

بررسی یک مدل رئولوژیکی برای آمیخته‌های پلیمری امتزاج‌پذیر و ارزیابی آن با داده‌های تجربی

Investigation of a Rheological Model for Miscible Polymer Blends and Its Evaluation with Experimental Data

حسن اسلامی^{۱*}، احمد رضائی سعادت‌آبادی^۲، حسین علی خنکدار سنگدهی^۱

۱- تهران، پژوهشگاه پلیمر ایران، صندوق‌پستی ۱۴۹۶۵/۱۵۹

۲- تهران، دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی، صندوق‌پستی ۱۱۳۶۵/۸۶۳۹

دریافت: ۸۰/۹/۱۴، پذیرش: ۸۰/۱۱/۱۷

چکیده

در این پژوهش، یک مدل رئولوژیکی برای آمیخته‌های پلیمری امتزاج‌پذیر با استفاده از روش عمومی بوسون- براکت بررسی شده است. شرط محدود کننده مدل این است که در مینان تانسور صورتبندی برابر مقدار ثابت است. فرمولبندی کلی با استفاده از یک تانسور تحرک‌پذیری اصلاح شده و یک تابع انرژی، که تابعی از تانسور صورتبندی است، معرفی شده است. تابع انرژی استفاده شده در این مدلسازی از نوع هوکین است. پیش‌بینی مدل برای خواص توابع ماده در جریان برشی در آزمایشهای آغاز، آسودگی و جریان برشی حالت پایدار بررسی و مورد تحلیل قرار گرفته است. این مدل می‌تواند خصوصیات مختلف توابع ماده از جمله گرانیوی، ضرایب اولین و دومین اختلاف تنشهای نرمال را پیش‌بینی کند. همچنین، پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آمیخته امتزاج‌پذیر HDPE/LDPE مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: مدلسازی، تانسور، آمیخته‌های پلیمری، تابع انرژی، تحرک‌پذیری

Key Words: modeling, tensor, polymer blends, energy function, mobility

مقدمه

رفتار تنش، تغییر شکل و سرعت تغییر شکل در پلیمرهاست. برای مدل کردن رفتار سیالات ویسکوالاستیک، روشهای متفاوتی توسعه یافته است که از آن جمله می‌توان مدل‌های ویسکوالاستیک خطی و غیرخطی را نام برد. در مورد مدل‌های ویسکوالاستیک خطی می‌توان از مدل‌های ماکسول و جنفری یاد کرد که این مدل‌ها به دلیل محدودیتهایی که دارند، از جمله اینکه فقط جوابگوی

مطالعه رفتار پلیمرها در جریانهای مختلف در فرایندهای شکل‌دهی و انتقال سیالات پلیمری نیاز به روابط ریاضی حاکم بر رفتار سیال دارد. بیان رفتار رئولوژیکی پلیمرها به صورت روابط ریاضی، مدلسازی رفتار پلیمر نامیده می‌شود. در واقع، مدلسازی یافتن رابطه‌ای ریاضی بین

*مسئول مکاتبات، پیام‌نگار: H.Eslami@proxy.ipi.ac.ir

گسترش یافته بدین منظور روش عمومی پواسون - براکت است [۸،۹]. براساس روش یاد شده متغیر دینامیکی داخلی سیستم $F(u, c, s)$ تابعی از چگالی اندازه حرکت u ، تانسور صورتبندی c و آنتروپی سیستم s است، که تغییرات آن با زمان توسط معادلی کلی زیر بیان می‌شود [۱۰،۱۱].

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} \quad (2)$$

در معادله فوق H نشان دهنده هامیلتونی سیستم و $\{ \dots \}$ نشان دهنده براکت عمومی است، که در بردارنده فرایندهای برگشت‌پذیر و برگشت‌ناپذیر است. براکت مذکور به دو براکت به صورت زیر تقسیم می‌شود [۸،۱۰،۱۱].

$$\{F, H\} \equiv \{F, H\} + [F, H] \quad (3)$$

در معادله ۳، $\{ \dots \}$ بیانگر براکت پواسون و $[\dots]$ نشانگر براکت اتلاف است، که برای سیالات ویسکوالاستیک تراکم‌ناپذیر بترتیب با معادلات زیر بیان می‌شوند [۸،۱۰ - ۱۲].

$$\begin{aligned} \{F, H\} = & - \int_{\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial M_{\gamma}} \nabla_{\beta} \left(\frac{\partial H}{\partial M_{\beta}} M_{\gamma} \right) - \frac{\partial H}{\partial M_{\gamma}} \nabla_{\beta} \left(\frac{\partial F}{\partial M_{\beta}} M_{\gamma} \right) \right] d^3x \\ & - \int_{\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\gamma} \left(c_{\alpha\beta} \frac{\partial H}{\partial M_{\gamma}} \right) - \frac{\partial H}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\gamma} \left(c_{\alpha\beta} \frac{\partial F}{\partial M_{\gamma}} \right) \right] d^3x \\ & - \int_{\Omega} c_{\gamma\alpha} \left[\frac{\partial H}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\gamma} \left(\frac{\partial F}{\partial M_{\beta}} \right) - \frac{\partial F}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\gamma} \left(\frac{\partial H}{\partial M_{\beta}} \right) \right] d^3x \\ & - \int_{\Omega} c_{\gamma\beta} \left[\frac{\partial H}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\gamma} \left(\frac{\partial F}{\partial M_{\alpha}} \right) - \frac{\partial F}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\gamma} \left(\frac{\partial H}{\partial M_{\alpha}} \right) \right] d^3x \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} [F, H] = & - \int_{\Omega} \Lambda_{\alpha\beta\gamma\epsilon} \frac{\partial F}{\partial c_{\alpha\beta}} \frac{\partial H}{\partial c_{\gamma\epsilon}} d^3x \\ & - \int_{\Omega} \beta_{\alpha\beta\gamma\epsilon\eta\nu} \nabla_{\gamma} \frac{\partial F}{\partial c_{\alpha\beta}} \nabla_{\nu} \frac{\partial H}{\partial c_{\epsilon\eta}} d^3x \\ & - \int_{\Omega} Q_{\alpha\beta\gamma\epsilon} \nabla_{\alpha} \frac{\partial F}{\partial M_{\beta}} \nabla_{\gamma} \frac{\partial H}{\partial M_{\epsilon}} d^3x \\ & - \int_{\Omega} \Sigma_{\alpha\beta\gamma\epsilon} \left[\nabla_{\alpha} \frac{\partial F}{\partial M_{\beta}} \frac{\partial H}{\partial c_{\gamma\alpha}} - \nabla_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial M_{\beta}} \frac{\partial F}{\partial c_{\gamma\alpha}} \right] d^3x \end{aligned} \quad (5)$$

تغییر شکلهای کوچک‌اند، برای فرایندهای پلیمری با تغییر شکل بینهایت قابل استفاده نیستند [۱]. در مورد مدل‌های ویسکوالاستیک غیرخطی می‌توان مدل‌های از نوع دیفرانسیلی و انتگرالی و مدل‌های از نوع صورتبندی (conformation) نام برد. بحث در مورد مدل‌های دیفرانسیلی و انتگرالی خارج از حوصله این مقاله است. اما مدل‌های از نوع صورتبندی به نوبه خود می‌توانند به دو دسته زیر تقسیم شوند:

- مدل‌هایی که در آنها طول زنجیر پلیمری ثابت فرض می‌شود و
- مدل‌هایی که در آنها حجم زنجیر پلیمری ثابت فرض می‌شود.
در این نوع مدل‌ها، زنجیرها و حالات قرار گرفتن آنها به وسیله تابع توزیع فضای پیکربندی (configuration) مشخص می‌شود. اگر تابع توزیع فضای پیکربندی را با ψ و فضای صورتبندی را با c نشان دهیم، می‌توان گفت که فضای صورتبندی همان دوم تابع توزیع فضای پیکربندی است و رابطه ریاضی زیر برای آن برقرار است [۲-۴].

$$c_{\alpha\beta} = \int R_{\alpha} R_{\beta} \psi(R) dR \quad (1)$$

اگر c نشانگر آرایش زنجیرهای مولکولی باشد، وقتی trc ثابت باشد (منظور از trc مجموع عناصر روی قطر اصلی ماتریس صورتبندی است)، می‌توان گفت که طول زنجیرهای پلیمری در خلال تغییر شکل سیال ثابت می‌ماند. این مدل، مدل طول زنجیر پلیمری ثابت نامیده می‌شود [۵].

در صورتی که در میان ماتریس صورتبندی ثابت باشد، می‌توان گفت که حجم زنجیرهای پلیمری در خلال تغییر شکل سیال ثابت می‌ماند. این مدل، به مدل حجم ثابت (volume-preserving) یا مدل شبه لیانوف (leanov-like) مشهور است [۶]. از میان نمونه کارهایی که در زمینه مدل حجم ثابت ارائه شده است می‌توان به مدل FENE-P و مدل‌های از نوع انرژی هوکن اشاره کرد [۷]. در این پژوهش، مدلی برای پلیمرهای امتراح‌پذیر از نوع حجم ثابت برای پیش‌بینی رفتارهای رئولوژیکی آنها توسعه داده شده است.

اساس نظری

مدلسازی جریان سیالات تراکم‌ناپذیر در جریانهای مختلف نیازمند معادلاتی است که بتواند رفتار سیالات را در جریانهای مختلف گذرا و دائمی در شکلهای هندسی موردنظر پیش‌بینی کند. برای سیالات نیوتنی این امر با بکارگیری رابطه خطی موجود بین تنش و سرعت تغییر شکل امکان‌پذیر است، اما عدم وجود یک معادله خاص که بتواند بدرستی رفتار بین تنش و سرعت تغییر شکل را برای سیالات ویسکوالاستیک مختلف پیش‌بینی کند، باعث شده است که معادلات مختلفی با استفاده از روشهای متفاوت برای این منظور گسترش یابند [۸، ۱]. یکی از روشهای

آرایش قطرات در مخلوطهای پلیمری یا حتی تغییر شکل کلی سیستم نام برد، مفید است.

در مورد مدلهایی که در آنها تانسور صورتبندی به عنوان متغیر ساختاری بکار می‌رود، در صورتی که دترمینان c برابر با مقدار ثابت به عنوان یک شرط در نظر گرفته شود، مدل حاصل حجم ثابت نامیده می‌شود [۱۲]. در این حالت، سیال متشکل از قطراتی در نظر گرفته می‌شود که با وجود این شرط، حجم قطرات در خلال هرگونه تغییر شکل ثابت باقی می‌ماند.

تعیین پارامترهای ϕ و λ به نحوی که دترمینان c ثابت باشد مشکل است، در صورتی که شرایط مدل به گونه زیر اصلاح گردد به ازای هر انتخابی برای هر یک از این دو متغیر، شرط دترمینان c ثابت، برقرار است [۹]:

$$\lambda: \frac{\partial \phi}{\partial c} = \lambda^1: \frac{\partial \phi}{\partial c} - \frac{1}{\gamma} \text{tr} [c^{-1} \cdot \lambda^1: \frac{\partial \phi}{\partial c}] c \quad (10)$$

بنابراین، امکان توسعه حجم وسیعی از مدل‌های حجم ثابت براحتی بوجود می‌آید. مدل بالا با انتخابی مناسب برای تابع انرژی سیستم ϕ و تانسور تحرک پذیری λ^1 قابل استفاده است.

برای تعیین تانسور تحرک پذیری، بریس و ادواردز یک عبارت کلی را به صورت زیر ارائه داده‌اند [۸]:

$$\begin{aligned} \lambda^1: c_{\beta\gamma\epsilon} = & a_1(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\epsilon} + a_2(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon}\delta_{\beta\gamma})) + a_3(c_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\epsilon} + \\ & \delta_{\alpha\beta}c_{\gamma\epsilon}) + a_4(c_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\epsilon} + c_{\alpha\epsilon}\delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma}c_{\beta\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon}c_{\beta\gamma}) + \\ & a_5c_{\beta\epsilon}c_{\gamma\epsilon} + a_6(c_{\alpha\gamma}c_{\beta\epsilon} + c_{\alpha\epsilon}\delta_{\beta\gamma}) + a_7(c_{\alpha\mu}c_{\mu\beta}\delta_{\gamma\epsilon} + \\ & \delta_{\alpha\beta}c_{\gamma\mu}c_{\mu\epsilon} + a_8(c_{\alpha\mu}c_{\mu\gamma}\delta_{\beta\epsilon} + c_{\alpha\mu}c_{\mu\epsilon}\delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma}c_{\beta\mu}c_{\mu\epsilon} + \\ & \delta_{\alpha\epsilon}c_{\beta\mu}c_{\mu\gamma} + a_9(c_{\alpha\mu}c_{\mu\beta}c_{\gamma\epsilon} + c_{\alpha\beta}c_{\gamma\mu}c_{\mu\epsilon}) + a_{10}(c_{\alpha\mu}c_{\mu\gamma}c_{\beta\epsilon} \\ & + c_{\alpha\mu}c_{\mu\epsilon}c_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma}c_{\beta\mu}c_{\mu\epsilon} + c_{\alpha\epsilon}c_{\beta\mu}c_{\mu\gamma}) + a_{11}c_{\alpha\eta}c_{\eta\beta}c_{\gamma\mu}c_{\mu\epsilon} \\ & + a_{12}(c_{\alpha\eta}c_{\eta\gamma}c_{\beta\mu}c_{\mu\epsilon} + c_{\alpha\eta}c_{\eta\epsilon}c_{\beta\mu}c_{\mu\gamma}) \end{aligned} \quad (11)$$

بررسی مدل برای آمیخته‌های پلیمری امتزاج پذیر

برای بررسی یک مدل از نوع حجم ثابت برای آمیخته‌های پلیمری امتزاج پذیر، توابع انرژی هر یک از اجزا به صورت زیر بیان می‌شود [۹]:

$$\Phi_i = \frac{\lambda_i}{\gamma} \left[\text{tr} \left(\frac{\delta - c_i^{-1}}{\gamma} \right) \right]^2 + M_i \left[u \left(\frac{\delta - c_i^{-1}}{\gamma} \right) \right]^2 \quad (12)$$

در اثر اختلاط آمیخته پلیمری دو جزئی، یک جمله به تابع انرژی سیستم اضافه می‌شود، این جمله که به تابع انرژی اثر اختلاط معروف است به صورت زیر بدست آمده است:

در معادله‌های ارائه شده M اندازه حرکت ذرات و c معرف تانسور صورتبندی است. انتگرال اول در معادله آخر نشان دهنده پدیده‌های آسودگی در سیالات ویسکوالاستیک است، از این جهت λ اساساً معکوس زمان استراحت ذرات تشکیل دهنده سیستم است. انتگرال دوم تاثیر نفوذ انتقالی غیر ایزوتروپ را بیان می‌کند که معمولاً برای سیالات ویسکوالاستیک در نظر گرفته نمی‌شود، بنابراین β صفر فرض می‌شود. سومین انتگرال نشان دهنده اتلاف ویسکوز است، که متناسب با ماتریس غیر ایزوتروپ گرادیان Q است. آخرین انتگرال نشان دهنده تاثیرات اضافی بین گرادیان سرعت و تانسور صورتبندی است [۵، ۱۰].

با استفاده از معادلات ذکر شده، معادلات مربوط به تغییرات تانسور صورتبندی در سیالات ویسکوالاستیک با زمان و تغییرات تانسور تنش σ برترتیب به صورت زیر بیان می‌شود [۸]:

$$\frac{\partial c_{\alpha\beta}}{\partial t} = -\rho v_\gamma \nabla_\gamma c_{\alpha\beta} + c_{\alpha\gamma} \nabla_\gamma v_\beta + c_{\beta\gamma} \nabla_\gamma v_\alpha - \lambda_{\alpha\beta\gamma\epsilon} : \quad (6)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial c_{\gamma\epsilon}} + L_{\alpha\beta\gamma\epsilon} \Delta_\gamma v_\epsilon$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = Q_{\alpha\beta\gamma\epsilon} \nabla_\gamma v_\epsilon + \gamma c_{\beta\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial c_{\alpha\gamma}} + \gamma L_{\alpha\beta\gamma\epsilon} \frac{\partial \lambda}{\partial c_{\gamma\epsilon}} \quad (7)$$

در معادلات بالا λ تابع انرژی آزاد هلمولتز و ϕ انرژی کل سیستم است که به هامیلتونی سیستم ارتباط دارند. این معادلات می‌توانند برای مدل‌سازی اکثر سیالات ویسکوالاستیک به عنوان مبنا قرار گیرند و می‌توان با تغییر تانسور صورتبندی، تغییر هامیلتونی سیستم و تغییر عملگرهای L ، Q و λ مدل‌های مختلفی را ارائه کرد.

با فرض اینکه دو تانسور Q و L برای سیستم سیالات ویسکوالاستیک صفر در نظر گرفته شوند، معادلات ۶ و ۷ به صورت زیر بازنویسی می‌شوند [۹]:

$$\frac{\partial c_{\alpha\beta}}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} (\dot{\gamma} : c + c : \dot{\gamma})_{\alpha\beta} - \frac{1}{\gamma} (\omega : c - c : \omega)_{\alpha\beta} - \lambda_{\alpha\beta\gamma\epsilon} : \frac{\partial \phi}{\partial c_{\gamma\epsilon}} \quad (8)$$

$$\sigma = -\gamma c_{\alpha\beta} \frac{\partial \phi}{\partial c_{\alpha\beta}} \quad (9)$$

در معادلات بالا $\dot{\gamma}$ تانسور شدت برش، c تانسور صورتبندی، ω تانسور سرعت برش، λ تانسور تحرک پذیری، ϕ انرژی کل سیستم و σ تانسور تنش‌اند.

نخبره نشان می‌دهد که علاوه بر شرایط مورد نیاز در استخراج معادلات بالا، اعمال بعضی از قیود بر چگونگی تغییرات تانسور صورتبندی، که از آن می‌توان بنابر شرایط کاربردی تفاسیر متفاوتی چون آرایش میکروسکوپی درشت مولکولهای موجود در سیستم،

تمام معادلات حاصل اعم از معادلات دیفرانسیل ۱۵ بر حسب تانسورهای c_1 و c_2 اند. برای حل معادلات بالا برنامه کامپیوتری با استفاده از نرم افزار Mathematica با قابلیت تغییر تابع انرژی به شکل دلخواه نوشته شده است.

بعد از حل دسته معادلات دیفرانسیل (به روش رانج کوتای مرتبه چهار) و بدست آوردن عناصر تانسور صورتبندی در زمانهای مختلف برای آزمایشهای آغاز (Start-up) و آسودگی (Relaxation) خواص توابع ماده به صورت زیر بدست می آیند:

$$\eta^{\pm}(\omega\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}} \quad (20)$$

$$\psi_1^{\pm}(\omega\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\dot{\gamma}^2} \quad (21)$$

$$\psi_2^{\pm}(\omega\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\dot{\gamma}^2} \quad (22)$$

در روابط بالا σ_i اجزای تانسور تنش اند که از معادله ۱۹ محاسبه می شوند. همچنین η ، ψ_1 و ψ_2 به ترتیب گرانیوی و اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال اند. علامت - نشان دهنده خواص تابع ماده در آزمایش آغاز و علامت + نشان دهنده خواص تابع ماده در آزمایش آسودگی است.

در جریان برشی حالت پایدار گرانیوی و اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال با معادلات زیر بیان می شوند:

$$\eta(\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}} \quad (23)$$

$$\psi_1(\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\dot{\gamma}^2} \quad (24)$$

$$\psi_2(\dot{\gamma}) = -\frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\dot{\gamma}^2} \quad (25)$$

در نتیجه، منحنیهای گرانیوی و اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال بر حسب سرعت برش بدست می آیند، که منحنوی رفتار رئولوژیکی مواد پلیمری را بیان می کند.

نتایج و بحث

پیش بینی مدل

شکلهای ۱ تا ۳ ترتیب اثر سرعت برش بر گرانیوی و اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال را برای $M_1 = 100$ ، $M_2 = 100$ ، $M_{12} = 100$ ، $\lambda_1 = 100$ ، $\lambda_2 = 100$ ، $\lambda_{12} = 100$ و $\alpha = 0.0001$ نشان می دهد.

$$\Phi_{1,2} = \lambda_{1,2} \left[\alpha \left(\frac{\delta - c_1^{-1}}{\dot{\gamma}} \right) \right] + M_{1,2} \left[\alpha \left(\frac{\delta - c_1^{-1}}{\dot{\gamma}} \right) \right] \quad (13)$$

از طرفی، برای یک آمیخته پلیمری دو جزئی تابع کلی انرژی به صورت زیر بدست آمده است:

$$\Phi = \alpha^2 \Phi_1 + (1 - \alpha)^2 \Phi_2 + 2\alpha(1 - \alpha) \Phi_{1,2} \quad (14)$$

در معادلات بالا M_i ، λ_i و $M_{1,2}$ پارامترهای مدل اند که برای هر آمیخته پلیمری امتزاج پذیر بدست می آیند. پارامترهای M و λ به ترتیب به جرم مولکولی پلیمر و زمان آسودگی پلیمر ارتباط دارند.

روش حل معادلات

در توسعه مدل برای آمیخته های پلیمری امتزاج پذیر، معادله دیفرانسیل ۸ باید برای هر یک از اجزای ۱ و ۲ بصورت همزمان حل شود. بنابراین معادله فوق برای هر جزء به صورت زیر بیان می شود:

$$\frac{\delta c_i}{\delta t} = \frac{1}{\dot{\gamma}} (\dot{\gamma} c_i + c_i \dot{\gamma}) - \frac{1}{\dot{\gamma}} (\omega_i c_i - c_i \omega_i) \quad \text{با } \frac{\delta \Phi}{\delta c_i} \quad i=1,2 \quad (15)$$

در معادله بالا عبارت δ_i برای هر یک از اجزا از معادله ۱۰ بدست می آید. معادلات دیفرانسیل بالا که یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی است، برای یک جریان برشی ساده با شرایط اولیه زیر حل شده است:

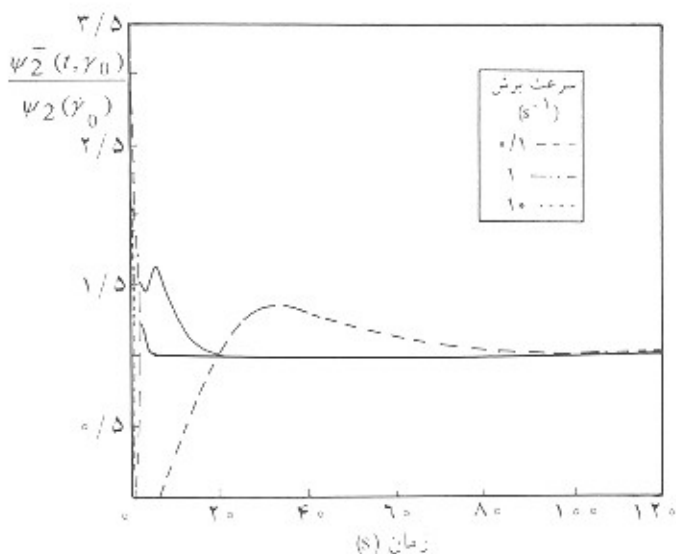
$$\dot{\gamma}(0) = \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

$$\omega(0) = \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$c_i(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (18)$$

که در آن $\dot{\gamma}$ شدت برش است. تانسور تنش نیز به صورت زیر بیان می شود:

$$\sigma = -2 \sum c_i \frac{\delta \Phi}{\delta c_i} \quad (19)$$

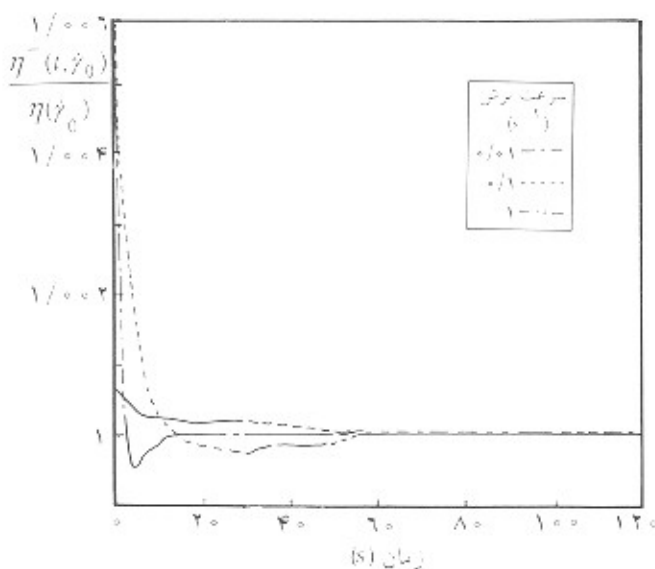


شکل ۳- اثر سرعت برش بر دوین ضریب اختلاف نشیهای نرمال در آزمایش آغاز.

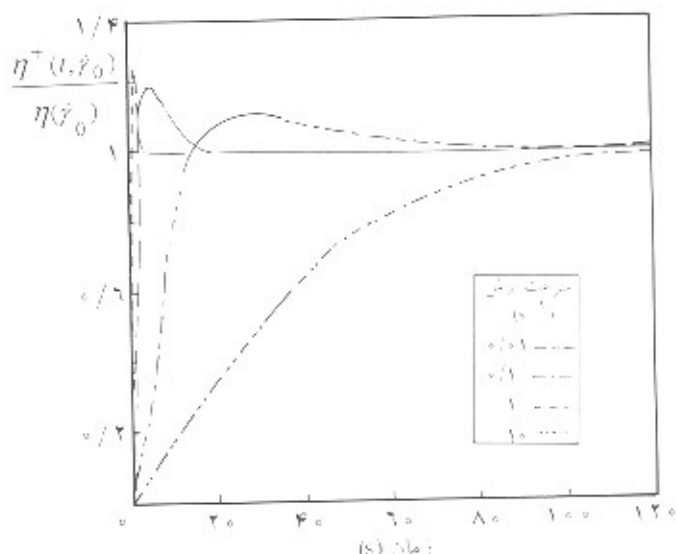
شکلهای ۷ تا ۹ ترتیب اثر پارامتر تانسور حرکت پیبری بر گرانیوی و اولین و دوین ضریب اختلاف نشیهای نرمال را برای $M_1=100, M_2=100, M_{12}=100, \mu_1=100, \mu_2=100, \mu_{12}=100$ در حالت پایدار نشان می‌دهد.

مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی

شکل ۱۰ مقایسه بین پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آسبخته

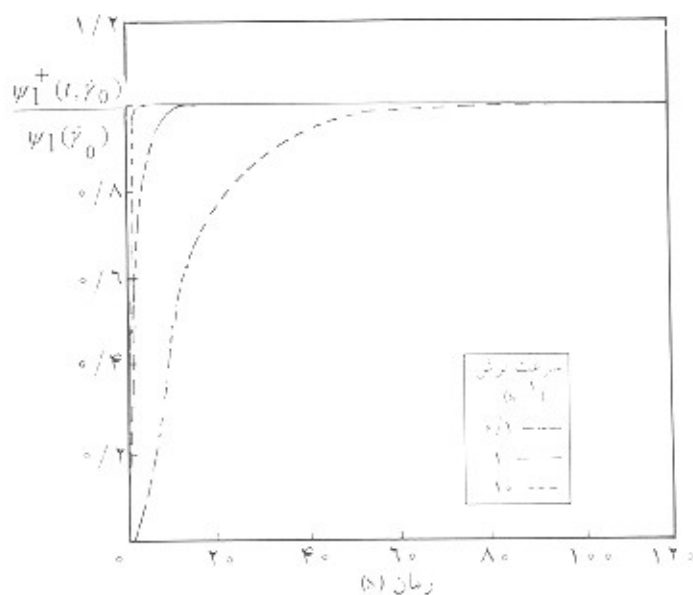


شکل ۴- اثر سرعت برش بر گرانیوی در آزمایش آسودگی.

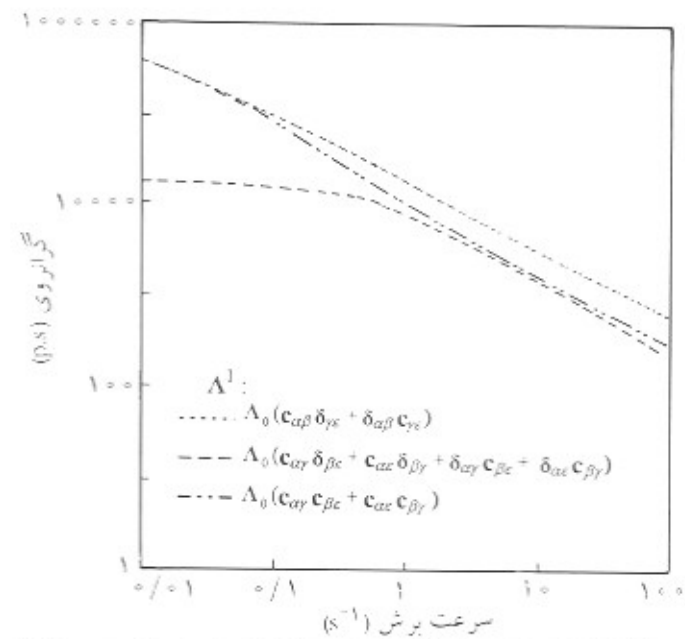


شکل ۱- اثر سرعت برش بر گرانیوی در آزمایش آغاز.

در $\alpha=0/75$ و $8,4 \times 10/0001$ در آزمایش آغاز نشان می‌دهد. که در آنها M_1, M_2 و پارامترهای مدل و α جزء وزنی اختلاط مربوط به پیبری او است. شکلهای ۴ تا ۶ ترتیب اثر سرعت برش بر گرانیوی و اولین و دوین ضریب اختلاف نشیهای نرمال را برای $M_1=100, M_2=100, M_{12}=100, \mu_1=100, \mu_2=100, \mu_{12}=100$ در حالت آزمایش آسودگی نشان می‌دهد.



شکل ۲- اثر سرعت برش بر اولین ضریب اختلاف نشیهای نرمال در آزمایش آغاز.

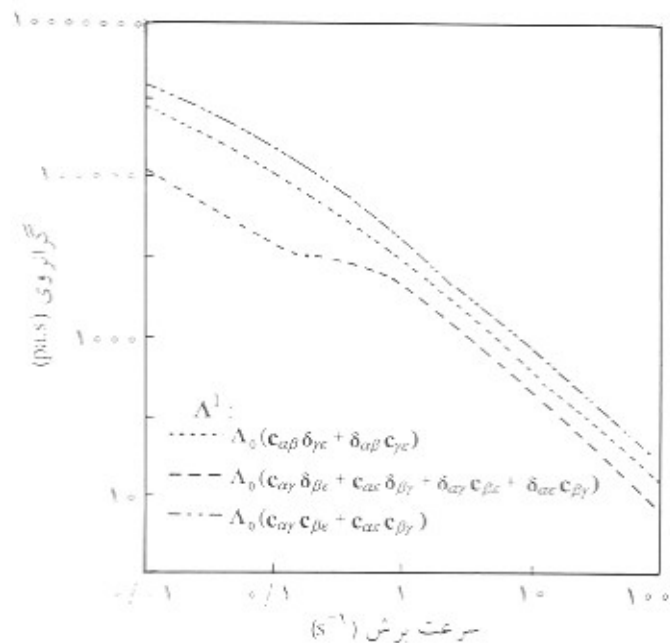


سرعت برش (s^{-1})

شکل ۷- اثر پارامتر تحرک پذیری بر گرانروی در جریان برشی حالت پایدار.

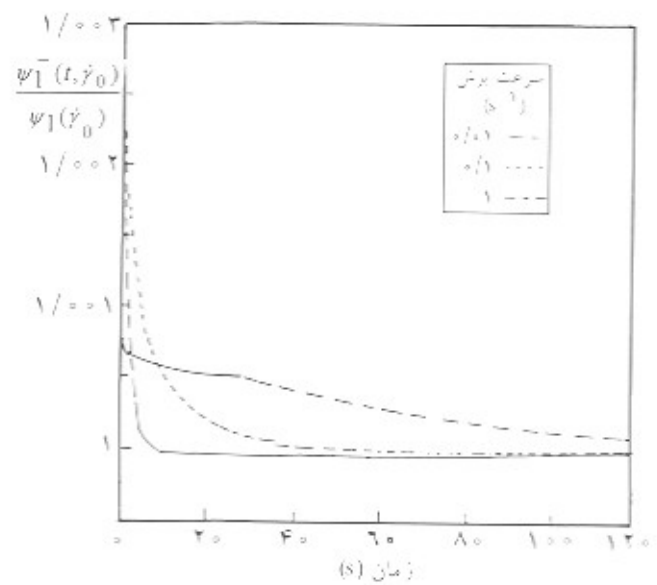
می‌دهد [۱۳]. پارامترهای مدل برای این آمیخته به صورت $M_1=10000$, $M_2=3000$, $M_{12}=2000$, $M_3=3000000$, $\lambda_{12}=9000$, $\lambda_{23}=4000000$, $\lambda_{13}=0/000005$ و $\alpha=0/5$ بدست آمده است.

شکل ۱۲ مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آمیخته



سرعت برش (s^{-1})

شکل ۸- اثر پارامتر تانسور تحرک پذیری بر اولین ضریب اختلاف تنشهای ترمال در جریان برشی حالت پایدار.

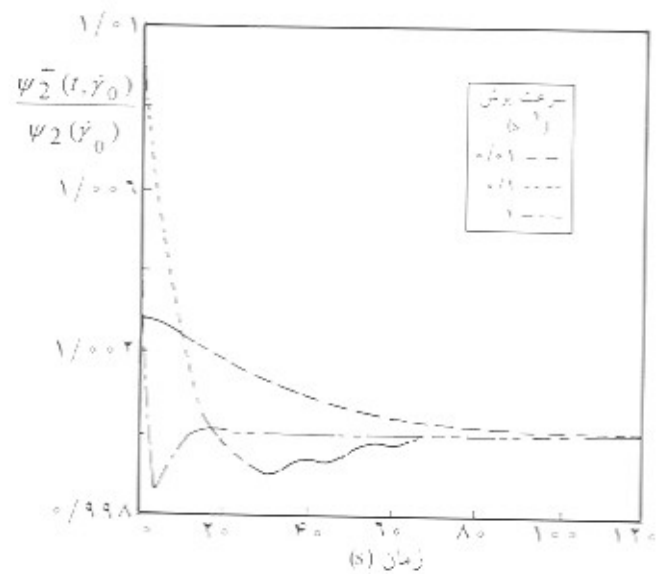


زمان (s)

شکل ۵- اثر سرعت برش بر اولین ضریب اختلاف تنشهای ترمال در آزمایش آسودگی.

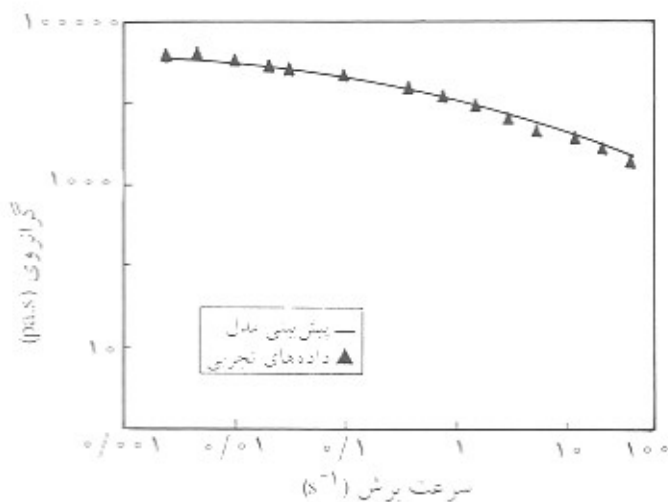
انتزاج پذیر HDPE/LDPE را که دارای ۲۵ درصد HDPE است نشان می‌دهد [۱۳]. پارامترهای مدل برای این آمیخته به صورت $M_1=10000$, $M_2=3000$, $M_{12}=1000$, $M_3=3000000$, $\lambda_{12}=10000$, $\lambda_{23}=4000000$, $\lambda_{13}=0/000005$ و $\alpha=0/25$ بدست آمده است.

شکل ۱۱ مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آمیخته انتزاج پذیر HDPE/LDPE را که دارای ۵۰ درصد HDPE است نشان



زمان (s)

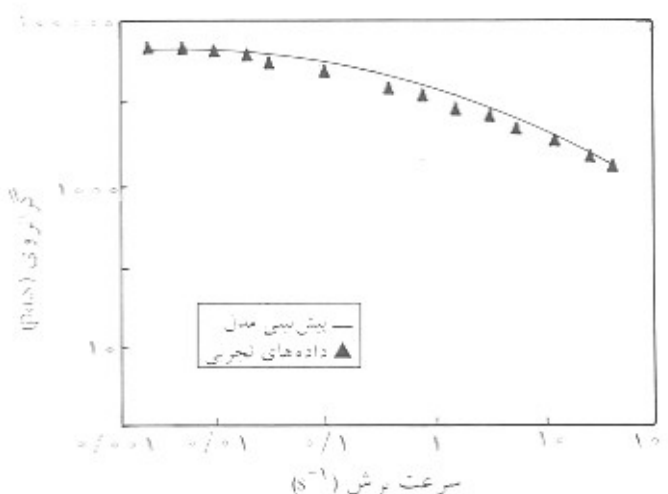
شکل ۶- اثر سرعت برش بر دومین ضریب اختلاف تنشهای ترمال در آزمایش آسودگی.



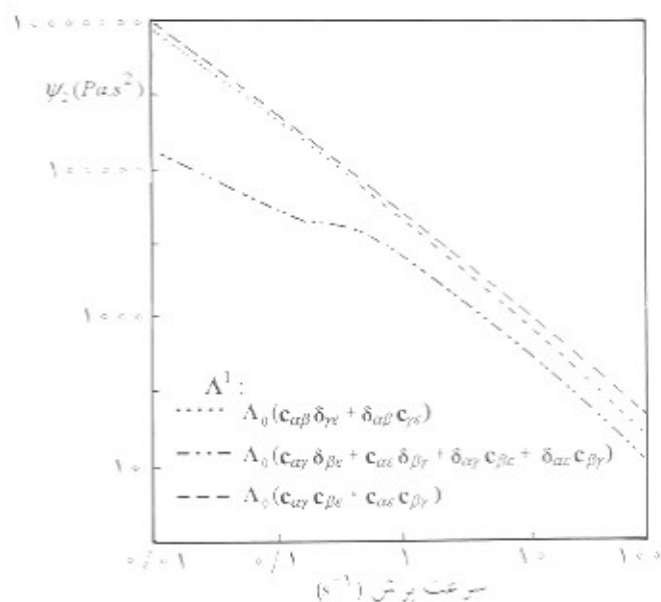
شکل ۱۱- مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آمیخته HDPE/LDPE با درصد اختلاط ۵۰/۵۰.

سرعت‌های برش کم به صورت یکساخت افزایش می‌یابد. ولی در سرعت‌های برش بالا ابتدا گرانروی زیاد می‌شود و سپس کاهش می‌یابد و در مقدار معینی ثابت می‌شود. به عبارت ساده‌تر، منحنی حاصل دارای یک فرارفت (Overshoot) است. همچنین، مقایسه این فرارفتها نشان می‌دهد که با افزایش سرعت برش این مقدار ماکسیمم، در منحنی گرانروی بر حسب زمان، در زمانهای کمتری اتفاق می‌افتد. نتایج مشابهی را می‌توان برای اولین و دومین ضرایب اختلاف نشیهای نرمال بیان کرد (شکل‌های ۲ و ۳).

نتایج شکل ۴ نشان می‌دهد که با گذشت زمان گرانروی بطور یکساخت کاهش می‌یابد. با افزایش سرعت برش زمان لازم برای رسیدن



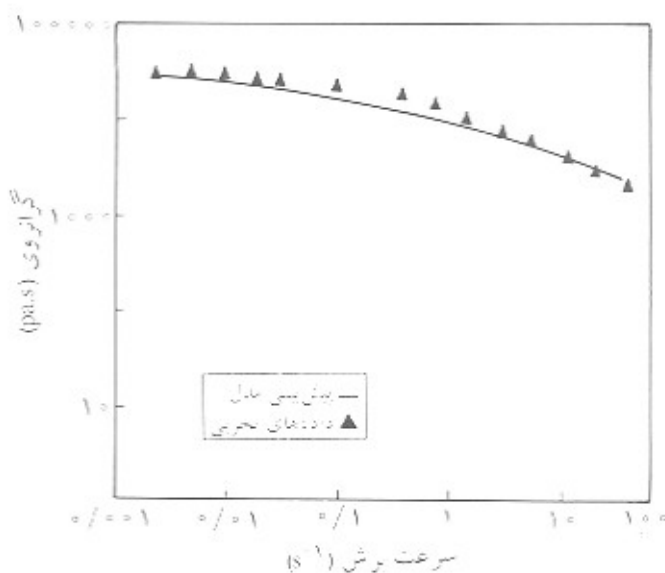
شکل ۱۲- مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آمیخته HDPE/LDPE با درصد اختلاط ۲۵/۷۵.



شکل ۹ اثر پارامتر تانسور تحرک پذیری بر دومین ضریب اختلاف تنش‌های نرمال در جریان برشی حالت پایدار.

امتراج پذیر HEPE/LDPE را که دارای ۷۵ درصد HDPE است نشان می‌دهد [۱۳]. پارامترهای مدل برای این آمیخته به صورت $M_1=100000$, $M_2=30000$, $M_3=30000$, $M_4=30000$, $M_5=3000000$, $\lambda_{12}=8500$, $\lambda_{22}=4000000$, $\lambda_{33}=0/000005$ و $\lambda_{44}=0/75$ بدست آمده است.

نتایج شکل ۱ نشان می‌دهد که با گذشت زمان، گرانروی در



شکل ۱۰- مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی برای آمیخته HDPE/LDPE با درصد اختلاط ۷۵/۲۵.

به حالت پایدار کاهش می‌یابد. نتایج مشابهی را می‌توان برای اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال بیان کرد (شکل‌های ۵ و ۶).

نتایج شکل ۷ نشان می‌دهد که انتخاب پارامتر تانسور تحرک‌پذیری تاثیر زیادی بر گرانروی دارد. با تغییر عبارت δ^1 ، از شواهد پیداست که شیب خط در ناحیه قانون توانی، زمانی که تانسور تحرک‌پذیری از مرتبه اول نسبت به صورت‌بندی است، نتایج خوبی بدست می‌دهد. نتایج مشابهی را می‌توان برای اولین و دومین ضرایب اختلاف تنشهای نرمال بیان کرد (شکل‌های ۸ و ۹).

نتایج کلی زیر از مقایسه شکل‌های ۳-۱ در آزمایش آغاز بدست می‌آید:

- در سرعت‌های برش یکسان، زمانی که یک نقطه ماکسیمم در منحنیها اتفاق می‌افتد، این زمان در منحنیهای ψ_1 و ψ_2 بیشتر از منحنی η است. به عبارت دیگر، در سرعت‌های برش یکسان، در منحنی گرانروی نسبت به منحنیهای ψ_1 و ψ_2 زودتر به نقطه ماکسیمم می‌رسیم، یعنی در منحنی گرانروی زمانی که در آن فرارفت اتفاق می‌افتد کمتر است.

- افزایش ψ_1^+ و ψ_2^+ در مقایسه با افزایش η^+ اندکی به تاخیر می‌افتد.
- در یک سرعت برش یکسان در زمان ماکسیمم منحنی، مقدار η^+ بزرگتر از ψ_2^+ و مقدار ψ_2^+ بزرگتر از ψ_1^+ است.

نتایج دیگری از مقایسه شکل‌های ۶-۴ در آزمایش آسودگی بدست می‌آید که به صورت زیر است:

- ψ_2^- خیلی سریعتر از η^- و ψ_1^- آسوده می‌شود.

- η^- و ψ_1^- شبیه به هم آسوده می‌شوند.

نتایج حاصل به صورت کیفی روند قابل انتظاری از رفتار رئولوژیکی پلیمرهای امتزاج‌پذیر ارائه می‌کند.

نتایج شکل‌های ۱۲-۱۰، که مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی است، نشان می‌دهد که پیش‌بینی مدل همپوشانی مناسبی با داده‌های تجربی دارد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک مدل از نوع حجم ثابت با استفاده از روش عمومی پواسون- براکت برای آمیخته پلیمری امتزاج‌پذیر پیشنهاد شده است. نتایج حاصل نشان می‌دهد که با انتخاب تابع انرژی و تانسور تحرک‌پذیری مناسب برای یک آمیخته پلیمری امتزاج‌پذیر می‌توان پیش‌بینی قابل قبولی از رفتار رئولوژیکی پلیمرهای امتزاج‌پذیر داشت. در این مدل با انتخاب مناسب پارامترهای مدل، رفتار رئولوژیکی قابل انتظار برای آمیخته‌های پلیمری امتزاج‌پذیر در آزمایش‌های آغاز و آسودگی و جریان برشی حالت پایدار بدست آمده است. از قابلیت‌های

این مدل می‌توان به کاربرد آن برای پلیمرهای امتزاج‌پذیر مختلف اشاره کرد، که با بدست آوردن پارامترهای مدل، پیش‌بینی درستی از رفتار رئولوژیکی آن سیستم در محدوده‌های مختلف سرعت برش می‌توان بعمل آورد. همچنین، مقایسه پیش‌بینی مدل با داده‌های تجربی نشان می‌دهد که مدل پیش‌بینی قابل قبولی از رفتار رئولوژیکی آمیخته‌های پلیمری امتزاج‌پذیر ارائه می‌کند.

علائم و نشانه‌ها

ψ فضای پیکربندی

c تانسور صورت‌بندی

F انرژی داخلی سیستم

u چگالی اندازه حرکت سیستم

S آنتروپی سیستم

F هامیلتونی سیستم

θ مشتق جزئی

∇ گرادیان

δ تانسور تحرک‌پذیری

M اندازه حرکت

β ضریب یا شمارنده

Q ماتریس غیرایزوتروپ گرانروی

σ تانسور تنش

L عملگر

ϕ_i تابع انرژی جزء i

A انرژی آزاد هلمولتز

δ_i ضرایب جمله‌های تانسور تحرک‌پذیری

c^{-1} معکوس تانسور صورت‌بندی

δ تانسور واحد

δ_i پارامتر مدل برای جزء i

δ_{i2} پارامتر مدل برای اثر اختلاط جزء ۱ و ۲

M_i پارامتر مدل برای جزء i

M_{i2} پارامتر مدل برای اثر اختلاط جزء ۱ و ۲

α جزء وزنی اختلاط

ϕ_{i2} تابع انرژی اثر اختلاط اجزا

$\dot{\gamma}^{(i)}$ تانسور شدت برش

$\omega^{(i)}$ تانسور سرعت برش

ψ_1 اولین ضریب اختلاف تنشهای نرمال

ψ_2 دومین ضریب اختلاف تنشهای نرمال

δ_1 ضریب ثابت در تانسور تحرک‌پذیری جزء ۱

δ^1 بخش متغیر تانسور تحرک‌پذیری

1. "Rheology of Viscoelastic Polymer Media", *Rheol. Acta.*, **15**, 85-98, 1976.
2. Ramazani A., Rheological Behavior of Thermoplastic Composites. PhD Thesis, Sharif University of Technology, Department of Chemical Engineering, 1999.
3. Beris B. N. and Edward B. J., "Poisson Broeket Formulation", *J. Rheol.*; **34**, 4 May 1990.
4. Ramazani A. Ait-Kadi and Grmela M., "Rheological Modeling of Short Fiber Thermoplastics Composites", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*; **73**, 241-60, 1997.
5. Grmela M. and Ottinger H. C., "Dynamics and Thermodynamics of Complex Fluids Development of a Generic Formalism", *Phys. Rev. E.*; **55**, 6620-32, 1997.
6. Grmela M., "Hamiltonian Dynamics of in Compressible Elastic Fluids", *Phys. Lett.*; **A130**, 81-6, 1988.
7. Grmela M., "Bracket Formulation of Dissipative Time Evolution Equations", *Phys. Lett.*; **111 A**, 36-40, 1985.
8. Valenza A., "The Rheological Behavior of HDPE/LDPE Blends", *J. Rheol.*; **30**, 1085-92, 1986.

مجموعه عناصر روی قطر اصلی تانسور صورتندی
در ترمینال تانسور صورتندی
انگیزه‌های
اجزای تانسور تنش

مراجع

1. Bird R. B., Hassager R. G. Armstrong and Curtis C.: *Dynamics of Polymeric Liquids*; **2**, Wiley and Sons, New York, 1997.
2. Kirkwood J. G. M.: *Macromolecules in Documents in Modern Physics*; Gordon A. and Breach (Eds), New York 1997.
3. Hand G. L., "A Theory of Anisotropy Fluids", *J. Fluid Mech.*; **13**, 33-46, 1962.
4. Maugin G. A. and Drouot R., "Internal Variables Thermodynamics of Macromolecule Solutions", *J. Eng. Sci.*; **21**, 705-24, 1983.
5. Grmela M., "Dependence of the Stress Tensor on the Inter Molecular Viscosity", *J. Rheol.*; **33**, 2207-31, 1989.
6. Leonov A. I., "None Equilibrium Thermodynamics and