

اثر عوامل ساختاری بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پلیمر- 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 نانوکامپوزیتهای 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- 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 نانوکامپوزیتهای اثر بسزایی دارند، شامل نسبت حجمی، نسبت منظر خاکرس اصلاح شده، فاصله افقی بین ذرات و مقدار روی هم رفتگی ذرات به شکل توابعی از عوامل ساختاری تعریف شده‌اند و آثار آنها روی خواص کشسانی نانوکامپوزیت پلیمر- خاکرس اصلاح شده بررسی شده است.

واژه‌های کلیدی

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

مقدمه

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

مواد پلیمری اغلب به وسیله پرکننده‌ها برای اصلاح خواص مکانیکی تقویت می‌شوند. به تازگی کامپوزیتهای پلیمر- خاکرس اصلاح شده علائق زیادی را در حوزه صنعت و پژوهش ایجاد کرده‌اند، زیرا این ترکیبات اغلب در مقایسه با پلیمرهای خالص، درشت‌کامپوزیتهای

Key Words

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

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

خاکرس (طبیعی یا اصلاح شده) انواع مختلفی از کامپوزیت‌های پلیمر-خاکرس اصلاح شده به طور دینامیکی قابل دسترس هستند [۱]. در این پژوهش، خاکرس اصلاح شده از نوع لایه لایه شده کامل مورد مطالعه قرار گرفته است. در کامپوزیت با خاکرس اصلاح شده لایه لایه، لایه‌های خاکرس با ضخامت منحصر به فرد 1 nm در محیط پیوسته زمینه پلیمری با فاصله بین لایه‌های میانگین توزیع و جدا می‌شوند که این فاصله به غلظت خاکرس بستگی دارد. کامپوزیت با خاکرس اصلاح شده لایه لایه خواص بسیار عالی نسبت به زمینه خالص نشان می‌دهد. معمولاً کامپوزیت‌های لایه‌ای نسبت به نوع جا داده شده با غلظت یکسان خاکرس اصلاح شده، 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 اصلاح شده، هندسه آن اغلب به شکل صفحه‌ای، مستطیلی یا دمبلی در نظر گرفته می‌شود.

علاوه بر پراکنش متنوع ذرات خاکرس اصلاح شده، یکی دیگر از پیچیدگی‌های کامپوزیت پلیمر-خاکرس اصلاح شده در مدل‌سازی، ایجاد ناحیه بین فازی در این مواد است (شکل ۱). این ناحیه بین فازی ناشی از برهمکنش شیمیایی مولکول‌های پلیمر با سطح ذرات خاکرس اصلاح شده 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

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 ایده‌آل 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 توپوتا طرح صنعتی و اقتصادی را برای ساخت کامپوزیت پلیمر-خاکرس اصلاح شده 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 $4/7$ درصد وزنی خاکرس اصلاح شده بود [۳].

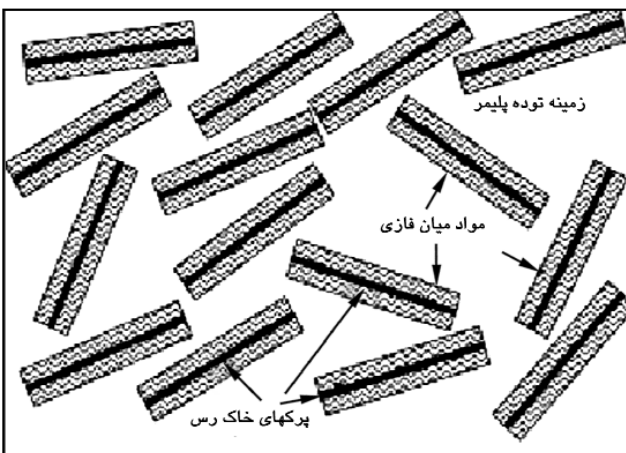
هر چند که پژوهش‌های مبتنی بر آزمایشها برای محاسبه رابطه خواص-ساختار نانوکامپوزیتها استفاده می‌شوند، ولی انجام آزمایشها و دستیابی به خواص کامپوزیت‌های نانو ساختاری از آن، روشهای فرایند و تجهیزات آزمایش پیشرفته‌ای را مطالبه می‌کند، که این موضوع هزینه‌های زیادی را در پی دارد. با توجه به این مطالب می‌توان به مفید بودن روشهای مدل‌سازی برای محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری پی برد [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 نانو ساختاری 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-خاکرس اصلاح شده 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 نحوه 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 اصلاح شده، فاصله افقی بین ذرات و ضریب روی هم رفتگی ذرات مطالعه شده است.

دید کلی بر مدل

ذرات خاکرس اصلاح شده 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



شکل ۱ کامپوزیتها با خاکرس اصلاح شده لایه لایه و ناحیه بین فازی [۷].

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 آنجا که 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.

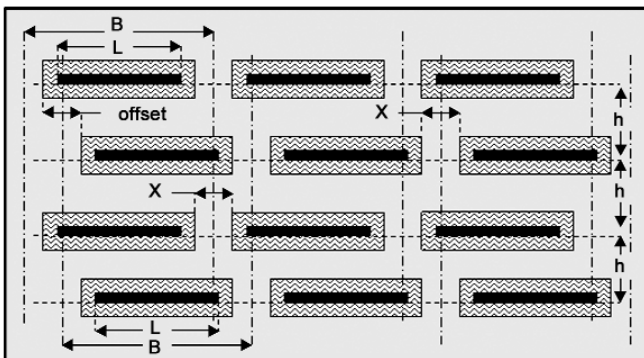
روی هم رفتگی ذرات یکی از مواردی است که به طور ساختاری روی مدل اثر می‌گذارد. مقدار روی هم رفتگی ذرات به کمک پارامتر f_s مشخص می‌شود. این پارامتر به عنوان فاصله بین دو ذره روی هم به پهنای یک سلول واحدی است که در آن سلول، تنها این دو ذره جا شده باشند:

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

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

عامل دوم مربوط به ساختار ذرات، مقدار پراکنش ذرات در پلیمر یا مقدار لایه لایه شدگی ذرات است. مقدار لایه لایه شدگی ذرات در مدل اجزای محدود با ضریب دیگری به نام ضریب لایه لایه شدگی (f_x) کنترل می‌شود. ضریب لایه لایه 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 لایه لایه شدگی، حداکثر فاصله بین دو ذره مجاور در کسر حجمی ثابت است. با توجه به شکل ۲ می‌توان نوشت:

$$f_p = \frac{L't}{B'h} \quad (2)$$



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

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 - خاک رس اصلاح شده، ذرات نانو می‌توانند در جهات و مکانهای نسبی، با طول، ضخامت و نسبتهای حجمی مختلف قرار بگیرند. همین طور 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 روی هم رفتگی، مقدار لایه لایه شدگی و نسبت منظر ذرات و کسر حجمی خاک رس اصلاح شده روی خواص کشسانی کامپوزیت پلیمر - خاک رس اصلاح شده 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. همان طور 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 خاک رس 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 خاک رس به شکل مستطیلی در حالت دو بعدی باشند. فرض پیوند کامل بین ذرات و ناحیه بین

کسر حجمی (f_p) ضریب روی هم 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 شده اند (شکل ۲). 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 اصلاح شده و ناحیه بین فازی و همین طور نسبت پواسون آنها ثابت در نظر گرفته می شوند. در جدول ۱ تمام مقادیر یاد شده آمده است.

همان طور 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 پیش بینی می شود [۱۱]. مقدار ضخامت ناحیه بین فازی، متناسب با شعاع زیراسیون پلیمر، معادل ۲ nm فرض شد.

برای نتیجه گیری کامل تعداد زیادی مدل باید ساخته شده و تحلیل

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

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

فاصله h بین ذرات دارای بیشترین مقدار h_{max} برای کسر حجمی داده شده است که در حالت $L=B$ ایجاد می شود. بنابراین:

$$h_{max} = \frac{t}{f_p} \quad (3)$$

ضریب لایه لایه شدگی به کمک معادله (۴) تعریف می شود:

$$f_x = \frac{h}{h_{max}} = \frac{L^y}{B^y} \quad (4)$$

که در آن L طول ذره و B پهناى سلول واحد یا سطح معیار حول یک ذره است. h فاصله عمودی بین ذرات و t ضخامت ذرات هستند. همان طور که از مدل مشاهده می شود محدودیتهایی برای مقدار f_x وجود دارد. به عنوان مثال، $f_x = 1$ امکان پذیر 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 می شود. کمترین مقدار f_x وقتی اتفاق می افتد که h به h_{min} کاهش یابد.

$$h_{min} = 2\tau + t \quad (5)$$

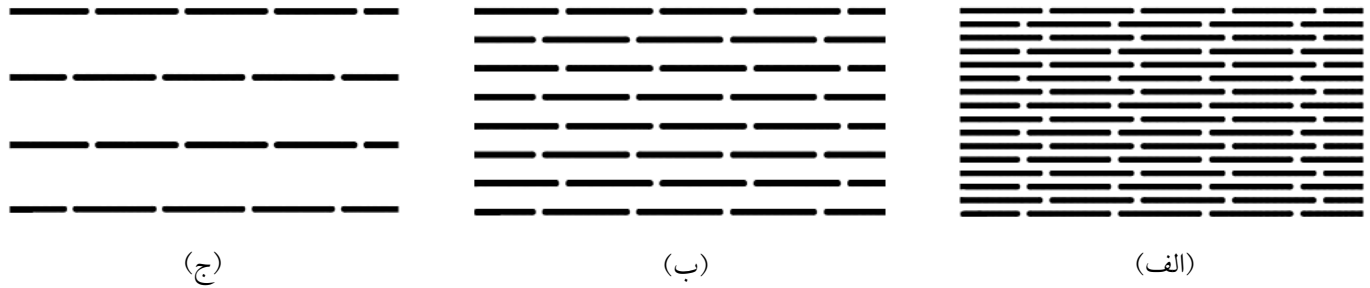
بنابراین، کمترین ضریب لایه لایه شدگی مجاز به کمک معادله (۶) محاسبه می شود:

$$f_{x,min} = \frac{2\tau + t}{t/f_p} = f_p \left(\frac{2\tau}{t} + 1 \right) \quad (6)$$

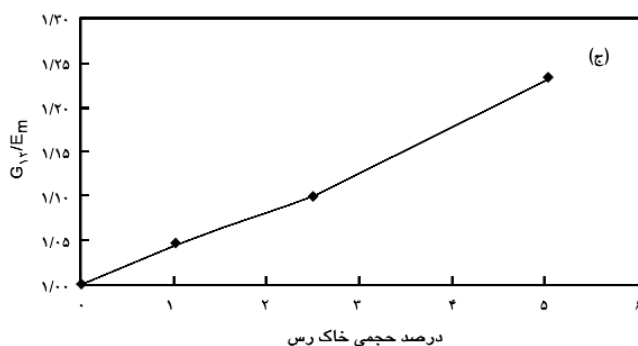
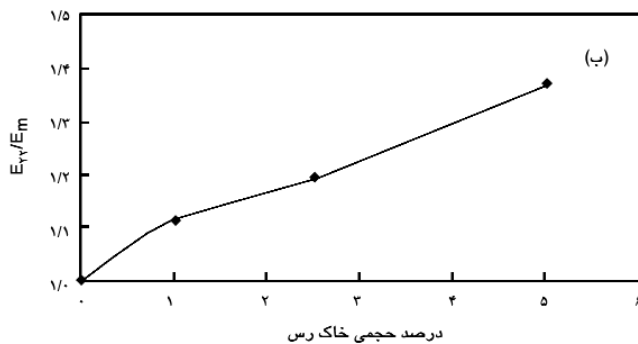
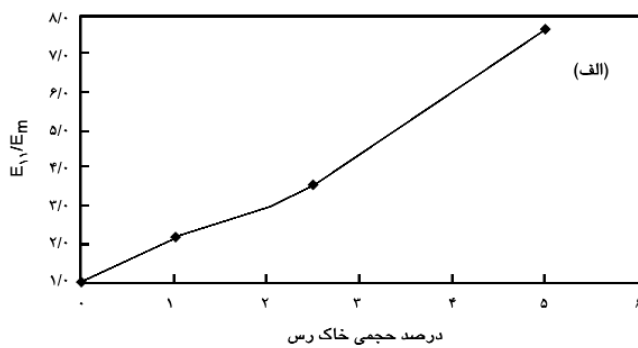
بیشترین مقدار ضریب لایه لایه شدگی در این مدل به وسیله ضخامت ناحیه بین فازی معین می شود. از آنجا که مدل اجازه نمی دهد که نواحی بین فازی در انتها روی یکدیگر بروند، بیشترین مقدار ضریب لایه لایه شدگی موقعی است که دو انتهای نواحی بین فازی به هم برسند. بنابراین، فاصله بین دو ستون به دو برابر ضخامت ناحیه بین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

$$f_{x,max} = \frac{L^y}{(L + 2\tau)^y} \quad (7)$$

همان طور که تا به حال مشاهده شده است، تمام عوامل ساختاری به طریقی به عوامل هندسی مربوط شده اند. عوامل نسبت منظر ($a = L/t$),



شکل ۳ طرح کلی مدلها برای درصد نسبی مختلف حجم خاک رس: (الف) ۵ درصد، (ب) ۲/۵ درصد و (ج) ۱ درصد.



شکل ۴ تغییرات نسبی مدولهای کشسان نانوکامپوزیت بر حسب درصد حجمی خاک رس: (الف) E_{11}/E_m ، (ب) E_{22}/E_m و (ج) G_{12}/E_m .

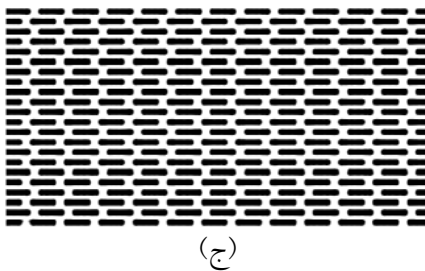
شود. با توجه به جدول ۱ تعداد ۸۱ حالت ایجاد شده است. در حالتی که عوامل دارای بازه باید ثابت بماند، مقادیر ۵ درصد برای درصد نسبی حجم خاک رس، ۰/۵ برای ضریب روی هم رفتگی، ۸ nm برای فاصله افقی بین ذرات و ۱۰۰ برای نسبت منظر در نظر گرفته شده اند.

اثر نسبت حجمی

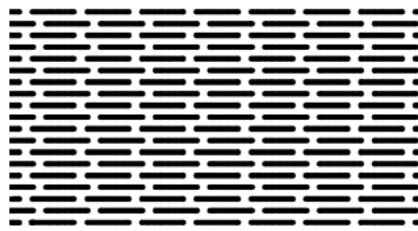
در شکل ۳ برای مقایسه طرح وار مدلها با نسبت منظر ۱۰۰، فاصله بین ستونهای خاک رس ۸ nm، ضریب روی هم رفتگی ۰/۵ و درصدهای نسبی حجم خاک رس برابر ۱، ۲/۵ و ۵ درصد، شکل مدلها رسم شده است. شکل ۴ بر اساس تحلیلهای انجام شده روی مدل، تغییرات نسبی مدولهای کشسان (E_{11}/E_m ، E_{22}/E_m و G_{12}/E_m) را بر حسب درصد حجمی خاک رس اصلاح شده در کامپوزیت نشان می دهد. همان طور که دیده می شود هر سه خاصیت مکانیکی با افزایش درصد حجمی خاک رس افزایش می یابد. افزایش خواص با اضافه کردن تقویت کننده منطقی و واضح است، ولی همان طور که در شکل مشاهده می شود افزایش خواص در جهت طول ذرات خیلی بیشتر از افزایش خواص در سایر جهات است.

اثر نسبت منظر

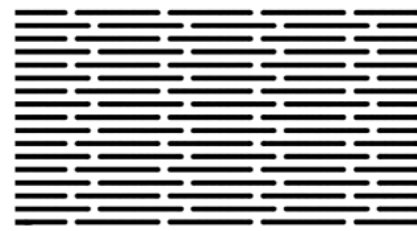
اثر نسبت منظر از تقسیم طول ذره به عرض آن حاصل می شود. ذرات خاک رس اصلاح شده به علت داشتن ضخامتهایی در حد نانو، دارای نسبتهای منظر زیادی هستند. یکی از عوامل مؤثر بر خواص کشسانی نانوکامپوزیت، نسبت منظر ذرات پراکنده شده در آن است. در شکل ۵ برای مقایسه مدلها به طور طرح وار با درصد حجمی ۵، فاصله بین ستونهای خاک رس ۸ nm، ضریب روی هم رفتگی ۰/۵ و نسبتهای منظر ۲۸، ۵۲ و ۱۰۰، شکل مدلها رسم شده است. شکل ۶ تغییرات نسبی مدولهای کشسان (E_{11}/E_m ، E_{22}/E_m و G_{12}/E_m) را بر حسب نسبت



(ج)



(ب)



(الف)

شکل ۵ طرح کلی مدلها برای نسبتهای منظر مختلف: (الف) ۱۰۰، (ب) ۵۲ و (ج) ۲۸.

منظر در کامپوزیت نشان می دهد.

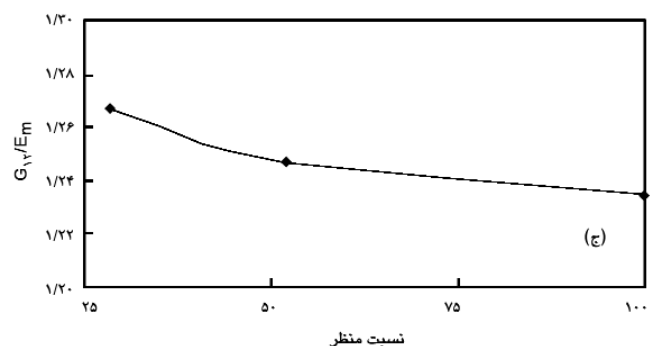
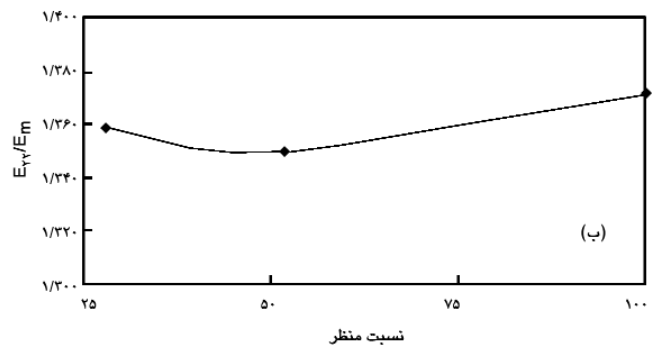
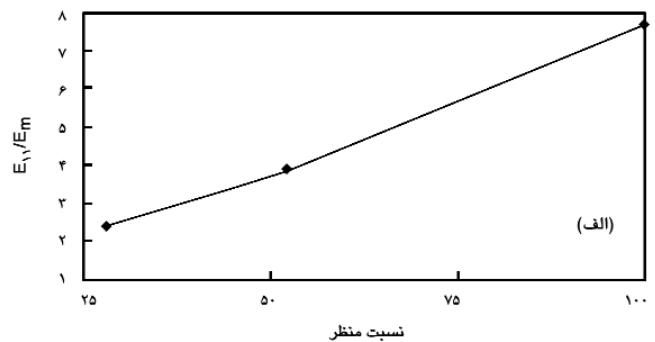
همان طور که دیده می شود خاصیت مکانیکی E_{11} با افزایش نسبت منظر ذرات افزایش می یابد. افزایش خواص با اضافه شدن طول ذرات خاکرس قابل پیش بینی بود، ولی همان طور که در شکل دیده می شود رفتار G_{12} معکوس دارد و با افزایش نسبت منظر کاهش می یابد. این رفتار به دلیل افزایش کرنش برشی در برابر تنش اعمالی است. این موضوع افزایش نسبت منظر را محدود می کند. 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 نمی توان روند خاصی یافت.

اثر ضریب روی هم رفتگی

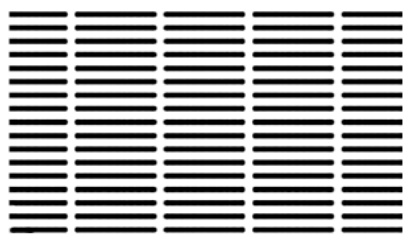
همان طور که قبلاً نیز به آن اشاره شد، در مدل سازیهای انجام شده عاملی با عنوان روی هم رفتگی ذرات بررسی شده است. این اثر به کمک ضریب روی هم رفتگی (f_s) کنترل می شود. با زیاد شدن f_s درگیری ذرات بیشتر می شود. در شکل ۷ برای مقایسه شکل کلی مدلها با نسبت منظر ۱۰۰، درصد حجمی ۵، فاصله بین ستونهای خاکرس ۸ nm 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 می دهد. همان طور که دیده می شود خاصیت مکانیکی E_{11} با افزایش ضریب روی هم رفتگی افزایش می یابد. بقیه خواص تغییر چندانی نمی کنند و به همین دلیل گزارش نشده اند.

اثر فاصله افقی بین ذرات

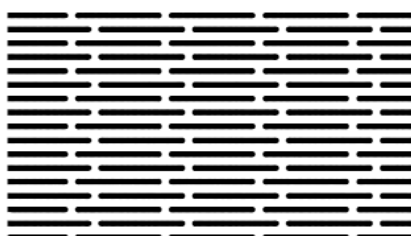
در مدلهای تهیه شده فاصله افقی بین ستونهای ذرات خاکرس یکسان است. نزدیکی لایه های خاکرس باعث تداخل اثر و میدان تنش ذرات در یکدیگر می شوند. یکی دیگر از عوامل مؤثر بر خواص کشسانی نانوکامپوزیت تغییر فاصله افقی بین ستونهای ذرات پراکنده شده در آن است. در شکل ۹ برای مقایسه شکل کلی مدلها با نسبتهای منظر ۱۰۰،



شکل ۶ تغییرات نسبی مدولهای کشسان نانوکامپوزیت بر حسب نسبت منظر ذرات: (الف) E_{11}/E_m ، (ب) E_{22}/E_m و (ج) G_{12}/E_m .



(ج)



(ب)



(الف)

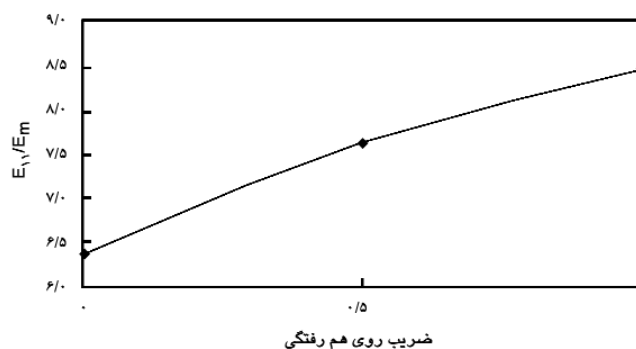
شکل ۷ طرح کلی مدلها برای ضرایب روی هم رفتگی مختلف: (الف) ۱، (ب) ۰/۵ و (ج) ۰.

افقی بهینه تر است. ولی، همان طور که مشاهده می شود مدولهای کشسان در جهت ۲ و برشی با افزایش فاصله افقی بین صفحات افزایش می یابد.

مقایسه پیش بینی مدل و داده های تجربی

برای بررسی نحوه تطابق مدلها موجود با نتایج تجربی، از داده های تجربی مربوط به نانوکامپوزیت اپوکسی-خاکرس در پژوهش انجام شده توسط لیو (Luo) و دانیل (Daniel) [۸] استفاده شده است. در این پژوهش مواد پلیمر و ذرات تقویت کننده همسان فرض شده اند. از ذرات خاکرس اصلاح شده نوع کلویزیت ۳۰B (Cloisite) با مدول یانگ ۱۷۸ GPa و نسبت پواسون ۰/۴۱ استفاده شده است. ذرات خاکرس اصلاح شده صفحه مانند با قطر ۱۰۰ nm، ضخامت ۱ nm و نسبت منظر ۱۰۰ هستند. مدول یانگ پلیمر ۲/۷۵ GPa و نسبت پواسون آن ۰/۳۵ است که مربوط به خواص اپوکسی است. درصد نسبت حجمی خاکرس اصلاح شده در پلیمر از ۰ تا ۵ درصد تغییر می کند. در مدل اجزای محدود، برای سایر عوامل مانند فاصله بین ستونهای خاکرس و ضریب روی هم رفتگی به ترتیب از مقادیر متوسط ۸ nm و ۰/۵ استفاده می شود.

مقایسه نتایج مدل و داده های تجربی در شکل ۱۱ مدول کشسان



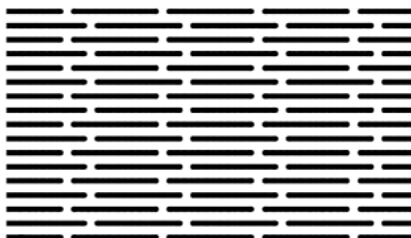
شکل ۸ تغییرات نسبی مدولهای کشسان E_{11}/E_m بر حسب ضریب روی هم رفتگی ذرات در نانوکامپوزیت.

درصد حجمی ۵، ضریب روی هم رفتگی ۰/۵ و فاصله های افقی بین ستونهای خاکرس ۴، ۸ و ۱۶ nm 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 می دهد.

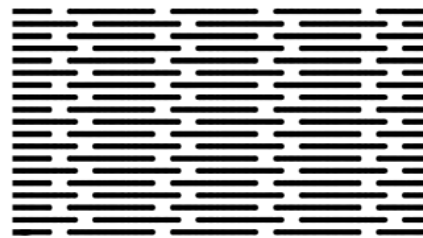
همان طور که دیده می شود خاصیت مکانیکی E_{11} با افزایش فاصله افقی بین ستونهای ذرات کاهش می یابد. یعنی هر چه ذرات به هم چسبیده تر و دارای میدانهای تنش متداخلی باشند، خواص در جهت



(ج)

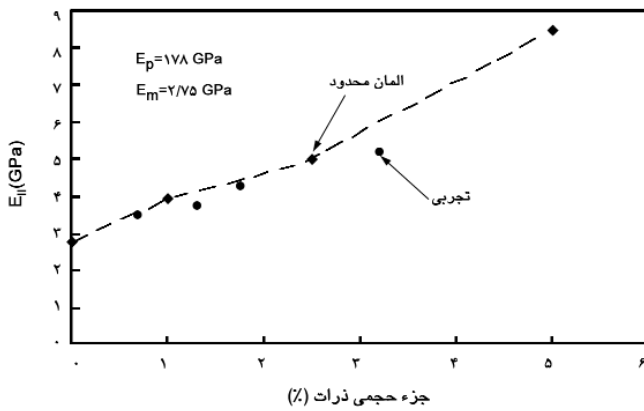


(ب)



(الف)

شکل ۹ طرح کلی مدلها برای فاصله افقی بین ذرات: (الف) ۱۶ nm، (ب) ۸ nm و (ج) ۰.۴ nm.



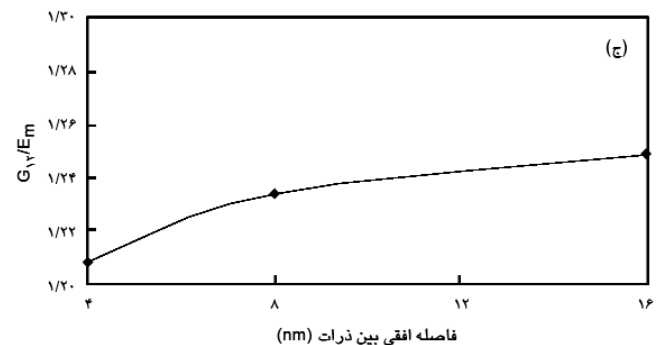
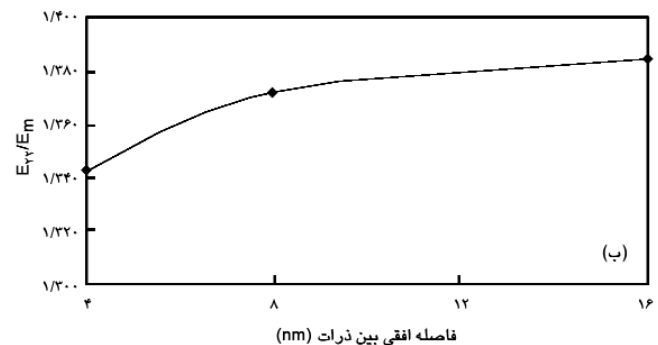
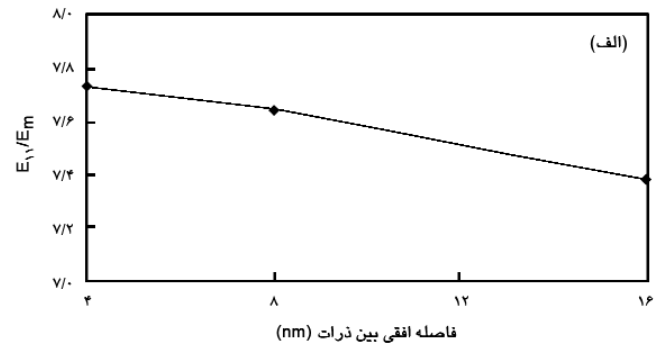
شکل ۱۱ برای نسبت‌های حجمی مختلف به دست آمده از مدل‌سازی اجزای محدود و نتایج تجربی.

مکان کامپوزیت واحد است، در حالی‌که در عمل اگر شرایط مطلوب باشد، تنها ۱۰-۳۰ 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 خاک‌کرس اصلاح‌شده در زمینه مربوط است. در داده‌های محاسبه شده به وسیله مدل‌ها فرض شده که 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 خاک‌کرس 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 پیش‌بینی مدول کشسان با استفاده از خواص مکانیکی و منظر پلیمر به عنوان زمینه و خاک‌کرس اصلاح‌شده به عنوان تقویت‌کننده ارائه شده است. در مدل‌های مربوط با در نظر گرفتن ناحیه بین‌فازی و استفاده از شرایط مرزی مناسب پاسخ‌های قابل قبولی به دست آمده است. عوامل ساختاری روی هم رفتگی، مقدار لایه لایه شدگی و نسبت منظر ذرات و همچنین کسر حجمی خاک‌کرس به عنوان عوامل مؤثر بر خواص کشسانی مد نظر قرار گرفته و بر حسب متغیرهای هندسی تعریف شده‌اند. با تغییر این متغیرها



شکل ۱۰ تغییرات نسبی مدول‌های کشسانی نانوکامپوزیت بر حسب فاصله افقی بین ذرات: (الف) E_{11}/E_m ، (ب) E_{22}/E_m و (ج) G_{11}/E_m .

نانوکامپوزیت را روی نسبت حجمی خاک‌کرس 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 خاک‌کرس 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 خاک‌کرس به طور کامل از هم جدا شده و تعداد لایه‌ها در هر

در انتها با مقایسه نتایج مدل اجزای محدود و نتایج تجربی به تطابق خوب نتایج می توان پی برد، تفاوت های مشاهده شده قابل درک و توجیه هستند. بنابراین، روش اجزای محدود روشی مطمئن برای پیش بینی خواص کشسانی نانوکامپوزیتهای پلیمر - خاک رس محسوب می شود.

و در پی آن تغییر عوامل ساختاری عنوان شده آثار مربوط به خواص کشسانی ثبت شدند. بررسیها نشان می دهد که مدول کشسان در هر سه راستا با افزایش درصد حجمی خاک رس افزایش می یابد، در حالی که در مورد نسبت منظر، کاهش مدول برشی مشاهده می شود. برخلاف افزایش فاصله افقی بین ذرات، افزایش ضریب روی هم رفتگی باعث افزایش مدول کشسان کامپوزیت می شود.

مراجع

1. Ray S. and Okamoto 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 Hybrids, *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 Sonbolstan 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., *Modeling 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.