

شبیه‌سازی خواص الاستیک نانوکامپوزیت پلیمر- رس

محمد رضا دشت بیاض* و مریم محمودی میمند

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهید باهنر کرمان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۰۶/۲ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۳/۱۰/۷)

چکیده - در این پژوهش، سفتی نانوکامپوزیت پلیمر- رس با استفاده از مدل‌های موری- تاناکا، المان محدود دو بعدی و سه بعدی شبیه‌سازی شده است. لایه‌های رس در درون زمینه پلیمری به دو صورت موازی و پراکنده تصادفی نسبت به جهت بارگذاری پخش شده‌اند. اثر عوامل ریزساختاری شامل کسر حجمی رس، مدول الاستیک رس و فاز میانی، ضخامت فاز میانی، نسبت ظاهری لایه‌های رس و جهت‌گیری لایه‌ها بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت توسط مدل المان محدود بررسی شده است. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی نشان داد که نتایج مدل موری- تاناکا به نتایج تجربی نزدیک‌تر بوده است. تحلیل نتایج نشان داد که کسر حجمی رس، مدول الاستیک رس، میزان انحراف لایه‌های رس از جهت بارگذاری، نسبت ظاهری لایه‌های رس، ضخامت فاز میانی و مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت به ترتیب بیشترین اثر را داشته‌اند.

واژگان کلیدی: شبیه‌سازی، نانوکامپوزیت پلیمر- رس، مدول الاستیک، مدل المان محدود، مدل موری- تاناکا

Simulation of Elastic Properties of Polymer- Clay Nanocomposite

M.R. Dashtbayazi* and M. Mahmoudi Meymand

Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman

Abstract: In this research, stiffness of polymer-clay nanocomposites was simulated by Mori-Tanaka and two and three dimensional finite element models. Nanoclays were dispersed into polymer matrix in two ways, namely parallel and random orientations toward loading direction. Effects of microstructural parameters including volume fraction of nanoclays, elastic

* مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: dashtbayazi@uk.ac.ir

modulus of nanoclays and interphase, thickness of interphase, aspect ratio of nanoclays and random orientation of nanoclays on elastic modulus of the nanocomposite were investigated by finite element model. Comparing the simulation with experimental results showed that the Mori-Tanaka simulation results were closer to the experimental results. Analysis of results showed that the volume fraction of nanoclay, elastic modulus of nanoclay, deviation of nanoclay layers with respect to loading direction, nanoclays aspect ratio, thickness of interphase and the elastic modulus of interphase had respectively the most to the least effect on elastic modulus of nanocomposite.

Keywords: Simulation, Polymer- clay nanocomposite, Elastic modulus, Finite element model, Mori-Tanaka model

۱- مقدمه

با وجود خواص مطلوب مواد مرکب سنتی، در اغلب کاربردهای صنعتی پیشرفته، این مواد پاسخ‌گوی کامل نیازها نیستند [۱]. در این رابطه، پژوهشگران دریافته‌اند که چنانچه بتوان ساختار مواد را در مقیاس‌های کوچک‌تر تهیه کرد، پیوندهایی که ماده با ابعاد کوچک با فازهای اطراف خود برقرار می‌کند، به مراتب قوی‌تر از مقیاس‌های بزرگ‌تر است [۲]. بر این اساس شاخه جدیدی از مواد مرکب به نام نانوکامپوزیت‌ها، ارائه و توسعه یافته است. نانوکامپوزیت‌ها مواد مرکبی هستند که حداقل یکی از فازهای تشکیل‌دهنده آن‌ها دارای ابعاد نانومتری (بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر) است [۳]. نانوکامپوزیت‌ها در مقایسه با سایر مواد مرکب سنتی، به دلیل داشتن خواص فیزیکی، مکانیکی و شیمیایی مطلوب‌تر، از کاربردهای وسیعی برخوردارند. صنایع هوافضا، خودروسازی، لاستیک، ارتباطات، شیمیایی، متالورژی، داروسازی، بهداشت و علوم زیستی و فناوری‌های انرژی از مصرف‌کنندگان عمده این دسته از مواد هستند [۴].

از میان انواع نانوکامپوزیت‌ها، نانوکامپوزیت‌های پلیمر-رس^۱ به علت خواص قابل توجه مانند مقاومت در برابر نفوذپذیری^۲ [۵]، کاهش تراوایی گاز^۳ [۶]، افزایش استحکام و مدول الاستیک [۷]، افزایش مقاومت به سایش [۸]، افزایش مقاومت در برابر حرارت [۹] نظر پژوهشگران را به خود جلب کرده است. در نانوکامپوزیت‌های پلیمر-رس، از انواع پلیمرهای گرماسخت^۴ مانند اپوکسی^۵ [۱۰] و گرمانرم^۶ مانند نایلون-۶ [۱۱] به عنوان زمینه و از انواع رس‌ها از قبیل هکتوریت^۸، مونت موریلونیت^۹ و میکای مصنوعی^{۱۰} به عنوان

پرکننده^{۱۱} استفاده شده است [۱۲]. رس‌ها دارای ساختار لایه‌ای هستند. با توجه به طبیعت پیوند اتم‌های موجود در انواع رس، انتظار می‌رود این مواد در جهت موازی لایه‌هایشان خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ای نشان بدهند. به هر صورت خواص مکانیکی دقیق لایه‌های رس هنوز شناخته نشده است [۱۳]. لایه‌های رس دارای نسبت ظاهری^{۱۲} بالایی (۱۰ تا ۱۰۰۰) هستند و ضخامت هر لایه رس در حدود یک نانومتر است در صورتی که ابعاد عرضی آن از سی نانومتر تا چند میکرومتر، متغیر است [۱۴]. لایه‌های متعدد رس در حد صدها و یا هزاران لایه، به وسیله نیروهای واندروالسی بر روی هم انباشته می‌شوند تا یک ذره رس ایجاد شود. به طور کلی رس‌ها با شکل‌ها و ساختارهای مختلفی در درون زمینه پلیمرها قرار می‌گیرند که شامل ساختارهای مخلوط نشده^{۱۳}، جاداده شده^{۱۴} و لایه لایه شده^{۱۵} هستند.

از عوامل مهم و تاثیرگذار بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمر-رس می‌توان به خواص پلیمر و رس، کسر حجمی رس، نسبت ظاهری لایه‌های رس، شرایط قرارگیری لایه‌های رس در کنار هم، فاصله بین لایه‌های رس تجمع یافته، توزیع لایه‌های رس، جهت قرارگیری لایه‌های رس در زمینه و فاز میانی^{۱۶} ایجاد شده بین لایه‌های رس و زمینه اشاره نمود [۱۵]. به هر صورت، توسعه خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمر-رس تا حد زیادی تجربی است و کنترل خواص آن‌ها به راحتی امکان‌پذیر نیست. بدین منظور، مدل‌سازی‌ها و شبیه‌سازی‌های کامپیوتری در پیش‌بینی و طراحی خواص نانوکامپوزیت‌ها و هدایت فعالیت‌های تجربی برای

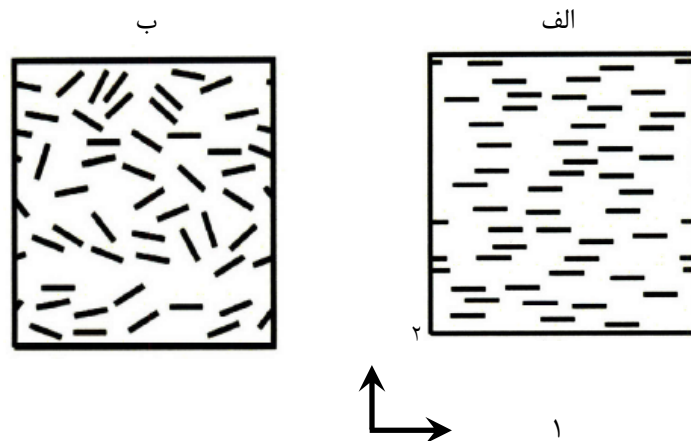
تعیین خواص آن‌ها نقش فزاینده‌ای ایفا می‌کنند. در این رابطه، پژوهشگران برای پیش‌بینی خواص و رفتار مکانیکی انواع نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری از انواع روش‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی در مقیاس‌های مولکولی، ریزساختاری و محیط پیوسته استفاده کرده‌اند [۱۶]. از میان روش‌های شبیه‌سازی و مدل‌سازی خواص مکانیکی، انواع روش‌های مکانیک محیط پیوسته با توجه به سهولت استفاده از آن‌ها و قابلیت پیش‌بینی خواص، بدون توجه به نوع ریزساختار در ابعاد اتمی، مورد توجه بسیاری قرار گرفته است [۱۷]. از انواع روش‌های مورد استفاده برای مدل‌سازی خواص مکانیکی مانند مدل‌های الاستیک، از دیدگاه محیط پیوسته می‌توان به مدل‌های میکرومکانیکی [۱۸] از قبیل هالپین-تسای^{۱۷} [۱۹]، موری-تاناکا^{۱۸} [۲۰] و خودسازگار^{۱۹} [۲۱] اشاره نمود. هم‌چنین استفاده از مدل‌های المان محدود نیز برای پیش‌بینی و مدل‌سازی خواص الاستیک انواع نانوکامپوزیت‌ها مرسوم است [۲۲]. در این خصوص، پهلوان‌پور و همکاران [۲۳] با استفاده از سه مدل میکرومکانیکی موری-تاناکا، خودسازگار و لیلینز^{۲۰} و یک مدل سه‌بعدی المان محدود و با استفاده از مفهوم ذره موثر^{۲۱} خواص الاستیک نانوکامپوزیت زمینه پلیمری پر شده با لایه‌های رس را بررسی کرده‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که روش موری-تاناکا در مقایسه با نتایج تجربی، نسبت به سایر روش‌های میکرومکانیکی از نتایج معتبرتری برخوردار است. هم‌چنین، پهلوان‌پور و همکاران [۲۴] با استفاده از یک مدل تحلیلی دو مرحله‌ای، مدل‌های الاستیک نانوکامپوزیت زمینه پلیمری پر شده با لایه‌های رس لایه لایه شده هم‌جهت را مورد بررسی قرار داده‌اند. آن‌ها در مرحله اول با استفاده از قانون مخلوط‌های اصلاح شده، خواص موثر لایه‌های رس را با در نظر گرفتن فاز میانی با زمینه پلیمری به‌دست آورده‌اند. سپس در مرحله دوم با استفاده از مدل موری-تاناکا و المان محدود سه‌بعدی، مدل‌های موثر نانوکامپوزیت حاوی لایه‌های موثر را با دقت بیشتری در مقایسه با سایر مدل‌های میکرومکانیکی به‌دست آورده‌اند. در پژوهشی دیگر، زارع شاه‌آبادی و همکاران [۲۵] با استفاده از

مدل هالپین-تسای، مدل‌های الاستیک نانوکامپوزیت زمینه پلیمری پر شده با رس سیلیکات را با در نظر گرفتن دو حالت جاداده شده و لایه لایه شده و با کمک مفهوم نسبت لایه لایه شدگی^{۲۲} محاسبه کرده‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که نتایج مدل‌سازی برای پیش‌بینی مدل‌های الاستیک، با نتایج تجربی در تطابق بوده است.

با توجه به مطالب یاد شده و این‌که هزینه ساخت و زمان انجام آزمایش‌های خواص مکانیکی مواد جدید، مانند انواع نانوکامپوزیت‌ها، بالاست و معمولاً در نتایج آزمایشگاهی پراکندگی مشاهده می‌شود، در این پژوهش، خواص الاستیک یک نوع نانوکامپوزیت زمینه پلیمری پر شده با لایه‌های رس و اثر عوامل مختلف ریزساختاری بر آن مورد بررسی قرار گرفته است. نانوکامپوزیت متشکل از سه فاز زمینه، پرکننده و فاز میانی در نظر گرفته شده است. فاز زمینه از جنس اپوکسی، فاز پرکننده از جنس رس و فاز میانی از ماده‌ای متفاوت از فاز زمینه و فاز پرکننده انتخاب شده است. در شبیه‌سازی با استفاده از دو مدل المان محدود و موری-تاناکا به بررسی اثر عوامل ریزساختاری شامل کسر حجمی رس، مدل‌های الاستیک رس و فاز میانی، نسبت ظاهری لایه‌های رس (نسبت ابعاد جانبی صفحات رس به ضخامت آن) و جهت‌گیری لایه‌ها بر روی مدل‌های الاستیک نانوکامپوزیت پرداخته شده است. هم‌چنین صحت نتایج حاصل از مدل‌های المان محدود و موری-تاناکا با داده‌های تجربی موجود مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- مدل موری-تاناکا

در مدل موری-تاناکا با استفاده از مفهوم ناخالصی معادل^{۲۳} که توسط اشلیبی^{۲۴} معرفی شده خواص الاستیک موثر^{۲۵} انواع مواد مرکب حاوی پرکننده‌های ناپیوسته با شکل‌های هندسی و توزیع‌های متفاوت قابل محاسبه است [۲۶]. از مدل موری-تاناکا برای تخمین خواص الاستیک مواد مرکب حاوی پرکننده‌های با نسبت ظاهری بالا به‌خوبی استفاده شده است [۲۷]. در مدل موری-تاناکا خواص الاستیک موثر به ثوابت الاستیک زمینه و پرکننده، درصد حجمی پرکننده و شکل



شکل ۱- نمائی از توزیع لایه‌های رس در حالت دو بعدی به صورت:
الف) موازی و هم جهت و ب) پراکنده تصادفی

$$\frac{E_{11}}{E_0} = \frac{1}{1 + c(A_1 + 2v_0 A_2) / A} \quad (1)$$

A_1 ، A_2 و A ثابت‌هایی هستند که به مولفه‌های تانسور اشلیبی^{۲۸} و ثوابت لمه^{۲۹} فاز زمینه و پرکننده وابسته‌اند. E_0 و v_0 به ترتیب مدول الاستیک و ضریب پواسون فاز زمینه و c کسر حجمی فاز پرکننده است. لازم به ذکر است که در حالت دو بعدی در صورتی که لایه‌های رس به صورت موازی و هم جهت در درون زمینه توزیع شده باشند نانوکامپوزیت از دیدگاه ماکروسکوپی ارتوتروپیک^{۳۰} محسوب می‌شود. در نتیجه E_{11} خواهد شد E_{22} مدول الاستیک نانوکامپوزیت در راستای محور ۲ است).

برای محاسبه مدول الاستیک موثر در راستای محور ۱ (E_{11}) در حالتی که ذرات پرکننده به صورت پراکنده تصادفی در داخل زمینه قرار گرفته باشند (شکل ۱- ب) رابطه زیر پیشنهاد شده است [۳۰]:

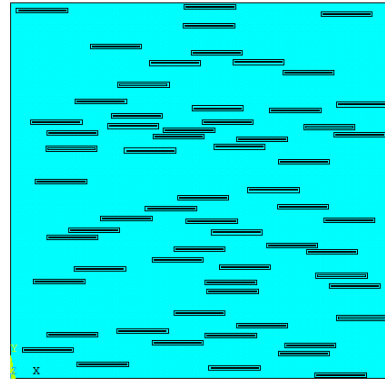
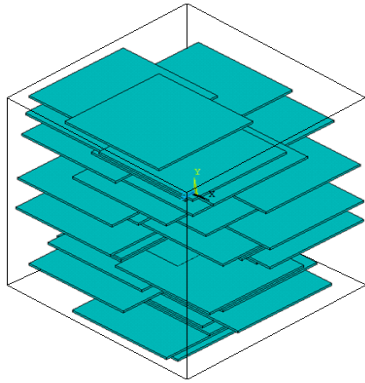
$$\frac{E_{11}}{E_0} = \frac{1}{1 + cp_{11}} \quad (2)$$

P_{11} ثابتی است که به ضریب پواسون و کسر حجمی فاز پرکننده، ثوابت لمه فاز زمینه و پرکننده و مولفه‌های تانسور اشلیبی وابسته است. لازم به ذکر است که در حالت دو بعدی در صورتی که لایه‌های رس به صورت پراکنده تصادفی در درون زمینه توزیع شده‌اند به دلیل ایجاد خواص همسان‌گرد عرضی^{۳۱}

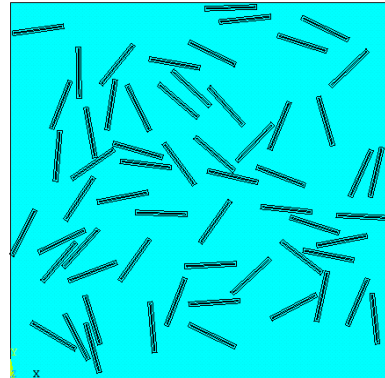
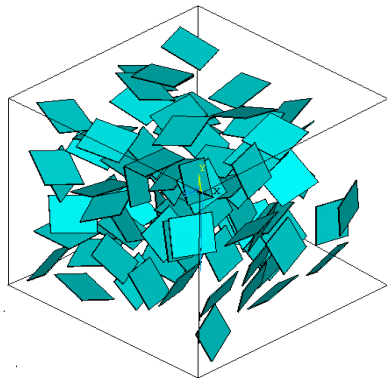
هندسی آن وابسته است. هم‌چنین، در مدل موری- تاناکا، مواد تشکیل دهنده ماده مرکب به صورت الاستیک خطی و همسان‌گرد^{۲۶} فرض می‌شوند [۲۸]. در این پژوهش، برای بررسی رفتار الاستیک نانوکامپوزیت پلیمر- رس، کسر حجمی فاز پرکننده به ترتیب ۱، ۳، ۵ و ۱۰ درصد انتخاب شد. ضریب پواسون لایه‌های رس و پلیمر به ترتیب ۰/۲ و ۰/۳۵ و مدول الاستیک لایه‌های رس و زمینه پلیمر به ترتیب ۱۷۶ و ۲/۰۵ گیگاپاسکال و لایه‌های رس در زمینه پلیمر به دو صورت موازی و هم جهت و یا پراکنده تصادفی در نظر گرفته شده‌اند. مدل‌های ایجاد شده به دو صورت دو بعدی و سه بعدی در نظر گرفته شده‌اند. شکل ۱ نمائی از چگونگی توزیع لایه‌های رس در درون زمینه پلیمر را در حالت دو بعدی نمایش می‌دهد. شکل هندسی لایه‌های رس به صورت صفحات تخت مجزا از هم در نظر گرفته شده‌اند.

برای اعمال مدل موری- تاناکا از روابطی که توسط تندون و وینگ^{۲۷} [۲۹] توسعه داده شده‌اند استفاده شده است. آن‌ها برای محاسبه مدول الاستیک موثر در راستای قرارگیری لایه‌ها (E_{11}) در حالتی که ذرات پرکننده به صورت موازی و هم جهت در داخل زمینه قرار گرفته باشند (راستای ۱ در شکل ۱- الف) رابطه (۱) را پیشنهاد کرده‌اند [۲۹]:

الف



ب



سه بعدی

دو بعدی

شکل ۲- مدل‌های هندسی دو بعدی و سه بعدی لایه‌های رس: الف) با جهت‌گیری موازی و ب) با جهت‌گیری پراکنده تصادفی

۳- مدل المان محدود

۳-۱- ایجاد مدل هندسی برای جزء حجمی نماینده^{۳۴}

برای ایجاد مدل هندسی اولیه، به‌عنوان بخشی از ساختار نانوکامپوزیت پلیمر-رس و یا جزء حجمی نماینده نانوکامپوزیت، یک سلول مربعی حاوی پلیمر و لایه‌های رس برای حالت دو بعدی و یک سلول مکعبی برای حالت سه بعدی در نظر گرفته شده است. در مدل‌های هندسی دو بعدی و سه بعدی به‌صورت مجزا، لایه‌های رس با توزیع‌های موازی و پراکنده تصادفی به‌صورت مجزا در کنار یکدیگر قرار داده شده‌اند. شکل ۲ نمونه‌هایی از مدل‌های هندسی دو بعدی و سه بعدی که با جهت‌گیری موازی و پراکنده تصادفی ایجاد شده‌اند را نمایش می‌دهد. لازم به‌ذکر است که در مدل‌های هندسی دو بعدی و سه بعدی لایه‌های رس به‌صورت تصادفی

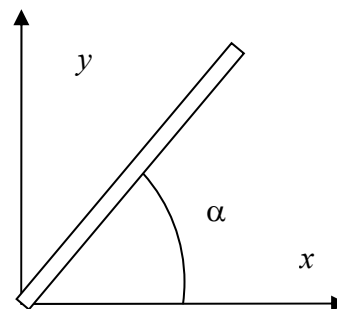
در نانوکامپوزیت، $E_{11} = E_{22}$ است.

هم‌چنین، برای محاسبه مدول حجمی موثر $\kappa^{۳۲}$ و مدول برشی موثر $\mu^{۳۳}$ نانوکامپوزیت حاوی پرکننده با توزیع پراکنده تصادفی در حالت سه بعدی، که از دیدگاه میکروسکوپی همسان‌گرد محسوب می‌شود، روابط زیر ارائه شده است [۳۰]:

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = \frac{1}{1+c\rho} \quad \frac{\mu}{\mu_0} = \frac{1}{1+cq} \quad (۳)$$

P و q ثوابتی هستند که به ضریب پواسون و کسر حجمی فاز پرکننده، ثابت‌های لامه فاز زمینه و پرکننده و مولفه‌های تانسور اشلیبی وابسته‌اند. رابطه مدول الاستیک موثر E با مدول حجمی موثر κ و مدول برشی موثر μ به‌صورت زیر بیان می‌شود [۳۱]:

$$E = \frac{9\kappa\mu}{3\kappa + \mu} \quad (۴)$$



شکل ۳- مؤلفه‌های تعیین موقعیت یک لایه رس

ابتدا در اتوکد خطوطی به صورت تصادفی در حالت دوبعدی به گونه‌ای رسم شده‌اند که در یک‌دیگر تداخل نمایند (مانند شکل ۴- الف). این خطوط تصویر لایه‌های رس در صفحه $x-y$ محسوب شده‌اند. سپس مختصات نقطه ابتدای هر خط به صورت (x, y) و زاویه خط با محور x با نماد α استخراج شده‌اند. برای ایجاد لایه‌های رس در درون فضای سه‌بعدی، در ادامه مختصات نقطه نماینده هر لایه، به صورت تصادفی با نمادهای (z, γ, β) انتخاب شده‌اند که به ترتیب z مختصه سوم هر لایه رس در عمق و β و γ به ترتیب زاویه لایه با محورهای y و z هستند. در ادامه برای ایجاد مدل هندسی و المان محدود از جزء حجمی نماینده مورد نظر، یک برنامه^{۳۷} با دستورات نرم‌افزار انسیس^{۳۸} نوشته شده است. متن برنامه نام برده در مرجع [۳۲] آمده است. بدین منظور پس از استخراج مشخصات لایه‌های رس در دو حالت دو و سه بعدی، مشخصات هر لایه از طریق فایل داده‌های تهیه شده، به عنوان ورودی برنامه انسیس، برای ایجاد مدل هندسی در انسیس فراخوانی شده است. برنامه مورد استفاده، تولید مدل‌های مختلف را امکان پذیر ساخته است. برنامه تهیه شده در انسیس، با گرفتن عوامل متغیر شامل مدول الاستیک رس و فاز میانی، نسبت پواسون رس و فاز میانی، نسبت ظاهری رس و ضخامت فاز میانی به عنوان ورودی از کاربر، عملیات مدل‌سازی هندسی، المان‌بندی و اعمال شرایط مرزی را انجام داده است.

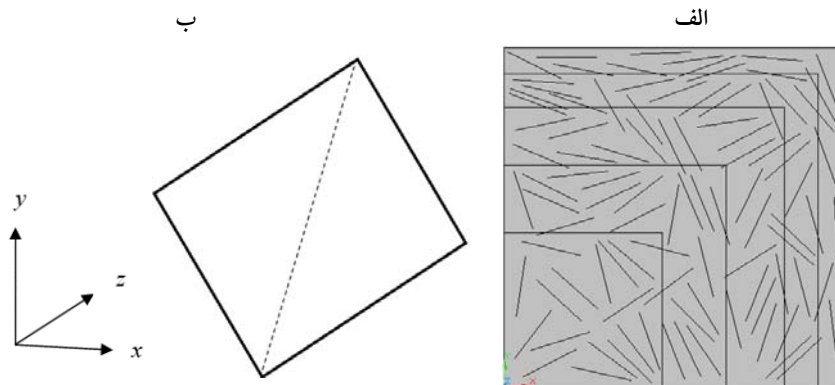
۳-۲- مدل المان محدود دو بعدی

در مدل دو بعدی المان محدود از المان‌های پوسته‌ای^{۳۹} هشت گره‌ای تحت عنوان PLANE82 استفاده شده است. بدین منظور، برای المان‌بندی صفحات رس از المان‌های مربعی شکل و برای ماده فاز میانی و ماده زمینه از المان‌های مثلثی شکل استفاده شده است. برای بالا بردن دقت نتایج، تا حد امکان المان‌ها ریز در نظر گرفته شده‌اند تا جایی که افزایش تعداد المان‌ها بر دقت نتایج تقریباً بی‌اثر شده است. شکل ۵ یک نمونه از المان‌بندی مدل دو بعدی را در دو حالت توزیع موازی و پراکنده تصادفی لایه‌های رس را نشان می‌دهد.

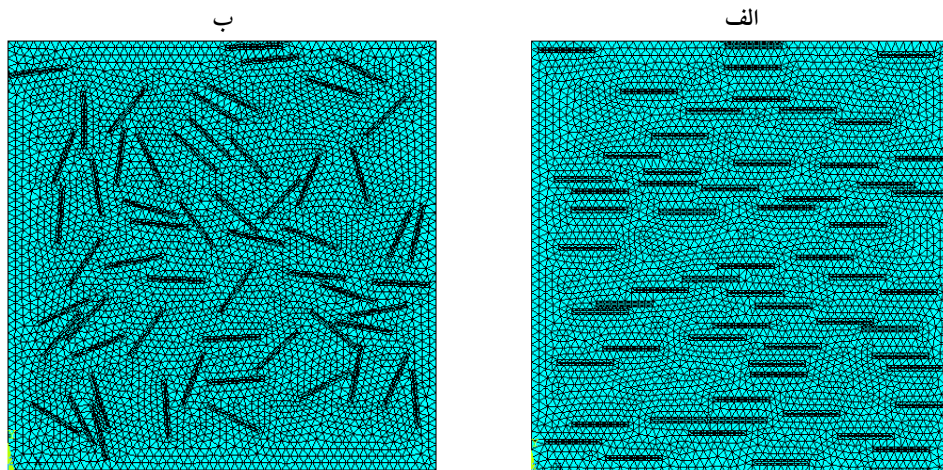
جانمایی شده‌اند تا شرایط واقعی حضور رس در پلیمر ایجاد گردد. الگوریتم ایجاد حضور تصادفی لایه‌های رس در درون پلیمر در ادامه مقاله تشریح خواهد شد.

در مدل دو بعدی، صفحات رس به صورت مستطیل‌های باریک در داخل ماده زمینه ایجاد شده‌اند. هم‌چنین فاز میانی، صفحات رس را احاطه کرده است. برای ایجاد مدل هندسی دو بعدی لایه‌های رس در داخل زمینه پلیمر، یک برنامه به زبان متلب^{۳۵} نوشته شده است. متن برنامه نام‌برده در مرجع [۳۲] آمده است. در برنامه متلب، ابتدا مختصات یک نقطه از گوشه یکی از لایه‌های رس با ابعاد معین و زاویه آن نسبت به محورهای مختصات با استفاده از یک تابع تصادفی ایجاد شده است (شکل ۳). لازم به ذکر است که در حالتی که لایه‌های رس به صورت موازی و هم‌جهت هستند، زاویه انتخابی صفر درجه بوده است. سپس برای ایجاد یک نقطه از لایه بعدی و با توجه به ابعاد آن، شرط عدم برخورد هر لایه با لایه قبلی بررسی شده است. در صورت برخورد لایه‌های رس، برنامه نقطه دیگری را انتخاب کرده است. در ادامه شرط برخورد لایه‌ها دوباره بررسی شده و این روند تا جایی ادامه پیدا کرده که تعداد مورد نیاز از نقاط (یک نقطه از گوشه هر لایه) ایجاد شده است. در نهایت مختصات یک نقطه مشخص از لایه‌ها و زوایای آن‌ها نسبت به محورهای مختصات، به عنوان خروجی برنامه در یک فایل داده ذخیره شده است.

برای ایجاد لایه‌های رس با جهت‌گیری پراکنده تصادفی در حالت سه بعدی، از نرم‌افزار اتوکد^{۳۶} استفاده شده است.



شکل ۴- مدل هندسی لایه‌های رس در حالت سه بعدی: الف) خطوط ترسیم شده در اتوکد و ب) یک لایه در فضای سه بعدی



شکل ۵- مدل‌های المان محدود دو بعدی با لایه‌های با جهت‌گیری: الف) موازی و هم‌جهت و ب) پراکنده تصادفی

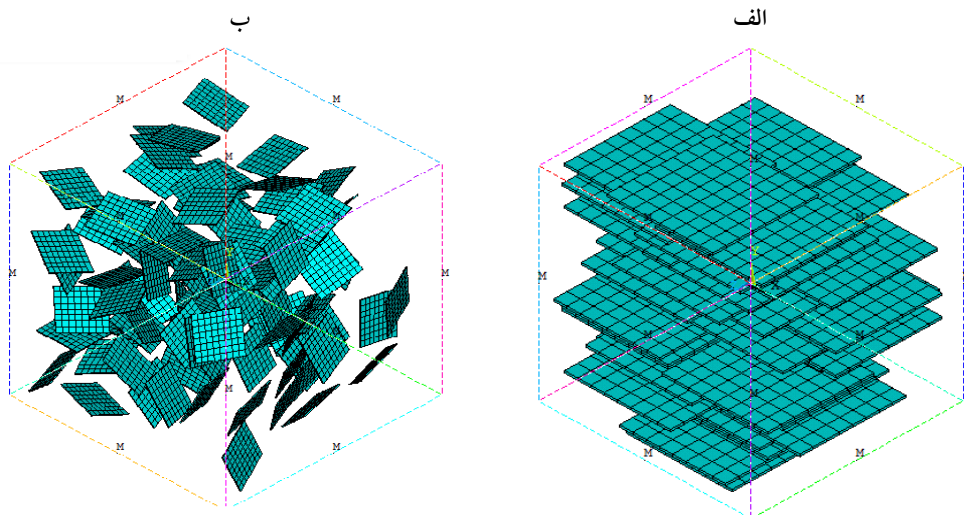
۳-۳- مدل المان محدود سه بعدی

در مدل سه بعدی المان محدود، از المان سه بعدی 4° بیست گره‌ای تحت عنوان SOLID186 استفاده شده است. مدل سه بعدی لایه‌های رس به صورت مکعب مستطیل‌هایی با مقطع مربعی و ضخامت یک نانومتر در نظر گرفته شده است. شکل ۶ توزیع لایه‌های رس با جهت‌گیری موازی و پراکنده تصادفی را در حالت سه بعدی نمایش می‌دهد. برای المان‌بندی صفحات رس از المان‌های مکعبی شکل، و زمینه از المان‌های هرمی شکل استفاده شده است. در مدل‌های دو بعدی و سه بعدی با استفاده از دستور چسباندن^{۴۱} در نرم افزار انسیس، فرض چسبندگی کامل در فصل مشترک فازهای مختلف ماده اعمال

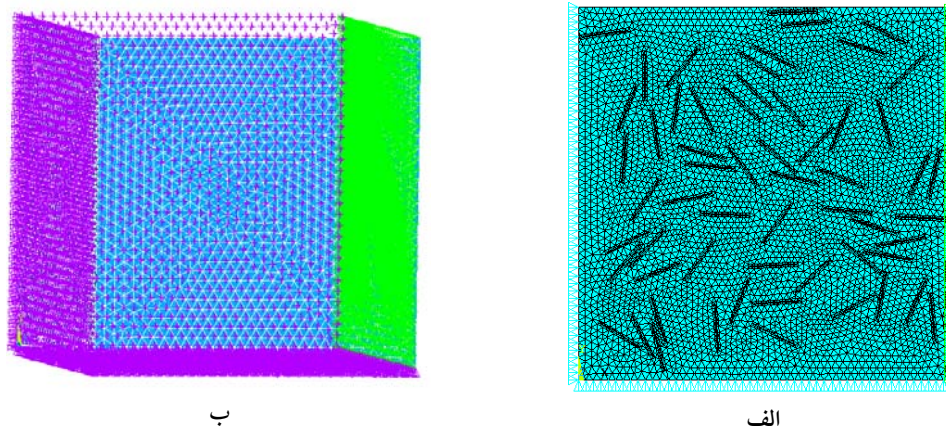
شده است.

۳-۴- اعمال شرایط مرزی

برای اعمال شرایط مرزی در حالت دو بعدی لبه‌های سمت چپ و پایین مدل به عنوان مرزهای متقارن مدل در جهت عمود بر لبه به صورت غلتکی مقید شده‌اند و در لبه سمت راست تنش ثابت و یکنواخت بر گره‌ها اعمال شده است. در مدل سه بعدی نیز سمت چپ، پایین و پشت سلول در جهت عمود بر وجه به صورت غلتکی مقید شده‌اند و نیروی یکنواخت بر تمام گره‌های در وجه راست اعمال شده است. شکل ۷ شرایط مرزی اعمال شده بر مدل‌های دو بعدی و سه بعدی را نشان می‌دهد.



شکل ۶- مدل‌های المان محدود سه بعدی با لایه‌های با جهت‌گیری (الف) موازی و هم‌جهت و (ب) پراکنده تصادفی



شکل ۷- شرایط مرزی متقارن اعمال‌شده بر مدل‌های المان محدود در حالت (الف) دو بعدی و (ب) سه بعدی

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (۶)$$

لازم به ذکر است که نرم‌افزار انسیس، میزان تنش در هر المان را به صورت یک جدول در اختیار کاربر قرار می‌دهد که با استفاده از داده‌های این جدول و متوسط‌گیری از آن، تنش متوسط محاسبه شده است.

با توجه به این‌که لایه‌های رس در هر دو حالت دو بعدی و سه بعدی، به صورت تصادفی در پلیمر قرار گرفته‌اند، تحلیل مدل‌های مختلف در حالت سه بعدی با جهت‌گیری با لایه‌های موازی و تصادفی نشان داد که مدول الاستیک به تعداد لایه‌ها در یک سلول و ابعاد سلول وابسته است. برای کاهش خطای

۳-۵- محاسبه مدول الاستیک مدل نانوکامپوزیت

برای محاسبه مدول الاستیک، بر مدل المان محدود تنش یکنواخت اعمال شده، سپس حداکثر جابجایی گره‌های سمت راست مدل به دست آمده است. با فرض این‌که مدل مورد نظر رفتاری شیب به قطعه نانوکامپوزیت در حالت اصلی داشته باشد، کرنش متوسط ε در نمونه‌ها به صورت زیر محاسبه شده است:

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L} \quad (۵)$$

که ΔL میزان جابجایی سلول و L طول اولیه سلول است. سپس با تقسیم تنش متوسط ایجاد شده در سلول (σ) بر کرنش متوسط آن، مدول الاستیک E از این رابطه محاسبه شده است:

جدول ۱- اثر تعداد لایه‌های رس بر مدول الاستیک بی‌بعد

تعداد لایه‌های رس	مدول الاستیک بی‌بعد	
	مدل دو بعدی تنش مسطح ^{۳۲}	مدل سه بعدی
۱۰	۱/۱۷۸	۱/۱۱۸
۳۰	۱/۲۰۲	۱/۲۰۴
۵۰	۱/۲۱۶	۱/۲۲۵
۸۰	۱/۲۱۷	۱/۲۲۶
۱۰۰	۱/۲۱۸	۱/۲۲۶

جدول ۲- اثر کسر حجمی رس بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت

در نمونه‌های با لایه‌های رس با جهت‌گیری موازی

درصد کسر حجمی رس	مدول الاستیک بی‌بعد		
	موری- تاناکا	مدل المان محدود	
		سه بعدی	دو بعدی
۱	۱/۳۲	۱/۱۹۵	۱/۲۶۸
۳	۱/۹۹	۱/۵۴۲	۱/۹۶۸
۵	۲/۶۷	۲/۱۷۳	۲/۲۴۷
۱۰	۴/۵	۳/۶۷	۳/۹۳

مدل‌های دو بعدی و سه بعدی حاوی لایه‌های رس با نسبت ظاهری ۵۰ و کسر حجمی یک درصد، سلول‌های با ابعاد و تعداد لایه‌های مختلف رس ایجاد شد (مانند شکل ۴- الف). نتایج محاسبه مدول الاستیک بی‌بعد در مدل‌های دو بعدی و سه بعدی در جدول ۱ نشان داده شده است. با توجه به نتایج جدول ۱ مشاهده می‌شود که در هر دو مدل دو بعدی و سه بعدی، زمانی که تعداد لایه‌های رس در سلول‌ها بیش از ۵۰ عدد است، اثر ابعاد سلول و تعداد لایه‌های رس بر مدول الاستیک بی‌بعد، ناچیز شده است. در نتیجه در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده در این پژوهش از مدل‌هایی حاوی بیش از ۵۰ صفحه رس استفاده شده است.

۴- نتایج و بحث

۴-۱- مقایسه نتایج مدل‌های المان محدود و موری- تاناکا

جدول ۲ نتایج محاسبه مدول الاستیک بی‌بعد شده در راستای لایه‌ها، در درصد‌های مختلف کسر حجمی و با توزیع لایه‌های رس با جهت‌گیری موازی را از طریق مدل المان محدود دو بعدی تنش مسطح، سه بعدی و مدل موری- تاناکا نشان می‌دهد. مقایسه نتایج حاصل از مدل دو بعدی تنش مسطح در مقایسه با مدل سه بعدی المان محدود نشان می‌دهد که مدل دو بعدی تنش مسطح نسبت به مدل سه بعدی تخمین پایین‌تری از مدول الاستیک به دست داده است. علت این پدیده می‌تواند مربوط به این موضوع باشد که نانوکامپوزیت در حالت سه بعدی با اثر سفت‌کنندگی هم‌زمان لایه‌های رس در سه جهت عمود بر هم مواجه است. در حالی که در حالت دو بعدی فقط اثر سفت‌کنندگی لایه‌ها در دو بعد اعمال می‌شود و قید حرکتی در برابر حرکت نانوکامپوزیت در راستای عمود بر نمونه تحت بارگذاری در اثر ضریب پواسون وجود ندارد. به‌طور کلی در اثر وجود ضریب پواسون در حالت سه بعدی و اثر آن در راستای عمود بر نمونه تحت بارگذاری، که با اعمال قید کرنشی در جهت بارگذاری خود را نشان می‌دهد، سفتی در حالت سه بعدی نسبت به حالت دو بعدی افزایش می‌یابد. از طرف دیگر،

محاسبه مدول الاستیک ناشی از تعداد لایه‌ها در یک سلول و ابعاد سلول، پنج مدل متفاوت با پراکندگی تصادفی و تعداد صفحات مختلف در نظر گرفته شده است. در نهایت برای محاسبه مدول الاستیک در هر کدام از مدل‌ها با توجه به رابطه ۲، از نتایج میانگین گرفته شده است. در حالتی که توزیع لایه‌های رس به صورت موازی بوده است، پراکندگی نتایج حاصل از پخش لایه‌ها، قابل چشم‌پوشی است. این پراکندگی زمانی که صفحات با نسبت ظاهری بالا در نسبت‌های حجمی زیاد داخل پلیمر با جهت‌گیری تصادفی قرار می‌گیرند زیادتر است، زیرا در این حالت همانند آنچه در حالت واقعی رخ می‌دهد، صفحات بیش‌تر به صورت دسته‌دسته و مخلوط نشده پراکنده می‌شوند. برای بررسی مشکل ناشی از ابعاد سلول نانوکامپوزیت و اثر آن بر محاسبه مدول الاستیک، برای

جدول ۳- اثر کسر حجمی رس بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت در حالت توزیع پراکنده تصادفی لایه‌ها

درصد کسر حجمی رس	مدول الاستیک بی بعد			نتایج تجربی مرجع [۲۸]
	موری- تاناکا	مدل دوبعدی	مدل سه‌بعدی	
۱	۱/۱۴	۱/۰۷۲	۱/۱۰۲	۱/۱۲۱
۳	۱/۴۰۸	۱/۱۸۱	۱/۳۴۱	۱/۴۷۳
۵	۱/۷۳	۱/۳۱۸	-	-
۱۰	۲/۵	۱/۶۱۵	-	-

کم‌تری در مقایسه با مدل موری- تاناکا محاسبه می‌شود [۳۴]. از طرف دیگر، ساز و کار افزایش مدول الاستیک در اثر افزایش نسبت ظاهری لایه‌های رس به چگونگی انتقال بار از زمینه پلیمری به لایه‌های رس نسبت داده شده است [۳۵]. تحلیل تنش و کرنش به صورت موضعی در اطراف یک لایه رس در درون زمینه پلیمر نشان داده است که بار کششی اعمالی به نانوکامپوزیت از طریق تنش‌های برشی ایجاد شده در فصل مشترک زمینه پلیمر و لایه‌های رس به لایه‌های رس منتقل می‌شود و در نتیجه افزایش نسبت ظاهری لایه‌های رس به افزایش قابلیت انتقال بار نانوکامپوزیت منجر می‌شود. لازم به ذکر است اثر استحکام‌دهی لایه‌های رس از طریق ساز و کار فوق در صورتی قابل پذیرش است که طبق تحلیل کوکس^{۴۳} از طریق مدل تاخیر برشی^{۴۴} طول لایه‌های رس از طول بحرانی l_c آن‌ها بیش‌تر باشد. طول بحرانی از رابطه زیر به دست می‌آید [۳۶]:

$$l_c = d\sigma_c^H / \tau \quad (7)$$

که d ضخامت لایه‌های رس، σ_c^H استحکام نهائی کششی لایه‌های رس و τ تنش برشی در فصل مشترک زمینه پلیمر و لایه‌های رس هستند.

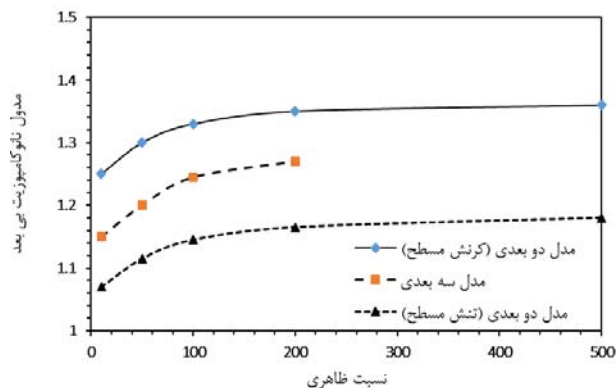
جدول ۳ نتایج محاسبه مدول الاستیک بی‌بعد شده در درصد‌های کسر حجمی مختلف و با توزیع لایه‌های رس با جهت‌گیری پراکنده تصادفی را نشان می‌دهد. در این حالت هم، نتایج مدل المان محدود سه‌بعدی به نتایج حاصل از مدل موری- تاناکا نزدیک‌تر است. لازم به ذکر است که برای مدل‌سازی سه‌بعدی المان محدود در حالتی که لایه‌های رس

مقایسه نتایج حاصل از مدل‌های المان محدود با مدل موری- تاناکا نشان می‌دهد که مدول الاستیک حاصل از مدل سه‌بعدی المان محدود به نتایج حاصل از مدل موری- تاناکا نزدیک‌تر است. هم‌چنین مشاهده می‌شود که در ده درصد کسر حجمی لایه‌های رس، تخمین مدل موری- تاناکا بالاتر از مدل سه‌بعدی المان محدود است. علت کاهش تخمین مدول الاستیک در درصد‌های بالای پرکننده در مدل سه‌بعدی المان محدود در مقایسه با مدل موری- تاناکا می‌تواند مربوط به تداخل لایه‌های رس در اثر افزایش کسر حجمی لایه‌های رس بوده باشد که این مورد در مدل موری- تاناکا مورد توجه قرار نمی‌گیرد [۳۳]. اصولاً در مدل موری- تاناکا فرض می‌شود که درصد کسر حجمی پرکننده به حدی است که از تداخل لایه‌های رس با یک‌دیگر جلوگیری می‌شود. در عمل، تداخل لایه‌های رس به دو صورت بر نسبت ظاهری آن‌ها موثر است. حالت اول در صورتی است که لایه‌های رس در راستای بعد بزرگ‌ترشان قرار بگیرند و در مجموع لایه‌ها در کنار هم، تشکیل مجموع لایه‌هایی با نسبت ظاهری بالاتر بدهند. در حالت دوم، لایه‌های رس بر روی هم در راستای ضخامت‌شان قرار می‌گیرند (حالت جاداده شده) و باعث ایجاد مجموعه لایه‌هایی می‌شوند که از نسبت ظاهری پایین‌تری در برابر تک‌لایه‌های رس برخوردار خواهد شد. از آن‌جا که در مدل المان محدود پدیده تداخل لایه‌ها به راحتی مدل می‌شود، در نتیجه در صورتی که نسبت ظاهری لایه‌ها در اثر تداخل افزایش یابد مدول الاستیک، در مدل المان محدود با تخمین بیش‌تر و در صورتی که نسبت ظاهری لایه‌ها در اثر تجمع بر روی هم کاهش یابد با تخمین

نتایج مدل‌هایی که به‌نتایج مدل حد بالای فگت^{۴۶} نزدیک‌تر باشد تخمین دقیق‌تری از مدول الاستیک به‌دست می‌دهند [۳۷].

۲-۴- اثر نسبت ظاهری لایه‌های رس

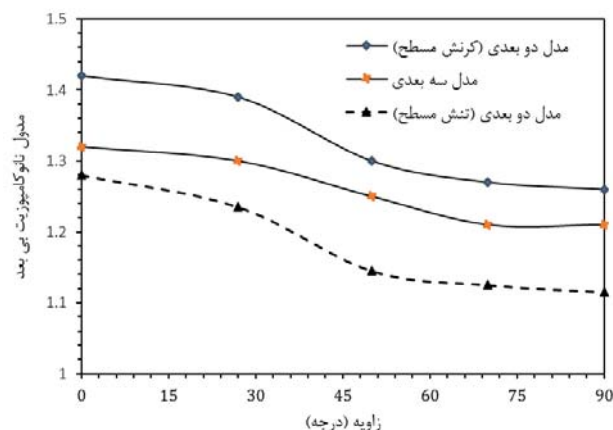
همان‌گونه که اشاره شد نسبت ظاهری لایه‌های رس از عوامل میکرومکانیکی موثر بر خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمر- رس محسوب می‌شود. طبق پژوهش‌های موجود این نسبت برای لایه‌های رس در یک نمونه نانوکامپوزیتی ثابت نیست. در واقع چون تمام لایه‌ها دارای ابعاد یکسانی نیستند، نسبت‌های ظاهری متفاوتی از ۲۰ تا ۲۰۰۰ دارند [۳۸]. این نسبت‌ها اغلب از عکس‌برداری میکروسکوپ الکترونی از نمونه‌های تجربی به‌دست آمده است [۳۹]. در این پژوهش با تغییر نسبت ظاهری صفحات رس در محدوده ۱۰ تا ۵۰۰ اثر آن بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت‌های پلیمر- رس از طریق مدل‌های المان محدود دو و سه بعدی بررسی شده است. شکل ۸ تغییرات مدول الاستیک بی‌بعد شده بر حسب نسبت ظاهری لایه‌های رس را نشان می‌دهد. نمودار شکل ۸ نشان می‌دهد که با افزایش نسبت ظاهری، مدول الاستیک افزایش می‌یابد تا این‌که به یک مقدار اشباع می‌رسد. اشباع در نسبت‌های ظاهری بالاتر از ۲۰۰ رخ می‌دهد. لازم به‌ذکر است که در ایجاد مدل سه بعدی المان محدود، مدل‌سازی نمونه‌های نانوکامپوزیت در نسبت‌های ظاهری بالاتر از ۲۰۰ به‌دلیل تداخل لایه‌ها در یکدیگر، امکان‌پذیر نبوده است. علت افزایش مدول الاستیک در برابر افزایش نسبت ظاهری لایه‌های رس، افزایش میزان سطح تماس بین پرکننده و زمینه بوده است که در نتیجه، بهبود انتقال تنش بین زمینه پلیمر و پرکننده رس را به‌دنبال داشته است. در عمل در نسبت‌های ظاهری بالا به‌علت پخش تصادفی ذرات در پلیمر و جهت‌گیری تصادفی آن‌ها حالت دسته‌دسته شدن لایه‌های رس رخ می‌دهد. پدیده دسته‌دسته شدن لایه‌ها سبب می‌شود که در برخی از قسمت‌ها، پلیمر خالص به‌صورت انباشته وجود داشته باشد و در برخی قسمت‌ها نیز لایه‌های دسته‌دسته شده به‌صورت تقویت‌کننده‌هایی با نسبت ظاهری کوچک‌تر عمل



شکل ۸- تغییرات مدول نانوکامپوزیت بی‌بعد بر حسب نسبت ظاهری لایه‌های رس

به‌صورت پراکنده تصادفی در درون زمینه پلیمر قرار داشتند به‌دلیل تداخل لایه‌های رس در یکدیگر، روند به‌کار گرفته شده برای ایجاد مدل سه‌بعدی با درصد‌های کسر حجمی بالاتر از سه درصد، قادر به مدل‌سازی نانوکامپوزیت نبوده است. به‌همین علت در نتایج جدول ۳ برای نمونه‌های نانوکامپوزیت دارای بیش از سه درصد کسر حجمی، برای مدول الاستیک نتیجه‌ای مشاهده نمی‌شود. برای بررسی درستی نتایج مدل‌سازی، نتایج تجربی موجود در مرجع شماره [۲۸] در جدول ۳ آورده شده است. همان‌گونه که در نتایج جدول ۳ مشاهده می‌شود نتایج شبیه‌سازی مدل موری- تاناکا در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی مدل المان محدود، مطابقت بیشتری با نتایج تجربی دارند.

از مقایسه نتایج تخمین مدول الاستیک نانوکامپوزیت در دو حالت لایه‌های موازی و پراکنده تصادفی در جدول‌های ۲ و ۳، مشاهده می‌شود که مدول الاستیک در حالتی که لایه‌های رس در راستای بارگذاری به‌صورت موازی قرار داشته‌اند (جدول ۲) نسبت به‌حالتی که لایه‌ها به‌صورت پراکنده تصادفی در درون زمینه قرار داشته‌اند (جدول ۳)، از مقدار بیش‌تری برخوردار بوده است. براساس تحلیل حد الاستیک هشین- استریکمن^{۴۵} در صورتی که فاز تقویت‌کننده در راستای بارگذاری قرار داشته باشد بیشترین اثر تقویت‌کنندگی را ایجاد می‌کند. به‌عبارت دیگر در صورتی که لایه‌های رس در راستای بارگذاری قرار داشته باشند بیشترین اثر تقویت‌کنندگی را دارا هستند و در این حالت



شکل ۹- تغییرات مدول نانوکامپوزیت بی بعد بر حسب زاویه لایه‌های رس نسبت به جهت بارگذاری

نمود. در این پژوهش میزان انحراف زاویه لایه‌های رس نسبت به جهت بارگذاری از صفر درجه (لایه‌ها موازی با جهت بارگذاری) تا نود درجه (لایه‌ها عمود بر جهت بارگذاری) تغییر داده شده است. همان‌گونه که در نمودار شکل ۹ مشاهده می‌شود با افزایش زاویه لایه‌های رس نسبت به جهت بارگذاری از صفر تا نود درجه، مدول الاستیک کاهش یافته است. به ترتیب بیشترین و کمترین مقدار مدول الاستیک در زوایای صفر و نود درجه رخ می‌دهد. با توجه به نتایج حاصل از اثر زاویه لایه‌های رس نسبت به جهت بارگذاری بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت، مشخص می‌شود که مدول الاستیک نانوکامپوزیت پر شده با ناپیوسته‌هایی مانند لایه‌های رس در زاویه صفر درجه، از مدلی شبیه به مدل حد بالای فگت و یا قانون مخلوط‌ها^{۴۸} و در زاویه نود درجه از مدل حد پایین روس^{۴۹} پیروی می‌کند. همان‌گونه که قبلاً ذکر شد بالابودن مدول الاستیک حاصل از مدل دو بعدی در حالت کرنش مسطح نسبت به دو مدل دیگر می‌تواند ناشی از قیود کرنشی بیش‌تر باشد.

۴-۴- اثر مدول الاستیک لایه‌های رس

مدول الاستیک لایه‌های رس تابعی از جنس، ضخامت و پیوند بین اتم‌های آن‌هاست. به‌طور کلی با توجه به ساختار بلوری لایه‌های رس، رفتار مکانیکی آن‌ها غیرهمسان‌گرد^{۵۰} است. اندازه‌گیری تجربی مدول الاستیک لایه‌های رس اگر چه غیرممکن نیست ولی به‌طور مستقیم دشوار است [۴۰]. پژوهش‌های مختلف برای انواع لایه‌های رس، مقادیر مختلف مدول الاستیک را پیشنهاد کرده‌اند. دامنه تغییرات مدول الاستیک برای انواع لایه‌های رس از ۲۰ تا ۴۰۰ گیگاپاسکال به‌صورت متغیر اعلام شده است [۴۱]. هم‌چنین، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای مدول الاستیک یک تک‌لایه رس محدود‌ده‌ای بین ۱۷۰ تا ۳۶۰ گیگاپاسکال تخمین زده‌اند [۴۲]. با توجه به مطالب مذکور، در این پژوهش، اثر تغییر مدول الاستیک لایه‌های رس از ۲۰ تا ۳۰۰ گیگاپاسکال بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت

کنند که دو علت فوق از افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت جلوگیری می‌کند. هم‌چنین از مشاهده نمودارهای موجود در شکل ۸ مشخص می‌شود که تخمین مدول الاستیک حاصل از مدل دو بعدی در حالت کرنش مسطح^{۴۷} نسبت به نتایج حاصل از مدل سه بعدی و مدل دو بعدی در حالت تنش مسطح بیش‌تر است. علت این پدیده می‌تواند این باشد که در مدل دو بعدی کرنش مسطح، به‌دلیل جلوگیری از حرکت نمونه در یکی از جهات، قید بیش‌تری بر حرکت ماده مرکب اعمال می‌شود که در نتیجه باعث افزایش مدول الاستیک می‌شود. به‌عبارت‌دیگر در حالت دو بعدی تنش مسطح و سه بعدی، حرکت ماده در همه راستاها آزاد است در حالی که در حالت دو بعدی کرنش مسطح، از حرکت ماده در یک راستا جلوگیری می‌شود که این عمل به افزایش بیش‌تر سفتی ماده منجر می‌شود.

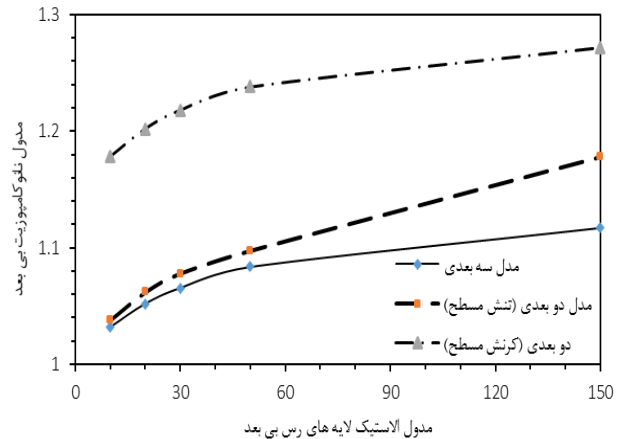
۴-۳- اثر زاویه لایه‌های رس نسبت به جهت بارگذاری

در عمل هم‌جهت شدن لایه‌های رس در زمان ساخت نمونه نانوکامپوزیت، تقریباً غیرممکن است. در نتیجه جهت‌گیری لایه‌های رس در نمونه‌های واقعی به‌صورت تصادفی است. به‌هر جهت، در برخی روش‌های ساخت نانوکامپوزیت مانند اکستروژن می‌توان تا حدی، جهت‌گیری لایه‌ها را کنترل و لایه‌های تا حدودی متمایل به جهت جریان اکستروژن ایجاد

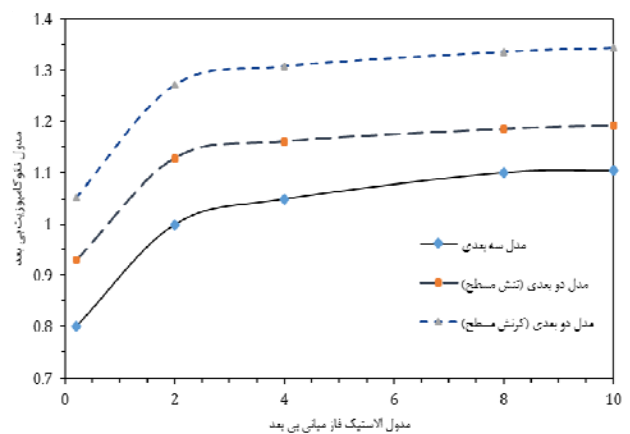
تخمین مدول الاستیک، بیش تر شده است. به طور کلی از آن جا که لایه های رس به طور مستقیم از طریق مدول الاستیک شان بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت تاثیر می گذارند، افزایش مدول الاستیک لایه های رس به افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت منجر شده است.

۴-۵- اثر مدول الاستیک فاز میانی

در اثر واکنش بین مولکول های پلیمر و لایه های رس و در مرز فیزیکی میان آن ها، فازی از یک ماده جدید تشکیل می شود که دارای خواص متفاوت با خواص پلیمر و لایه های رس است که به آن فاز میانی گفته می شود [۴۳]. خواص این ناحیه متأثر از روش های اصلاح و آماده سازی سطح لایه های رس و نوع پلیمر مورد استفاده در ساخت نانوکامپوزیت است [۴۴]. فاز میانی بر رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت های زمینه پلیمری از طریق تاثیر بر حرکت مولکول های پلیمر در ناحیه فصل مشترک خود موثر است [۴۵]. در نتیجه رفتار فاز میانی باعث تغییر رفتار تغییرشکلی نانوکامپوزیت و میزان تحمل بار آن می شود. برای بررسی اثر تغییر مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت، دامنه تغییرات مدول الاستیک فاز میانی از ۰/۲ تا ۱۰ برابر مدول الاستیک زمینه پلیمر در نظر گرفته شده است. نتایج تاثیر تغییرات مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت در نمودار شکل ۱۱ نشان داده شده است. از مشاهده نمودار شکل ۱۱ مشخص می شود که در ابتدا با افزایش مدول الاستیک فاز میانی، افزایش قابل توجهی در مدول الاستیک نانوکامپوزیت رخ می دهد. با این وجود، با افزایش بیش تر مدول الاستیک فاز میانی، از شدت افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت کاسته می شود و به یک حد اشباع رسیده است. مقادیر بالای مدول الاستیک فاز میانی باعث افزایش تردی و شکنندگی فاز میانی می شود و در نتیجه قبل از انتقال کامل بار از زمینه پلیمر به لایه های رس، فاز میانی دچار شکست ترد می شود که در عمل منجر به کاهش مدول الاستیک نانوکامپوزیت می شود. به طور کلی مدول الاستیک لایه های رس به مراتب



شکل ۱۰- نمودار تغییرات مدول نانوکامپوزیت بر حسب مدول الاستیک صفحات رس



شکل ۱۱- تغییرات مدول نانوکامپوزیت بر حسب مدول الاستیک فاز میانی

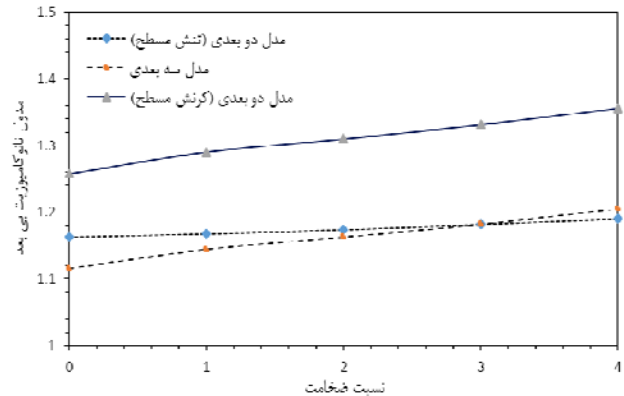
پلیمر- رس مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج تاثیر تغییر مدول الاستیک لایه های رس بر مدول نانوکامپوزیت، در نمودار شکل ۱۰ ارائه شده است. در نمودار شکل ۱۰ مشاهده می شود که با افزایش مدول الاستیک لایه های رس، مدول الاستیک نانوکامپوزیت افزایش یافته است. با مقایسه منحنی های موجود در نمودار شکل ۱۰ مشخص می شود که تخمین مدول دو بعدی در حالت کرنش مسطح نسبت به دو مدل دیگر بالاتر بوده است. همچنین، تخمین مدول های دو بعدی تنش مسطح و مدل سه بعدی المان محدود در مقادیر پایین مدول الاستیک لایه های رس، به هم نزدیک ترند ولی در مدول های بالاتر، اختلاف

میانی از صفر تا چهار برابر ضخامت لایه‌های رس در نظر گرفته شده است [۴۴]. با توجه به نتایج نمودار شکل ۱۱، در نسبت‌های بالاتر از دو مدول الاستیک نانوکامپوزیت تغییر چندانی ندارد. بر این اساس، در محدوده‌ای که مدول الاستیک فاز میانی در حد دو برابر فاز زمینه باشد، تغییر ضخامت فاز میانی اثر قابل ملاحظه‌ای بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت ندارد.

مقایسه نتایج نمودار شکل ۱۲ نشان می‌دهد که مدول دو بعدی تنش مسطح، مدول سه بعدی و مدول دو بعدی کرنش مسطح به ترتیب $\frac{2}{3}$ ، $\frac{8}{7}$ و $\frac{8}{7}$ درصد در مدول الاستیک نانوکامپوزیت افزایش نشان داده‌اند. به طور کلی، فاز میانی از دو طریق بر خواص نانوکامپوزیت‌ها موثر است که شامل تغییرات خواص در راستای فاز میانی از فاز پرکننده تا فاز زمینه و ضخامت فاز میانی است [۴۷]. در خصوص اثر تغییرات مدول الاستیک فاز میانی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت در بخش قبل نتایج به دست آمده ارائه شد. در پژوهش‌های موجود اثر ضخامت فاز میانی به دو صورت بیان شده است. حالت اول در صورتی است که سفتی فاز میانی از استحکام زمینه کم‌تر باشد و در حالت دوم، سفتی فاز میانی از سفتی فاز زمینه بیش‌تر باشد. در این خصوص پژوهش‌ها نشان داده است که در صورتی که سفتی فاز میانی از سفتی فاز زمینه کم‌تر باشد، افزایش ضخامت فاز میانی به کاهش مدول الاستیک نانوکامپوزیت منجر می‌شود و برعکس در صورتی که سفتی فاز میانی بیش‌تر از سفتی فاز زمینه باشد، افزایش ضخامت فاز میانی منجر به افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت خواهد شد [۴۸].

۴-۷- اثر ضریب پواسون فاز میانی و لایه‌های رس

جدول ۴ تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت را در برابر تغییرات ضریب پواسون فاز میانی و لایه‌های رس نشان می‌دهد. با توجه به نتایج حاصل، مشاهده می‌شود که با تغییر ضرایب پواسون لایه‌های رس و فاز میانی تغییرات ناچیزی در مدول الاستیک نانوکامپوزیت ایجاد می‌شود.



شکل ۱۲- تغییرات مدول نانوکامپوزیت بر حسب ضخامت فاز میانی

بیش‌تر از مدول الاستیک زمینه پلیمر است. در نتیجه فاز میانی وظیفه انتقال بار از زمینه به لایه‌های رس را به عهده دارد. از آنجا که نسبت ظاهری لایه‌های رس بالاست سازوکار انتقال بار از زمینه پلیمر به لایه‌های رس از طریق سطح لایه‌ها و انتقال تنش برشی صورت می‌پذیرد. در این حالت فاز میانی مانند یک رابط زمینه پلیمر را به لایه‌های رس متصل می‌کند. در نتیجه، تفاوت خواص مکانیکی فاز میانی با زمینه پلیمری از عوامل موثر بر رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت محسوب می‌شود [۴۶]. در صورتی که مدول الاستیک فاز میانی کم‌تر از مدول الاستیک زمینه پلیمر باشد، در بارهای کم، جداشدن زمینه پلیمر از لایه‌های رس به راحتی صورت می‌پذیرد و در کل مدول الاستیک نانوکامپوزیت کاهش می‌یابد. در صورتی که مدول الاستیک فاز میانی از مدول الاستیک زمینه پلیمر بیش‌تر باشد به بهبود انتقال بار به لایه‌های رس کمک می‌کند و باعث افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت می‌شود. در نهایت در صورتی که مدول الاستیک فاز میانی به مدول الاستیک لایه‌های رس نزدیک باشد، به علت افزایش شکنندگی فاز میانی در اثر وجود ترک و رشد آن، شکست زودرس نانوکامپوزیت از فاز میانی رخ می‌دهد.

۴-۶- اثر ضخامت فاز میانی

نمودار شکل ۱۲ تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت را در برابر تغییرات ضخامت فاز میانی نشان می‌دهد. ضخامت فاز

جدول ۴- اثر تغییرات ضریب پواسون فاز میانی و لایه‌های رس بر مدول الاستیک بی‌بعد نانوکامپوزیت

ضریب پواسون	اثر ضریب پواسون فاز میانی		اثر ضریب پواسون لایه‌های رس	
	مدل سه بعدی	مدل دو بعدی	مدل سه بعدی	مدل دو بعدی
۰/۲	۱/۰۷۲	۱/۱۶	۱/۰۷۲	۱/۱۶۳
۰/۴	۱/۰۷۳	۱/۱۶۲	۱/۰۷۳	۱/۱۶۳

جدول ۵- ضریب تاثیر عوامل موثر بر مدول

الاستیک نانوکامپوزیت

عوامل موثر	مقدار اسمی	ضریب تاثیر
کسر حجمی لایه‌های رس	۳	۰/۱۱۴
مدول الاستیک رس	۴۰	۰/۰۶۵
میزان انحراف لایه‌ها از جهت بارگذاری	۷۰	۰/۰۶۲۱
نسبت ظاهری لایه‌های رس	۱۰۰	۰/۰۳۶۲
ضخامت فاز میانی	۲	۰/۰۱۳
مدول الاستیک فاز میانی	۴	۰/۰۱۲۵

بیشترین تاثیر را بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت دارد. عوامل موثر بعدی، به ترتیب شامل مدول الاستیک لایه‌های رس، میزان انحراف لایه‌ها نسبت به جهت بارگذاری، نسبت ظاهری، ضخامت فاز میانی و مدول الاستیک فاز میانی است. البته باید توجه داشت که نتایج به دست آمده نشان‌دهنده بی‌اهمیت بودن فاز میانی نیست زیرا درصد حجمی ماده فاز میانی تابعی از درصد لایه‌های رس و میزان لایه‌لایه شدن آن‌ها در ماده زمینه است که از مهمترین عوامل موثر بر مدول نانوکامپوزیت به‌شمار می‌آیند. بنابراین با زیاد شدن درصد حجمی لایه‌های رس، سهم تاثیر ماده فاز میانی نیز افزایش می‌یابد.

۵- نتیجه گیری

در این پژوهش مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمر- رس با استفاده از مدل‌های المان محدود دو بعدی (حالت‌های تنش و کرنش صفحه‌ای)، سه بعدی و مدل موری- تاناکا شبیه‌سازی شد. نتایج مقایسه مدل‌های دو بعدی و سه بعدی المان محدود نشان داد که مدل دو بعدی المان محدود در حالت تنش صفحه‌ای از دقت کافی در تخمین مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمر- رس برخوردار نیست. با این وجود نتایج تخمین مدول الاستیک مدل‌های دو بعدی در حالت کرنش مسطح از نتایج تخمین توسط مدل دو بعدی در حالت تنش مسطح و مدل سه بعدی بالاتر بود. نتایج تخمین مدول الاستیک توسط مدل موری- تاناکا نشان داد که این مدل دارای دقت مناسبی برای تخمین مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمر- رس در درصد‌های کسر حجمی پایین است. طبق نتایج به دست آمده از مطالعه عاملی مدل المان محدود، درصد حجمی لایه‌های رس

در نتیجه اثر ضریب پواسون فاز میانی و صفحات رس بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت قابل چشم‌پوشی است.

۴-۸- ضریب تاثیر عوامل مختلف بر روی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

با توجه به مطالعه اثر تغییر عوامل مختلف میکرومکانیکی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت مورد نظر در بخش‌های گذشته، درجه کمی تاثیر هر کدام از عوامل می‌تواند میزان اهمیت آن‌ها را بیان نماید. در این بخش، ضریب تاثیر هر یک از عوامل ریزساختاری بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت به دست آمده است. ضریب تاثیر به صورت درصد افزایش مدول الاستیک نانوکامپوزیت در اثر افزایش ده درصدی هر یک از عوامل ریزساختاری حول مقدار اسمی آن تعریف شده است [۴۴]. نتایج مربوط به مقادیر ضریب تاثیر در جدول ۵ نشان داده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده کسر حجمی لایه‌های رس

مؤثرترین عامل ریزساختاری برای کنترل مدول الاستیک نانوکامپوزیت بوده است. هم‌چنین، ضخامت و مدول الاستیک

فاز میانی، کمترین اثر را بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت دارا هستند.

واژه نامه

- | | | |
|---------------------------------|---|--|
| 1. polymer- clay nanocomposites | 19. self- consistent | 36. autocad |
| 2. barrier properties | 20. Lielens's model | 37. macro |
| 3. gas permeability | 21. effective particle | 38. ansys |
| 4. thermoset | 22. exfoliation ratio | 39. shell |
| 5. epoxy | 23. equivalent inclusion | 40. solid |
| 6. thermoplastic | 24. Eshelby | 41. merge |
| 7. Nylon 6 | 25. effective elastic properties | 42. plane stress |
| 8. Hectorite | 26. isotropic | 43. Cox |
| 9. Montmorillonite | 27. Tandon & Weng | 44. shear- lag analysis |
| 10. synthetic mica | 28. Eshelby's tensor | 45. Hashin-Shtrikman bounding elastic analysis |
| 11. filler | 29. Lamé constants | 46. upper bound Voigt model |
| 12. aspect ratio | 30. orthotropic | 47. plane strain |
| 13. phase separated | 31. transversely isotropic | 48. rule of mixture |
| 14. intercalated | 32. effective bulk modulus | 49. lower bound Reuss model |
| 15. exfoliated | 33. effective shear modulus | 50. anisotropic |
| 16. interphase | 34. representative volume element (RVE) | |
| 17. Halpin-Tsai | 35. Matlab | |
| 18. Mori-Tanaka | | |

مراجع

1. Beall, G.W., and Powell, C.E., *Fundamentals of Polymer-Clay Nanocomposites*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
2. Zhang, Z. and Chen, D.L., "Consideration of Orowan Strengthening Effect in Particulate-Reinforced Metal Matrix Nanocomposites: a Model for Predicting Their Yield Strength", *Scripta Materialia*, Vol. 54, pp. 1321-1326, 2006.
3. Ajayan, P.M., Schadler, L.S. and Braun, P.V., *Nanocomposite Science and Technology*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, Germany, 2003.
4. Camargo, P.H.C., Satyanarayana, K.G. and Wypych, F., "Nanocomposites: Synthesis, Structure, Properties and New Application Opportunities", *Materials Research*, Vol. 12, pp. 1-39, 2009.
5. Maksimov, R.D., Gaidukov, S., Zicans, J. and Jansons, J., "Moisture Permeability Polymer Nanocomposite Containing Unmodified Clay", *Mechanics of Composite Materials*, Vol. 44, pp. 505-514, 2008.
6. Kojima, Y., Fukumori, K., Usuki, A., Okada, A. and Kurauchi, T., "Gas Permeabilities in Rubber-Clay Hybrid", *Journal of Materials Science Letters*, Vol. 12, pp. 889-890, 1993.
7. Russo, G.M., Nicolais, V., Di Maio, Montesano, L., S. and Incarnato, L., "Rheological and Mechanical Properties of Nylon 6 Nanocomposites Submitted to Reprocessing with Single and Twin Screw Extruders", *Polymer Degradation and Stability*, Vol. 92, pp. 1925-1933, 2007.
8. Pesetskii, S.S., Bogdanovich, S.P. and Myshkin, N.K., "Tribological Behavior of Nanocomposites Produced by the Dispersion of Nanofillers in Polymer Melts", *Journal of Friction and Wear*, Vol. 28, pp. 457-475, 2007.
9. Wang, J., Du, J., Zhu, J. and Wilkie, C. A., "An XPS Study of the Thermal Degradation and Flame Retardant Mechanism of Polystyrene-Clay Nanocomposites," *Polymer Degradation and Stability*, Vol. 77, pp. 249-252, 2002.
10. Hackman, I. and Hollaway, L., "Epoxy-Layered Silicate Nanocomposites in Civil Engineering", *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, Vol. 37, pp. 1161-1170, 2006.
11. Srinath, G. and Gnanamoorthy, R., "Effect of Nanoclay Reinforcement on Tensile and Tribo Behaviour of Nylon 6", *Journal of Materials Science*, Vol. 40, pp. 2897-2901, 2005.
12. Ray, S.S., *Clay-Containing Polymer Nanocomposites from Fundamentals to Real Applications*, Elsevier, Oxford, 2013.
13. Gao, F., "Clay/Polymer Composites: the Story", *Materials Today*, Vol. 7, pp. 50-55, 2004.

14. Ray, S.S. and Okamoto, M., "Polymer/Layered Silicate Nanocomposites: a Review from Preparation to Processing", *Progress in Polymer Science*, Vol. 28, pp. 1539–1641, 2003.
 15. Utracki, L.A., *Clay-Containing Polymeric Nanocomposites*, Vol. 1-2, Rapra Technology Limited, UK, 2004.
 16. Zeng, Q.H., Yu, A.B. and Lu, G.Q., "Multiscale Modeling and Simulation of Polymer Nanocomposites", *Progress in Polymer Science*, Vol. 33, pp. 191–269, 2008.
 17. Sheng, N., Boyce, M.C., Parks, D.M., Rutledge, G.C., Abes, J.I. and Cohen, R.E., "Multiscale Micromechanical Modeling of Polymer/Clay Nanocomposites and the Effective Clay Particle", *Polymer*, Vol. 45, pp. 487–506, 2004.
 18. Brune, D. and Bicerano, A.J., "Micromechanics of Nanocomposites: Comparison of Tensile and Compressive Elastic Moduli, and Prediction of Effects of Incomplete Exfoliation and Imperfect Alignment on Modulus", *Polymer*, Vol. 43, pp. 369–38, 2002.
 19. Yung, K.C., Wang, J. and Yue, T.M., "Modeling Young's Modulus of Polymer-Layered Silicate Nanocomposites Using a Modified Halpin-Tsai Micromechanical Model", *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, Vol. 25, pp. 847-861, 2006.
 20. Mortazavi, B., Baniassadi, M., Bardon, J. and Ahzi, S., "Modeling of Two-Phase Random Composite Materials by Finite Element, Mori-Tanaka and Strong Contrast Methods", *Composites: Part B*, Vol. 45, pp. 1117–1125, 2013.
 21. Anoukou, K., Zaïri, F., Naït-Abdelaziz, M., Zaoui, A., Messenger, T. and Gloaguen, J.M., "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.
 22. Pisano, C., Priolo, P. and Figiel, L., "Prediction of Strength in Intercalated Epoxy-Clay Nanocomposites via Finite Element Modelling", *Computational Materials Science*, Vol. 55, pp. 10–16, 2012.
 23. Pahlavanpour, M., Moussaddy, H., Ghossein, E., Hubert, P. and Lévesque, M., "Prediction of Elastic Properties in Polymer-Clay Nanocomposites Analytical Homogenization Methods and 3D Finite Element Modeling", *Computational Materials Science*, Vol. 79, pp. 206–215, 2013.
 24. Pahlavanpour, M., Hubert, P. and Lévesque, M., "Numerical and Analytical Modeling of the Stiffness of Polymer-Clay Nanocomposites with Aligned Particles One- and Two-Step Methods", *Computational Materials Science*, Vol. 82, pp. 122–130, 2014.
 25. Zare-Shahabadi, A., Shokuhfar, A., Ebrahimi-Nejad, S., Arjmand, M. and Termeh, M., "Modeling the Stiffness of Polymer Layered Silicate Nanocomposites- More Accurate Predictions with Consideration of Exfoliation Ratio as a Function of Filler Content", *Polymer Testing*, Vol. 30, pp. 408–414, 2011.
 26. Qu, J. and Cherkaoui, M., *Fundamentals of Micromechanics of Solids*, John Wiley, New Jersey, 2006.
 27. Tucker, C.L. and Liang, E., "Stiffness Predictions for Unidirectional Short-Fiber Composites: Review and Evaluation", *Composites Science and Technology*, Vol. 59, pp. 655-671, 1999.
 28. Luo, J.J. and Daniel, I.M., "Characterization and Modeling of Mechanical Behavior of Polymer/Clay Nanocomposites", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, pp. 1607-1616, 2003.
 29. Tandon, G.P. and Weng, G.J., "The Effect of Aspect Ratio of Inclusions on the Elastic Properties of Unidirectionally Aligned Composites", *Polymer Composites*, Vol. 5, pp. 327-333, 1984.
 30. Tandon, G.P. and Weng, G.J., "Average Stress in the Matrix and Effective Moduli of Randomly Oriented Composites", *Composites Science and Technology*, Vol. 27, pp. 111-132, 1986.
 31. Lai, W.M., Rubin, D. and Krempf, E., *Introduction to Continuum Mechanics*, Elsevier, Oxford, UK, 2010.
۳۲. محمودی میمند، م.، "شبییه‌سازی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری تقویت‌شده با ناپیوسته‌ها"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ۱۳۹۲.
33. Hbaieb, K., Wang, Q.X., Chia, Y.H.J. and Cotterell, B., "Modelling Stiffness of Polymer/Clay Nanocomposites", *Polymer*, Vol. 48, pp. 901-909, 2007.
 34. Pisano, C. and Figiel, L., "Modelling of Morphology Evolution and Macroscopic Behaviour of Intercalated PET-Clay Nanocomposites during Semi-Solid State Processing", *Composites Science and Technology*, Vol. 75, pp. 35–41, 2013.
 35. Sheng, N., "Micro/Nanoscale Modeling of Anisotropic Mechanical Properties of Polymer/Layered-Silicate Nanocomposites", M.Sc. Thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, 2002.
 36. Shia, D., Hui, C.Y., Burnside, S.D. and Giannelis, E.P., "An Interface Model for the Prediction of Young's Modulus of Layered Silicate-Elastomer Nanocomposites", *Polymer Composites*, Vol. 19, pp. 608-617, 1998.

37. Jones, R.M., *Mechanics of Composite Materials*, Taylor and Francis, London, UK, 1999.
38. Alexandre, M. and Dubois, P., "Polymer-Layered Silicate Nanocomposites: Preparation, Properties and Uses of a New Class of Materials", *Materials Science and Engineering R*, Vol. 28, pp. 1-63, 2000.
39. Bharadwaj, R.K., Mehrabi, A.R., Hamilton, C., Trujillo, C., Murga, M., Fan, R., Chavira, A. and Thompson, A.K., "Structure-Property Relationships in Cross-Linked Polyester-Clay Nanocomposites", *Polymer*, Vol. 43, pp. 3699-705, 2002.
40. Beall, G.W. and Powell, C.E., *Fundamentals of Polymer-Clay Nanocomposites*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2011.
41. Chen, B. and Evans, J.R.G., "Elastic Moduli of Clay Platelets", *Scripta Materialia*, Vol. 54, pp. 1581-1585, 2006.
42. Suter, J.L., Coveney, P.V., Greenwell, H.C. and Thyveetil, M.A., "Large-Scale Molecular Dynamics Study of Montmorillonite Clay: Emergence of Undulatory Fluctuations and Determination of Material Properties", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 111, pp. 8248-8259, 2007.
43. Yasmin, A., Luo, J.J., Abot, J.L. And Daniel, I.M., "Mechanical and Thermal Behavior of Clay/Epoxy Nanocomposites", *Composites Science and Technology*, Vol. 66, pp. 2415-2422, 2006.
44. Fertig, R.S. and Garnich, M.R., "Influence of Constituent Properties and Microstructural Parameters on the Tensile Modulus of a Polymer/Clay Nanocomposite", *Composites Science and Technology*, Vol. 64, pp. 2577-2588, 2004.
45. Chen, Y., Chia, J.Y.H., Su, Z.C., Tay, T.E. and Tan, V.B.C., "Mechanical Characterization of Interfaces in Epoxy-Clay Nanocomposites by Molecular Simulations", *Polymer*, Vol. 54, pp. 766-773, 2013.
46. Zhu, L. and Narh, K.A., "Numerical Simulation of the Tensile Modulus of Nanoclay-Filled Polymer Composites", *Journal of Polymer Science: Part B: Polymer Physics*, Vol. 42, pp. 2391-2406, 2004.
47. Sevostianov, I. and Kachanov, M., "Effect of Interphase Layers on the Overall Elastic and Conductive Properties of Matrix Composites. Applications to Nanosize Inclusion", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, pp. 1304-1315, 2007.
48. Masud, M.A.A. and Masud, A.K.M., "Effect of Interphase Characteristic and Property on Axial Modulus of Carbon Nanotube Based Composites", *Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 41, pp. 15-24, 2010.

