز سوم، پیچیدگی مدل‌سازی را افزایش می‌دهد.

در پژوهشی با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو در سطح مولکولی، ناحیه بین فازی پلیمر و سطح بررسی شد. این بررسی مختص به نانوکامپوزیتها نبود، بلکه به طور کلی به کامپوزیتها مربوط می‌شد. نتیجه



شکل ۱کامپوزیتها با خاک‌رس اصلاح‌شده لایه‌لایه و ناحیه بین‌فازی[۷].

www.SID.ir
Archive of SID

مهم حاصل از پژوهش یاد شده این بود که ضخامت ناحیه بین فازی به شعاع ژیراسیون مولکولهای پلیمر بستگی دارد[۹]. سپس این عقیده با شبیه‌سازی مولکولی مونت کارلو دیگری بسط داده شد[۱۰]. در این بررسی که به طور ویژه روی مواد نانوکامپوزیتی متمرکز بود و پیش‌بینی برای این مواد مشابه پژوهشهای قبل به وابستگی ضخامت ناحیه بین فازی به شعاع ژیراسیون مولکولهای پلیمر مربوط بود. محاسبات حاصل از این مطالعه، مدول ناحیه بین فازی را با ضریب حدود ۲ نسبت به پلیمر نشان می‌دهد. وجود فاز سوم در آزمایشها نیز مشاهده می‌شود[۱۱].

در کامپوزیت واقعی پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده، ذرات نانو می‌توانند در جهات و مکانهای نسبی، با طول، ضخامت و نسبتهای حجمی مختلف قرار بگیرند. همین‌طور نواحی بین فازی اطراف ذرات با خواص کشسانی متفاوت پلیمر و نواحی گالری بین لایه‌های سیلیکات می‌توانند وجود داشته باشند.

خواص کشسانی نانوکامپوزیت علاوه بر عوامل یاد شده به خواص کشسانی پلیمر نیز بستگی دارد که نحوه اثر آن نیز می‌تواند قابل توجه باشد. در این پژوهش، اثر چهار عامل شامل ریزساختار روی‌هم رفتگی، مقدار لایه لایه شدگی و نسبت منظر ذرات و کسر حجمی خاک‌رس اصلاح‌شده روی خواص کشسانی کامپوزیت پلیمر ـ خاک‌رس اصلاح‌شده بررسی شده است. خواص کشسان مورد بررسی شامل مدول کشسانی در جهت طولی (E_{11}) و عرضی ذرات (E_{22}) و مدول برشی نانوکامپوزیت (G_{12}) هستند.

در این پژوهش، از نرم افزار ANSYS 9.0 برای تحلیل عددی استفاده شده است. تحلیلها تنها به طور ایستا در نظر گرفته شده‌اند. همان‌طور که واضح است در نرم افزار ANSYS انواع مختلف اجزا وجود دارد. اجزای Plane ۴۲ برای مدل‌سازیهای دو بعدی سازه‌های جامد به کار می‌رود. این اجزا در هر دو حالت اجزای صفحه‌ای (تنش و کرنش صفحه‌ای) و متقارن کارایی دارد. اجزای یاد شده دارای سه درجه آزادی بوده و مواد برای پلیمر و گالری همسان فرض شدند. مواد با دو خاصیت مدول کشسان و نسبت پواسون مشخص می‌شوند که به واقعیت هم نزدیک است. ذرات خاک‌رس هم با توجه به مباحث قبلی با فرضی قابل قبول همسان در نظر گرفته شده‌اند. تحلیلها در محدوده کشسان خطی بوده و با این فرض نمونه‌ها تحلیل شده‌اند.

شرح مدل نانومکانیک اجزای محدود

در این مدلها فرض شده است که ذرات خاک‌رس به شکل مستطیلی در حالت دو بعدی باشند. فرض پیوند کامل بین ذرات و ناحیه بین فازی(ناحیه سطحی) صادق است. این موضوع بدان معناست که در اطراف هر ذره ناحیه‌ای به نام ناحیه بین فازی در نظر گرفته شده است. هر دو ذره و ناحیه بین فازی در پلیمر معلق شده‌اند. از آنجاکه ذرات به شکل مستطیل مدل شده‌اند، ماده نانوکامپوزیت نمی‌تواند از نوع همسان انتقالی باشد. دو صفحه تقارن در مدلها وجود دارد که موجب ناهمسان بودن مدل می‌شود.

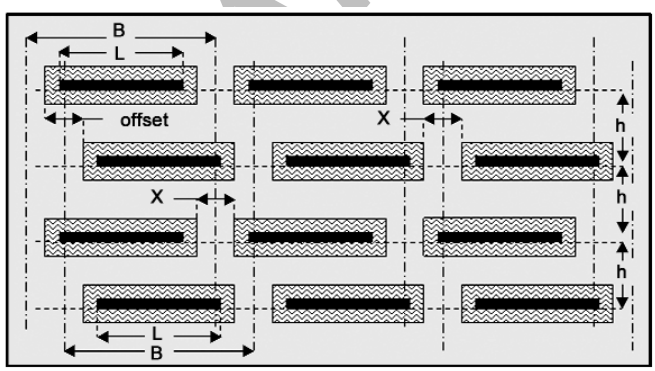
روی‌هم رفتگی ذرات یکی از مواردی است که به طور ساختاری روی مدل اثر می‌گذارد. مقدار روی‌هم رفتگی ذرات به کمک پارامتر f_s مشخص می‌شود. این پارامتر به عنوان فاصله بین دو ذره روی هم به پهنای یک سلول واحدی است که در آن سلول، تنها این دو ذره جا شده باشند:

$$f_s = \frac{2 \times Offset}{B} \qquad (1)$$

توجه به شکل ۲ می‌تواند در فهم عوامل موجود کمک کند.

عامل دوم مربوط به ساختار ذرات، مقدار پراکنش ذرات در پلیمر یا مقدار لایه‌لایه شدگی ذرات است. مقدار لایه‌لایه شدگی ذرات در مدل اجزای محدود با ضریب دیگری به نام ضریب لایه‌لایه شدگی (f_x) کنترل می‌شود. ضریب لایه‌لایه شدگی به عنوان فاصله نسبی ذرات یا به عبارت دیگر فاصله افقی بین دو ذره مجاور نسبت به حداکثر فاصله ممکن در غیاب ناحیه بین فازی تعریف می‌شود. به بیان دیگر، ضریب لایه‌لایه‌شدگی، حداکثر فاصله بین دو ذره مجاور در کسر حجمی ثابت است. با توجه به شکل ۲ می‌توان نوشت:

$$f_P = \frac{L^2 t}{B^2 h} \qquad (2)$$



شکل ۲ طرح کلی مدل تهیه شده و معرفی عوامل مختلف.

Archive of SID
www.SID.ir

فاصله h بین ذرات دارای بیشترین مقدار h_{max} برای کسر حجمی‌داده شده است که در حالت L=B ایجاد می‌شود. بنابراین:

$$h_{max} = \frac{t}{f_P} \qquad (۳)$$

ضریب لایه لایه شدگی به کمک معادله (۴) تعریف می‌شود:

$$f_x = \frac{h}{h_{max}} = \frac{L^2}{B^2} \qquad (۴)$$

که در آن L طول ذره و B پهنای سلول واحد یا سطح معیار حول یک ذره است. h فاصله عمودی بین ذرات و t ضخامت ذرات هستند. همان‌طور که از مدل مشاهده می‌شود محدودیتهایی برای مقدار f_x وجود دارد. به عنوان مثال، $f_x = ۱$ امکان‌پذیر نیست، زیرا این موضوع به معنای حذف فاصله بین دو ذره و ناحیه بین فازی است. اما، در مدل مشاهده شده ناحیه بین فازی با ضخامت τ در نظر گرفته شده است. بنابراین، مقدار f_x به وسیله τ محدود می‌شود. کمترین مقدار f_x وقتی اتفاق می‌افتد که h به h_{min} کاهش یابد.

$$h_{min} = 2\tau + t \qquad (۵)$$

بنابراین، کمترین ضریب لایه لایه شدگی مجاز به کمک معادله (۶) محاسبه می‌شود:

$$f_{x,min} = \frac{2\tau + t}{t/f_P} = f_P\left(2\frac{\tau}{t} + 1\right) \qquad (۶)$$

بیشترین مقدار ضریب لایه لایه شدگی در این مدل به وسیله ضخامت ناحیه بین فازی معین می‌شود. از آنجا که مدل اجازه نمی‌دهد که نواحی بین فازی در انتها روی یکدیگر بروند، بیشترین مقدار ضریب لایه لایه شدگی موقعی است که دو انتهای نواحی بین فازی به هم برسند. بنابراین، فاصله بین دو ستون به دو برابر ضخامت ناحیه بین فازی کاهش می‌یابد. بیشترین مقدار مجاز f_x به وسیله معادله (۷) محاسبه می‌شود:

$$f_{x,max} = \frac{L^2}{(L + 2\tau)^2} \qquad (۷)$$

همان‌طور که تا به حال مشاهده شده است، تمام عوامل ساختاری به طریقی به عوامل هندسی مربوط شده‌اند. عوامل نسبت منظر (a = L/t)، کسر حجمی(f_p) ضریب روی‌هم رفتگی ذرات (f_s) و به جای ضریب لایه لایه شدگی، پارامتر فاصله افقی بین ذرات (x) با توجه به تعریف هر یک بر حسب عوامل هندسی در نظر گرفته شده‌اند (شکل۲). قابل ذکر است محدودیتهای ضریب لایه لایه شدگی و فاصله عمودی دو ذره در مدل مدنظر قرار گرفته است.

مقایسه و ارزیابی خواص کشسانی مدلها

مدول کشسان برای پلیمر، خاک‌رس اصلاح‌شده و ناحیه بین فازی و همین‌طور نسبت پواسون آنها ثابت در نظر گرفته می‌شوند. در جدول ۱ تمام مقادیر یاد شده آمده است.

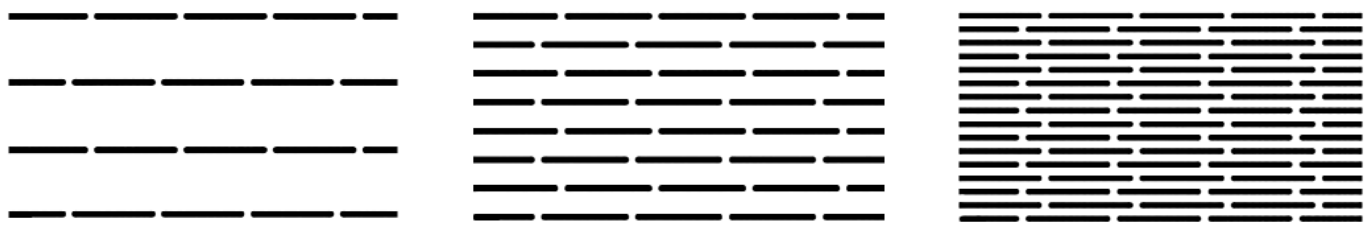
همان‌طور که در بالا بیان شد، هیچ آزمایشی برای تعیین مدول کشسان ناحیه بین فازی گزارش نشده است. مدول کشسان ناحیه بین فازی دو برابر مدول کشسان پلیمر به کار رفته پیش‌بینی می‌شود[۱۱]. مقدار ضخامت ناحیه بین فازی، متناسب با شعاع ژیراسیون پلیمر، معادل ۲ nm فرض شد.

برای نتیجه‌گیری کامل تعداد زیادی مدل باید ساخته شده و تحلیل

جدول ۱ خواص مربوط به نمونه بررسی شده در مدل عددی.

خواص	مقادیر
مدول یانگ ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده(GPa)	۱۷۸
نسبت پواسون ذرات	۰/۴۱
ضخامت ذرات (nm)	۱
مدول یانگ پلیمر (MPa)	۹۳/۷
نسبت پواسون پلیمر	۰/۳۵
درصد نسبی حجم خاک‌رس اصلاح‌شده	۱، ۲/۵، ۵
ضریب روی‌هم رفتگی ذرات	۰، ۰/۵، ۱
فاصله افقی بین دو ذره(nm)	۴، ۸، ۱۶
نسبت منظر	۲۸، ۵۲، ۱۰۰
تعداد لایه‌ها در یک ذره	۱

Archive of SID
www.SID.ir



شکل۳ طرح کلی مدلها برای درصد نسبی مختلف حجم خاک‌رس: (الف) ۵ درصد، (ب) ۲/۵ درصد و (ج) ۱ درصد.

شود. با توجه به جدول ۱ تعداد ۸۱ حالت ایجاد شده است. در حالاتی که عوامل دارای بازه باید ثابت بماند، مقادیر ۵ درصد برای درصد نسبی حجم خاک‌رس، ۰/۵ برای ضریب روی‌هم رفتگی، nm ۸ برای فاصله افقی بین ذرات و ۱۰۰ برای نسبت منظر در نظر گرفته شده‌اند.

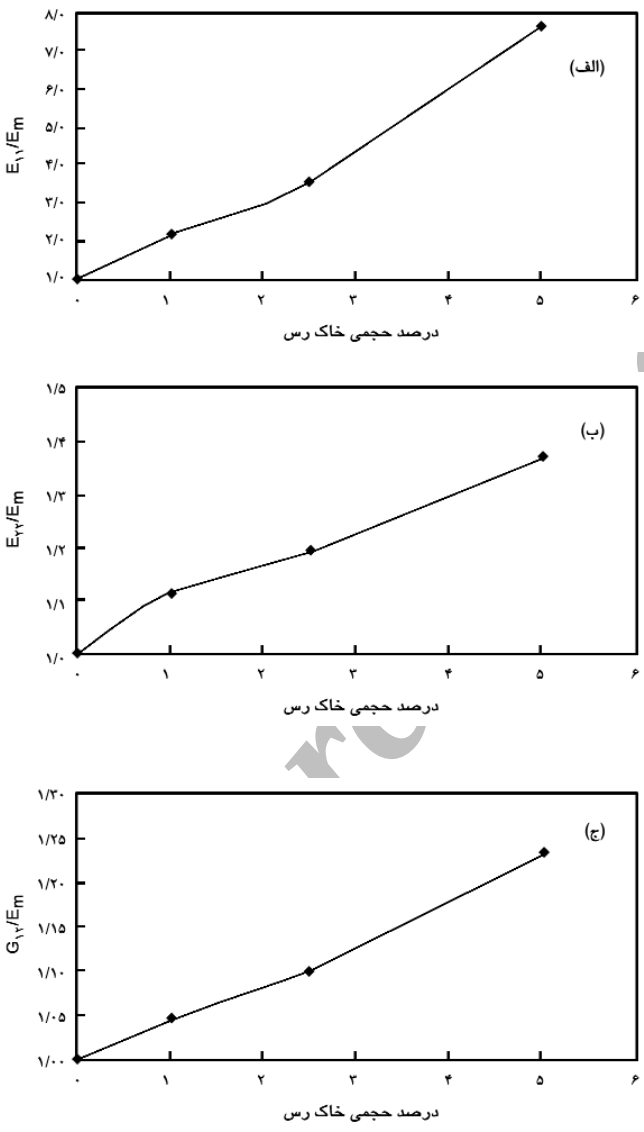
اثر نسبت حجمی

در شکل۳ برای مقایسه طرح‌وار مدلها با نسبت منظر۱۰۰، فاصله بین ستونهای خاک‌رس nm ۸، ضریب روی‌هم رفتگی ۰/۵ و درصدهای نسبی حجم خاک‌رس برابر ۱، ۲/۵و ۵ درصد، شکل مدلها رسم شده است. شکل ۴ بر اساس تحلیلهای انجام شده روی مدل، تغییرات نسبی مدولهای کشسان (E_{11}/E_m، E_{22}/E_m و G_{12}/E_m) را بر حسب درصد حجمی خاک‌رس اصلاح‌شده در کامپوزیت نشان می‌دهد.

همان‌طور که دیده می‌شود هر سه خاصیت مکانیکی با افزایش درصد حجمی خاک‌رس افزایش می‌یابد. افزایش خواص با اضافه‌کردن تقویت کننده منطقی و واضح است، ولی همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود افزایش خواص در جهت طول ذرات خیلی بیشتر از افزایش خواص در سایر جهات است.

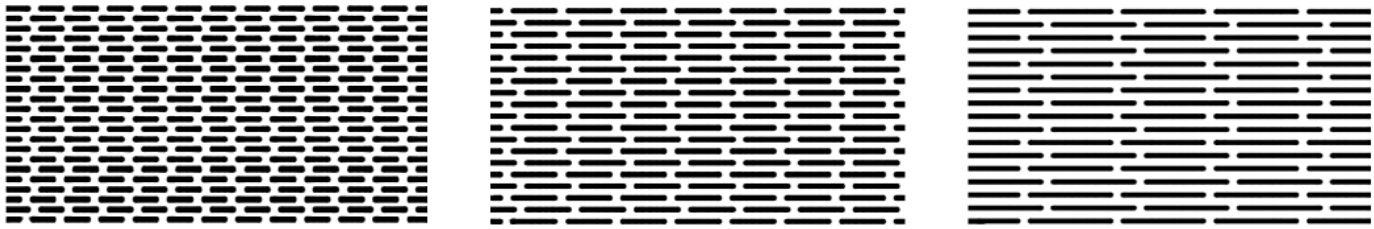
اثر نسبت منظر

اثر نسبت منظر از تقسیم طول ذره به عرض آن حاصل می‌شود. ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده به علت داشتن ضخامتهایی در حد نانو، دارای نسبتهای منظر زیادی هستند. یکی از عوامل مؤثر بر خواص کشسانی نانوکامپوزیت، نسبت منظر ذرات پراکنده شده در آن است. در شکل ۵ برای مقایسه مدلها به طور طرح‌وار با درصد حجمی ۵، فاصله بین ستونهای خاک‌رس nm ۸، ضریب روی‌هم رفتگی ۰/۵ و نسبتهای منظر ۲۸، ۵۲ و ۱۰۰، شکل مدلها رسم شده است. شکل۶ تغییرات نسبی مدولهای کشسان (E_{11}/E_m، E_{22}/E_m و G_{12}/E_m) را بر حسب نسبت

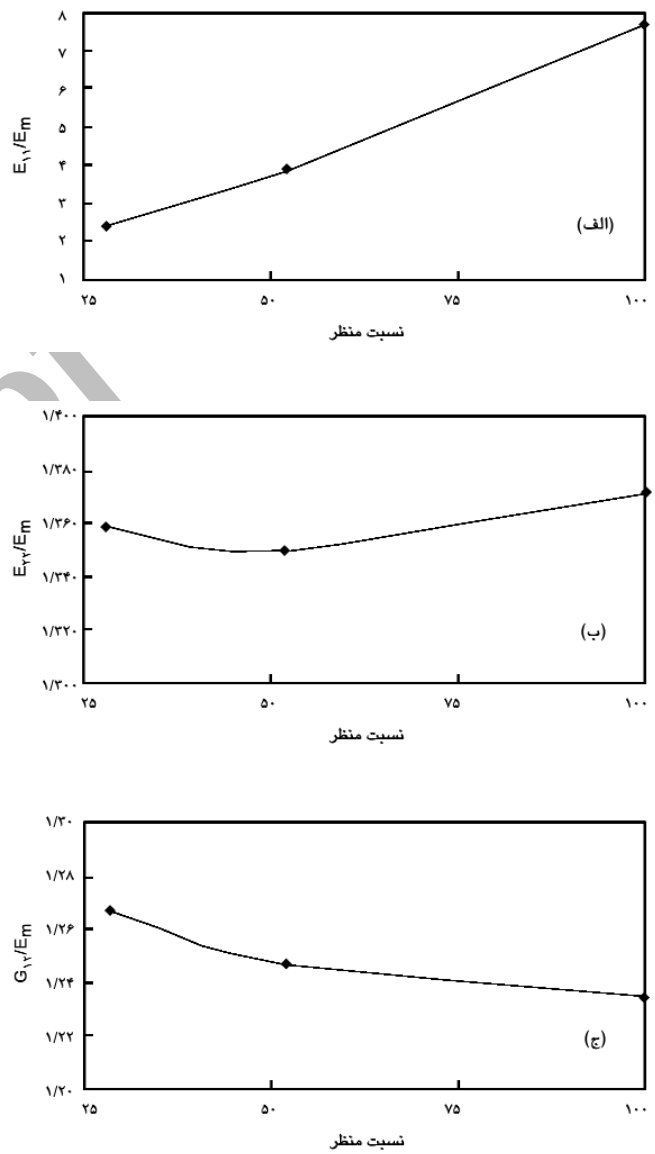


شکل۴ تغییرات نسبی مدولهای کشسان‌نانوکامپوزیت برحسب درصد حجمی خاک‌رس: (الف) E_{11}/E_m، (ب) E_{22}/E_m و (ج) G_{12}/E_m.

www.SID.ir



شکل۵ طرح کلی مدلها برای نسبتهای منظر مختلف : (الف) ۱۰۰، (ب) ۵۲ و (ج) ۲۸.



شکل۶ تغییرات نسبی مدولهای کشسان نانوکامپوزیت برحسب نسبت منظر ذرات: (الف) E_{11}/E_m، (ب) E_{22}/E_m و (ج) G_{12}/E_m.

منظر در کامپوزیت نشان می‌دهد.

همان‌طور که دیده می‌شود خاصیت مکانیکی E_{11} با افزایش نسبت منظر ذرات افزایش می‌یابد. افزایش خواص با اضافه شدن طول ذرات خاک‌رس قابل پیش‌بینی بود، ولی همان‌طور که در شکل دیده می‌شود G_{12} رفتاری معکوس دارد و با افزایش نسبت منظر کاهش می‌یابد. این رفتار به دلیل افزایش کرنش برشی در برابر تنش اعمالی است. این موضوع افزایش نسبت منظر را محدود می‌کند. زیرا، سامانه با به دست آوردن یک خاصیت، در حال از دست دادن مدول برشی است. برای رفتار مدول کشسانی E_{22} با اضافه کردن نسبت منظر نمی‌توان روند خاصی یافت.

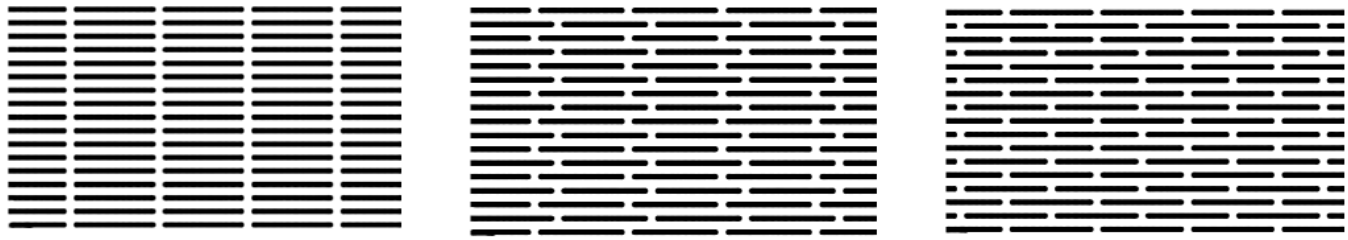
اثر ضریب روی هم رفتگی

همان‌طور که قبلاً نیز به آن اشاره شد، در مدل‌سازیهای انجام شده عاملی با عنوان روی هم رفتگی ذرات بررسی شده است. این اثر به‌کمک ضریب روی هم رفتگی (f_s) کنترل می‌شود. با زیاد شدن f_s درگیری ذرات بیشتر می‌شود. در شکل ۷ برای مقایسه شکل کلی مدلها با نسبت منظر ۱۰۰، درصد حجمی ۵، فاصله بین ستونهای خاک‌رس ۸ nm و ضریبهای روی هم رفتگی ۰، ۰/۵ و ۱ شکل مدلها رسم شده است. شکل ۸ تغییرات نسبی مدولهای کشسان (E_{11}/E_m) را بر حسب ضریب روی هم رفتگی در نانوکامپوزیت نشان می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود خاصیت مکانیکی E_{11} با افزایش ضریب روی هم رفتگی افزایش می‌یابد. بقیه خواص تغییر چندانی نمی‌کنند و به همین دلیل گزارش نشده‌اند.

اثر فاصله افقی بین ذرات

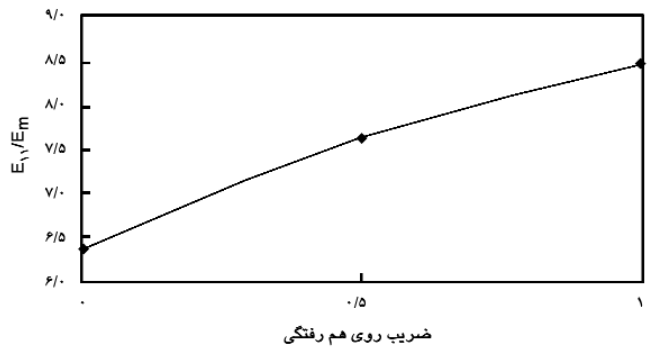
در مدلهای تهیه شده فاصله افقی بین ستونهای ذرات خاک‌رس یکسان است. نزدیکی لایه‌های خاک‌رس باعث تداخل اثر و میدان تنش ذرات در یکدیگر می‌شوند. یکی دیگر از عوامل مؤثر بر خواص کشسانی نانوکامپوزیت تغییر فاصله افقی بین ستونهای ذرات پراکنده شده در آن است. در شکل ۹ برای مقایسه شکل کلی مدلها با نسبتهای منظر ۱۰۰،

Archive of SID
www.SID.ir



(الف) (ب) (ج)

شکل۷ طرح کلی مدلها برای ضرایب روی‌هم رفتگی مختلف: (الف) ۱، (ب) ۰/۵ و (ج) ۰



شکل۸ تغییرات نسبی مدولهای کشسان E_{11}/E_m بر حسب ضریب روی‌هم رفتگی ذرات در نانوکامپوزیت.

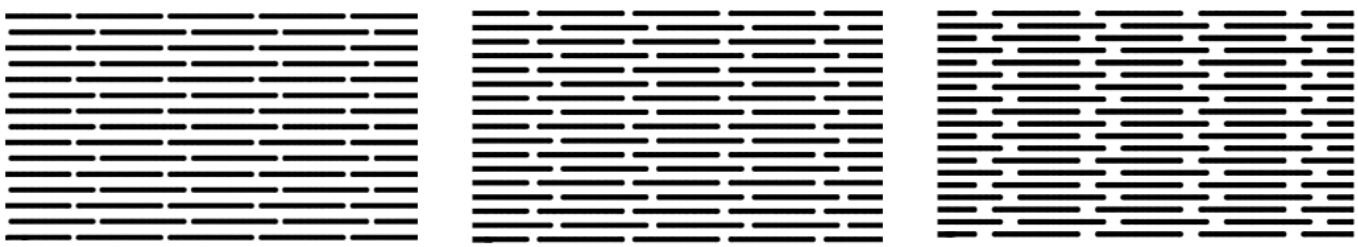
درصد حجمی ۵، ضریب روی‌هم رفتگی ۰/۵ و فاصله‌های افقی بین ستونهای خاک‌رس ۴، ۸ و nm ۱۶ شکل مدلها رسم شده است. شکل ۱۰ تغییرات نسبی مدولهای کشسانی (E_{11}/E_m، E_{22}/E_m و G_{12}/E_m) را بر حسب فاصله افقی بین ذرات در نانوکامپوزیت نشان می‌دهد.

همان‌طور که دیده می‌شود خاصیت مکانیکی E_{11} با افزایش فاصله افقی بین ستونهای ذرات کاهش می‌یابد. یعنی هر چه ذرات به هم چسبیده‌تر و دارای میدانهای تنش متداخلی باشند، خواص در جهت افقی بهینه‌تر است. ولی، همان‌طور که مشاهده می‌شود مدولهای کشسان در جهت ۲ و برشی با افزایش فاصله افقی بین صفحات افزایش می‌یابد.

مقایسه پیش بینی مدل و داده‌های تجربی

برای بررسی نحوه تطابق مدلهای موجود با نتایج تجربی، از داده‌های تجربی مربوط به نانوکامپوزیت اپوکسی ـ خاک‌رس در پژوهش انجام‌شده توسط لیو (Lue) و دانیل (Daniel) [۸] استفاده شده است. در این پژوهش مواد پلیمر و ذرات تقویت‌کننده همسان فرض شده‌اند. از ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده نوع کلویزیت ۳۰B (Cloisite) با مدول یانگ GPa ۱۷۸ و نسبت پواسون ۰/۴۱ استفاده شده است. ذرات خاک‌رس اصلاح‌شده صفحه مانند با قطر nm ۱۰۰، ضخامت nm ۱ و نسبت منظر ۱۰۰ هستند. مدول یانگ پلیمر GPa ۲/۷۵ و نسبت پواسون آن ۰/۳۵ است که مربوط به خواص اپوکسی است. درصد نسبت حجمی خاک‌رس اصلاح‌شده در پلیمر از ۰ تا ۵ درصد تغییر می‌کند. در مدل اجزای محدود، برای سایر عوامل مانند فاصله بین ستونهای خاک‌رس و ضریب روی‌هم رفتگی به ترتیب از مقادیر متوسط nm ۸ و ۰/۵ استفاده می‌شود.

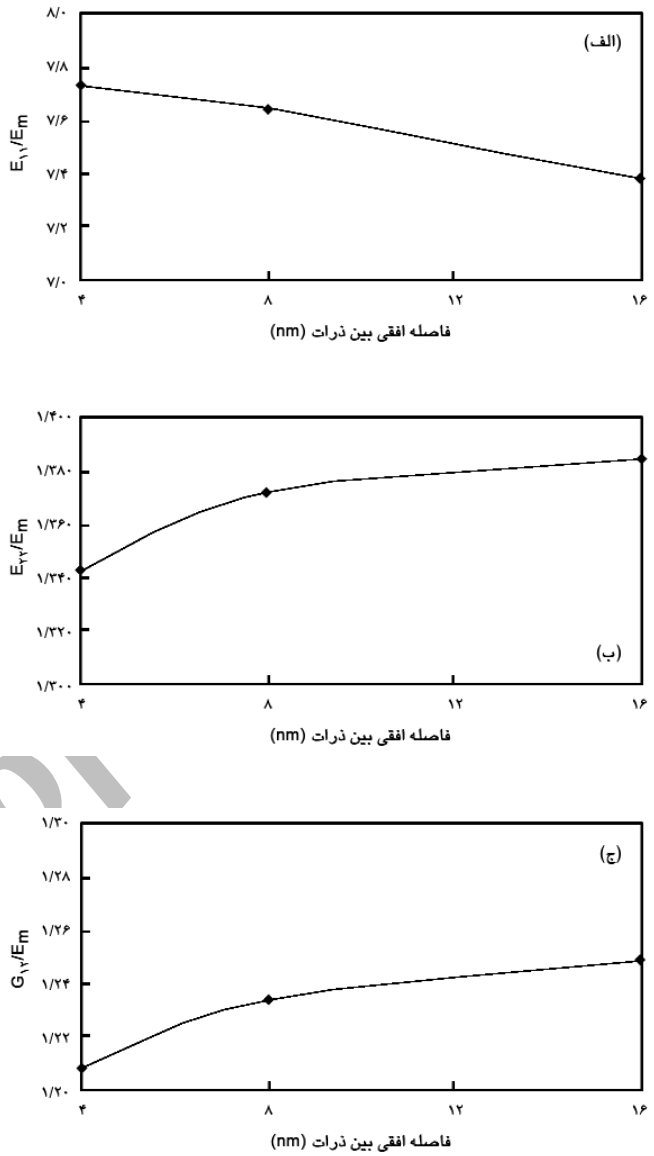
مقایسه نتایج مدل و داده‌های تجربی در شکل ۱۱ مدول کشسان



(الف) (ب) (ج)

شکل۹ طرح کلی مدلها برای فاصله افقی بین ذرات: (الف) nm ۱۶، (ب) nm ۸ و (ج) nm ۴.

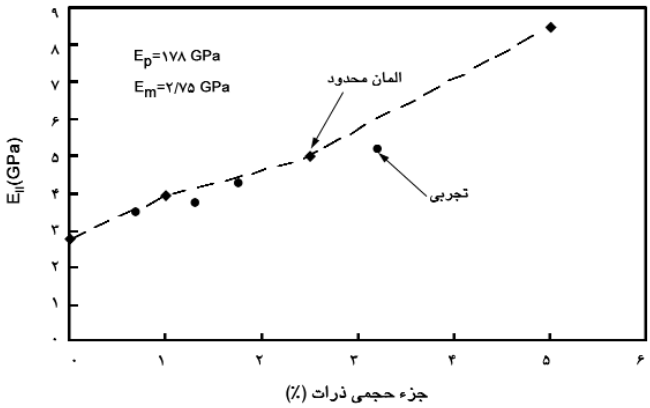
Archive of SID
www.SID.ir



شکل۱۰ تغییرات نسبی مدولهای کشسانی نانوکامپوزیت بر حسب فاصله افقی بین ذرات: (الف) E_{11}/E_m، (ب) E_{22}/E_m و (ج) G_{12}/E_m.

نانوکامپوزیت را روی نسبت حجمی خاک‌رس نشان می‌دهد. مقادیر داده‌های تجربی و پیش‌بینی شده در مدل مطابقت قابل قبولی دارند. تفاوت مشاهده شده بین این مقادیر را می‌توان به شکل زیر توجیه نمود:

یکی از مواردی که به طور زیادی در مقدار تقویت ماده نانوکامپوزیت اثر می‌گذارد، نحوه پراکنش نانوذرات خاک‌رس در زمینه مورد نظر است. بهترین نوع پراکنش این ذرات، پراکنش یکنواخت و لایه لایه شدن کامل خاک رس است. در داده‌های حاصل از مدلها فرض شده است که لایه‌های خاک‌رس به طور کامل از هم جدا شده و تعداد لایه‌ها در هر



شکل۱۱ E_{11} برای نسبتهای حجمی‌مختلف به دست آمده از مدل‌سازی اجزای محدود و نتایج تجربی.

مکان کامپوزیت واحد است، در حالی‌که در عمل اگر شرایط مطلوب باشد، تنها ۳۰-۱۰ درصد به طور کامل لایه‌ای هستند که این موضوع به مقدار زیادی باعث کاهش استحکام ماده می‌شود. دلیل دیگر وجود تفاوت در نتایج تجربی و عددی، به نحوه چیدمان لایه‌های خاک‌رس اصلاح‌شده در زمینه مربوط است. در داده‌های محاسبه شده به وسیله مدلها فرض شده‌که تمام لایه‌ها به طور یکنواخت و هم جهت در راستای مدول محاسبه شده باشند و در تمام نقاط نسبت منظر مؤثر ثابت و حداکثر حالت در نظر گرفته شده است. در حالی‌که در واقعیت خاک‌رس اصلاح‌شده به طور تصادفی قرار می‌گیرد و همیشه بیشترین سطح به طور مؤثر ظاهر نمی‌شود.

با مقایسه نتایج تجربی و مدل ارائه شده می‌توان بیان کرد که مدل اجزای محدود نتایج قابل قبولی را با توجه به نتایج تجربی نشان می‌دهد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، مدلهای اجزای محدود برای پیش بینی مدول کشسان با استفاده از خواص مکانیکی و منظری پلیمر به عنوان زمینه و خاک‌رس اصلاح‌شده به عنوان تقویت کننده ارائه شده است. در مدلهای مربوط با در نظر گرفتن ناحیه بین فازی و استفاده از شرایط مرزی مناسب پاسخهای قابل قبولی به دست آمده است. عوامل ساختاری روی‌هم رفتگی، مقدار لایه لایه شدگی و نسبت منظر ذرات و همچنین کسر حجمی‌خاک‌رس به عنوان عوامل مؤثر بر خواص کشسانی مد نظر قرار گرفته و بر حسب متغیرهای هندسی تعریف شده‌اند. با تغییر این متغیرها

Archive of SID
www.SID.ir

و در پی آن تغییر عوامل ساختاری عنوان شده آثار مربوط به خواص کشسانی ثبت شدند. بررسیها نشان می‌دهد که مدول کشسان در هر سه راستا با افزایش درصد حجمی خاک‌رس افزایش می‌یابد، در حالی‌که در مورد نسبت منظر، کاهش مدول برشی مشاهده می‌شود. برخلاف افزایش فاصله افقی بین ذرات، افزایش ضریب روی‌هم رفتگی باعث افزایش مدول کشسان کامپوزیت می‌شود.

در انتها با مقایسه نتایج مدل اجزای محدود و نتایج تجربی به تطابق خوب نتایج می‌توان پی‌برد، تفاوتهای مشاهده شده قابل درک و توجیه هستند. بنابراین، روش اجزای محدود روشی مطمئن برای پیش‌بینی خواص کشسانی نانوکامپوزیتهای پلیمر ـ خاک‌رس محسوب می‌شود.

مراجع

1. Ray S. and Okamato M., Polymer / Layered Silicate Nanocomposites : A Review from Preparation to Processing, *Prog. Polym.* Sci., **28**, 1539-1641, 2003.
2. Shepherd P.D., Golemba F.J. and Maine F.W., Clay Layers, *Adv. Chem. Ser.*, 134-141, 1974.
3. Usuki A., Synthesis of Nylon 6-Clay Hybrsaid, *J. Mater. Res.,* **8**, 1179-1184, 1993.
4. Brindly S.W. and Brown G., *Crystal Structure of Clay Minerals and their X-Ray Diffraction,* London, Mineralogical Society, 107, 1980.
5. Vaia R.A., Teukolsky R.K. and Giannelis E.P., Interlayer Structure and Molecular Environment of Alkylammonium Layered Silicates, *Chem. Mater.*, **6**, 1017-10722, 1994.
6. Shokrieh M.M. and Sonbolestan S.E., *Modeling of Mechanical Properties of Clay/Polymer Nanocomposites,* The 14th International Conference of Mechanical Engineering, ISME 2006 Esfahan, Iran, 529, 2006.
7. Valavala P.K. and Odegard G.M., Modling Techniques for Determination of Mechanical Properties of Polymer Nanocomposites, *Rev. Adv. Mater. Sci*., **9**, 34-44, 2005.
8. Luo J.J. and Daniel I.M., Characterization and Modeling of Mechanical Behavior of Polymer/Clay Nanocomposites, *Compos. Sci. Technol.*, **63**, 1607-1616, 2003.
9. Baschnagel J. and Binder K., On the Influence of Hard Walls on Tructural Properties in Polymer Glass Simulation, *Macromolecules*, **28**, 6808-6818, 1995.
10. Fossey S., Atomistic Modeling of Polymer Matrices in Nanocomposites, *Nanocomposites 2002: Delivering New Value to Polymers Conference Proceedings*, San Diego, CA: Executive Conference Management, 842, 2002.
11. Ray S. and Garnich M.R., Influence of Constituent Properties and Microstructural Parameters on the Tensile Modulus of a Polymer/Clay Nanocomposite, *Compos. Sci. Technol*. **64**, 2577-2588, 2004.

Archive of SID

www.SID.ir