Research article

Available in: http://jips.ippi.ac.ir

Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian),
Vol. 36, No. 2, 177-189
June-July 2023
ISSN: 1016-3255
Online ISSN: 2008-0883
DOI: 10.22063/JIPST.2023.3410.2242

Multiscale Modeling of Mechanical Properties of Green Tyre Tread Compound

Mohammad Barghamadi, Mohammad Karrabi*, Mir Hamid Reza Ghoreishy, Ghasem Naderi

Department of Rubber, Faculty of Polymer Processing, Iran Polymer and Petrochemical Institute, P.O. Box 14975-112, Tehran, Iran

Received: 13 May 2023, accepted: 14 August 2023

ABSTRACT

Hypothesis: In elastomeric composites, interfacial phenomena such as the effect of reinforcing filler on molecular dynamics of the rubber chain in the interphase and the way of rubber-filler interaction are the sources of strain energy change or viscoelastic loss of the composite in the highly filled rubber compound. To obtain a preliminary approximation of how the strain energy is influenced by interfacial phenomena, including stiffness, loss and the quality of this region, in this research, the finite element microstructural model was created in two-dimensional and three-dimensional mode and the effective characteristic changes in mechanical properties were studied. The effect of the change in stiffness of the interphase and the change in viscoelastic nature, the amount of contact between the rubber-filler in completely bonded and frictional sliding states were modeled.

Methods: The solution styrene butadiene rubber composites reinforced with silica were prepared by melt mixing. For this purpose, rubber was mixed with silica and silane coupling agent in an internal mixer. Then the masterbatch was mixed with the curing system on a two-roll mill and finally, the sample was cured under pressure at 160°C.

Findings: In agreement with the modeling results, the composite tensile test showed that the most important controlling parameter is the type of rubber-filler connection in the interphase. The simulation results showed that considering the interphase region with frictional sliding greatly reduces the stress transfer from the matrix to the particle. However in the case of the completely bonded interphase region, due to the complete transfer of stress from the particle to the matrix, the mechanical properties showed a significant deviation compared to the experimental results. Also, the 3D models provided better predictions than the 2D ones.

Keywords:
tyre compound,
multiscale modeling,
finite element,
mechanical properties,
interphase

(*)To whom correspondence should be addressed.
E-mail: m.karabi@ippi.ac.ir

Please cite this article using:
Barghamadi M., Karrabi M., Ghoreishy M.H.R., Naderi G., Multiscale Modeling of Mechanical Properties of Green Tyre Tread Compound, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **36**, 177-189, 2023.

مقاله پژوهشی

دسترس‌پذیر در نشانی: http://jips.ippi.ac.ir

مجله علوم و تکنولوژی پلیمر،
سال سی وششم، شماره ۲،
صفحه ۱۸۹-۱۷۷، ۱۴۰۲
ISSN: 1016-3255
Online ISSN: 2008-0883
DOI: 10.22063/JIPST.2023.3410.2242

مدل‌سازی چندمقیاسی خواص مکانیکی آمیزه رویه تایر سبز

محمد برغمدی، محمد کرابی*، میرحمیدرضا قریشی، قاسم نادری

تهران، پژوهشگاه پلیمرو پتروشیمی ایران، پژوهشکده فرایند پلیمرها، گروه لاستیک، صندوق پستی ۱۱۲-۱۴۹۷۵

دریافت: ۱۴۰۲/۲/۲۳، پذیرش: ۱۴۰۲/۵/۲۳

چکیده

فرضیه: در کامپوزیت‌های الاستومری، پدیده‌های بین‌سطحی همچون اثر پرکننده تقویتی بر دینامیک مولکولی زنجیر لاستیکی در فاز میانی و چگونگی برهم‌کنش لاستیک-پرکننده منشأ تغییر انرژی کرنش یا اتلاف گران‌روکشسان کامپوزیت در آمیزه بسیار پرشده لاستیکی است. با هدف کسب تقریب اولیه از چگونگی اثرپذیری انرژی کرنش از پدیده‌های فصل مشترک شامل سفتی، اتلاف بین‌فازی و کیفیت اتصال در فصل مشترک، در این پژوهش مدل ریزساختاری جزء محدود در حالت دوبعدی و سه‌بعدی ایجاد و مشخصه‌های مؤثر بر تغییرات خواص مکانیکی مطالعه شد. اثر تغییر در سفتی بین‌فازی و تغییر در ماهیت گران‌روکشسان آن، تغییر در مقدار تماس لاستیک با پرکننده در حالت‌های کاملاً مقید و ترکیب آن با لغزش اصطکاکی مدل‌سازی شد.

روش‌ها: کامپوزیت‌های لاستیک استیرن بوتادی‌ان محلولی تقویت‌شده با سیلیکا با روش اختلاط مذاب تهیه شدند. بدین منظور لاستیک به‌همراه سیلیکا و جفت‌کننده سیلانی درون مخلوط‌کن داخلی مخلوط شد. ضریب پرشدگی، دما و سرعت چرخاننده مخلوط‌کن طوری تنظیم شد تا واکنش سیلانی‌شدن انجام شود. سپس، پیمانه اصلی با سامانه پخت روی آسیاب دوغلتکی مخلوط و در نهایت نمونه زیر فشار در دمای ۱۶۰°C پخت شد.

یافته‌ها: در توافق با نتایج مدل‌سازی، آزمون کشش کامپوزیت نشان داد، مهم‌ترین عامل کنترل‌کننده، نوع اتصال لاستیک-پرکننده در ناحیه بین‌فازی است. نتایج شبیه‌سازی بیانگر این بود که درنظرگرفتن لغزش اصطکاکی در ناحیه بین‌فازی سبب کاهش انتقال تنش از ماتریس به ذره شد. در حالی‌که در مدل‌های با ناحیه بین‌فازی کاملاً مقید، به‌دلیل انتقال کامل تنش از ذره به ماتریس، خواص مکانیکی انحراف شایان توجهی نسبت به نتایج تجربی نشان داد. همچنین، مدل سه‌بعدی پیش‌بینی‌های بهتری نسبت به مدل دوبعدی ارائه کرد.

واژه‌های کلیدی
آمیزه تایر،
مدل‌سازی چندمقیاسی،
اجزای محدود،
خواص مکانیکی،
بین‌فازی

*مسئول مکاتبات، پیام‌نگار:
m.karabi@ippi.ac.ir

مقدمه

با وجود چند دهه پژوهش با هدف فهم اثر ناحیه بین‌فازی بر عملکرد مکانیکی مواد کامپوزیتی، در حال حاضر امکان پیش‌بینی دقیق خواص مکانیکی کامپوزیت‌های پلیمری به‌طور مستقیم از اجزای مولکولی آن‌ها وجود ندارد. پژوهش‌های تجربی بسیاری برای تعیین ویژگی‌های کامپوزیت‌ها انجام شده است، اما به‌دلیل تفاوت در روش‌های تجربی استفاده‌شده، این بررسی‌ها نتایج بسیار متفاوتی ارائه کرده‌اند. این تفاوت در نتایج به کمبود روش‌های مناسب برای اندازه‌گیری‌های مستقیم در مقیاس نانو، محدودیت‌های اندازه نمونه، عدم قطعیت در اطلاعات به‌دست‌آمده از اندازه‌گیری غیرمستقیم، ناکافی‌بودن روش‌های آماده‌سازی نمونه‌ها و پراکنش نامناسب نانوذرات مرتبط است [۱،۲]. بنابراین، روش‌های تجربی اغلب برای بررسی دقیق جزئیات مولکولی ناحیه بین‌فازی از دقت قابل اعتمادی برخوردار نیستند. برای غلبه بر این چالش، از طرح‌های مختلف نظری، تجربی و محاسباتی استفاده می‌شود تا با درک سازوکارهای اصلی فیزیکی در مقیاس‌های مکانی و زمانی مربوط برای پیش‌بینی و تنظیم رفتارهای حاکم در نانومقیاس، از این راه عملکرد مکانیکی کامپوزیت‌ها را پیش‌بینی کند [۳].

مهم‌ترین خاصیت فیزیکی آمیزه‌های پایه‌لاستیکی، مقدار کشش‌پذیری زیاد آن‌ها زیر تنش‌های کم و وابستگی تنش به تاریخچه کرنش است. آمیزه‌های پایه‌لاستیکی در برابر تغییر حجم مقاومت می‌کنند و رفتار آن‌ها زیر نیروی فشاری از تمام جهت‌ها، به سمت حالت تراکم‌ناپذیر تغییر می‌یابد [۴]. چنین پدیده‌ای به تغییرات کرنش تقریباً صفر منجر می‌شود و بنا به قانون ساده هوک، مدول به سمت بی‌نهایت میل می‌کند. بنابراین محاسبه تنش با توجه به تغییرنکردن کرنش، با این روش قابل دستیابی نیست. از این‌رو، به‌جای تحلیل کرنش، از تحلیل انرژی کرنش استفاده می‌شود [۵]. بنابراین، مدل ابرکشسان به‌منظور توصیف رفتار کشسان غیرخطی شبکه لاستیکی اتصال عرضی‌شده به‌کار می‌رود [۶]. پس از بارگذاری–باربرداری از آمیزه لاستیکی، شبکه اتصال‌های عرضی می‌تواند شکل اصلی خود را بازیابی کند که به پاسخ مکانیکی ابرکشسان غیرخطی منجر می‌شود. در مقابل، خزش زنجیرهای آزاد موجود برگشت‌ناپذیر است و باعث اتلاف انرژی و پاسخ مکانیکی گران‌رو می‌شود [۷،۸]. بنابراین، برای توسعه معادله حاکم که رفتار مکانیکی الاستومرها را به‌طور دقیق توصیف کند، پاسخ آن‌ها به‌صورت گران‌روکشسان است.

بررسی‌ها نشان می‌دهد، با وجود مطالعات تجربی فراوانی که درباره این موضوع انجام شده هنوز مطالعات نظری عمیق به‌ویژه استفاده از مدل‌های عددی و ریاضی برای رسیدن به درک جامع و عمیق از سازوکارهای حاکم بر برهم‌کنش بین اجزای مختلف آمیزه‌های لاستیکی بسیار ناچیز و انگشت‌شمار است. مهم‌ترین مسئله آن است که برهم‌کنش‌ها و پاسخ‌ها در مقیاس‌های بسیار کوچک روی داده است، اما رفتارها در مقیاس‌های بزرگ و ماکرو دیده می‌شوند.

بر این اساس به‌نظر می‌رسد، اگر مدل‌سازی به‌صورت چندمقیاسی انجام شده و بین نتایج ارتباط برقرار شود، در آن صورت شناخت عمیق‌تر و درک جامع‌تری از ارتباط بین ساختار و خواص حاصل می‌شود. در همین راستا، Hammerand و همکاران [۹] مقایسه‌ای میان مدل تحلیلی Mori-Tanaka و روش شبیه‌سازی محاسباتی را با آزمون جزء محدود برای نانوکامپوزیت‌های اپوکسی–نانولوله‌های کربن تک‌دیواره انجام دادند. با ایجاد جزء حجمی نماینده (representative volume element, RVE) متشکل از نانولوله و ماتریس و انتخاب شرایط مرزی مناسب، با استفاده از نتایج جزء محدود، خواص کشسان به‌دست آمد. دو پیکربندی متفاوت برای حالت پراکنش‌یافته شامل آرایه شش‌ضلعی دوره‌ای از نانولوله‌ها و حالت خوشه‌ای با انحراف از آرایه دوره‌ای شش‌ضلعی درنظر گرفته شد. همچنین در RVE ایجادشده، اندازه و سختی ناحیه بین‌فازی احاطه‌کننده نانولوله‌ها، یکسان لحاظ شد. فرض دیگر این بود، ناحیه بین‌فازی کاملاً به نانولوله‌ها و ماتریس پیوند دارد. Deng و همکاران [۱۰]، به‌منظور برآورد مدول لاستیک بوتادی‌ان تقویت‌شده با دوده از شبیه‌سازی جزء محدود دوبعدی استفاده کردند. در این شبیه‌سازی، چند کره صلب در فاصله‌های مختلف روی ماتریس درنظر گرفته شد. به‌منظور محاسبه تغییرشکل بزرگ و با فرض رفتار کشسان خطی پلیمر، از گزینه Nlgeom (هندسه غیرخطی) در نرم‌افزار Abaqus استفاده شد. از طرفی، از کشانش بین‌فازی و پیروی نیروهای چسبندگی با فاصله‌گرفتن از ذرات صرف‌نظر شد. Pisano و همکاران [۱۱] اثر جدایش در کامپوزیت‌های تقویت‌شده با خاک رس را در یک مدل‌سازی چندمقیاسی دوبعدی مطالعه کردند. مدل‌سازی با انتخاب RVE با توزیع تصادفی ذرات رس در ماتریس پلیمری انجام شد.

در مطالعه شجاعی و همکاران [۱۲] جزء محدود چندمقیاسی با دو RVE مختلف برای برآورد خواص مکانیکی اسفنج اتیلن پروپیلن دی‌ان مونومر (EPDM) تقویت‌شده با نانولوله‌های کربن چنددیواره انجام شد. این تحلیل در دو مرحله انجام شد. در مرحله اول، رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری تحت کشش تک‌محوری پیش‌بینی شد. در مرحله دوم، رفتار کلی اسفنج با اجرای نتایج مرحله اول در مدل جدید با مقیاس ابعادی متفاوت پیش‌بینی شد. مدل ابرکشسان Ogden تنها با آزمون کشش EPDM برای پیش‌بینی رفتار ماتریس

پلیمری به‌کار گرفته شد. برای اعتبارسنجی مدل، نتایج بررسی عددی با نتایج حاصل از آزمون کشش اسفنج تقویت‌شده با نانوذرات مقایسه شد. Wan و همکاران [۱۳] خواص RVE را در نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربن محاسبه کردند. فرض بر این بود که ناحیه بین‌فازی ضخامتی حدود ۱/۳۵ nm و مدول متغیری بین ۳ تا ۱۰ برابر مدول ماتریس دارد. همچنین، رفتار ناحیه بین‌فازی به‌صورت همسان‌گرد فرض شد. در پژوهش دیگری علیمردانی و همکاران [۱۴] خواص مکانیکی کامپوزیت‌های SSBR–سیلیکا را به‌کمک بررسی جزء محدود دوبعدی با لایه‌های بین‌فازی پیش‌بینی کردند. در این مطالعه، رفتار ماتریس و ناحیه بین‌فازی با مدل‌های ابرگران‌روکشسان با استفاده از مجموعه‌های Neo-Hookean و خطی Prony مدل‌سازی شد. نتایج نشان داد، لایه‌های بین‌فازی قابلیت کاهش نیروی محرکه تشکیل و رشد ترک را دارند.

ارزیابی پدیده‌های بین‌سطحی لاستیک–پرکننده و تفکیک سهم آن از سازگاری میان دو جزء از نکاتی است که در مطالعات پیشین به آن توجهی نشده است. سؤال کلیدی، ارتباط عواملی نظیر، برهم‌کنش پلیمر–پرکننده، چگونگی انتقال تنش بین ماتریس و تقویت‌کننده و کیفیت اتصال در ناحیه بین‌فازی با رفتار ابرگران‌روکشسان است. از آنجا که کاهش تحرک مولکولی زنجیرهای لاستیکی مهم‌ترین سازوکار تقویت‌کنندگی ماتریس‌های لاستیکی با پرکننده‌های تقویت‌کننده در ماتریس‌های بسیار پرشده است، در این پژوهش، رفتار متفاوت زنجیرها در ناحیه بین‌فازی و اثر آن بر خواص مکانیکی در حالت‌های دوبعدی و سه‌بعدی بررسی شده است.

هدف مقاله حاضر تدوین و تفکیک پدیده‌های بین‌سطحی پلیمر–پرکننده شامل حالت‌های کاملاً مقید (استفاده از گره) و ترکیبی از حالت لغزشی (استفاده از اصطکاک) و تنش بهنجار (نرمال) برای ناحیه بین‌فازی و اثر نوع اتصال پلیمر–پرکننده بر خواص مکانیکی است. برای این کار، با استفاده از مدل‌سازی ریزساختاری جزء محدود، چگونگی تغییر خواص مکانیکی با پدیده‌های بین‌سطحی متفاوت بررسی می‌شود. در مطالعه حاضر، ضخامت ناحیه بین‌فازی بین ذره و ماتریس لاستیکی با اندازه‌گیری تجربی مقدار لاستیک مقید (bound rubber content, BRC) تخمین زده شد. سپس، مدل ریزساختاری با شرایط مرزی مناسب، میدان‌های تنش و کرنش را با دقت کافی پیش‌بینی می‌کند و رفتار مکانیکی آن در یک آزمون کشش تک‌محوری با رفتار تجربی آمیزه لاستیکی مقایسه خواهد شد که بیشترین نزدیکی ریزساختاری را با پیش‌فرض‌های مدل دارد.

تجربی

مواد

مشخصات مواد استفاده‌شده در این پژوهش در جدول ۱ آمده است.

دستگاه‌ها و روش‌ها

به‌منظور تهیه کامپوزیت، یک فرایند سه‌مرحله‌ای درنظر گرفته شد. در مرحله اول، لاستیک استیرن بوتادی‌ان محلولی (SSBR) با نام تجاری SOL-C6450SL با سیلیکا (MANSIL-175G) دارای سطح ویژه ۱۷۱ m^2/g و جفت‌کننده سیلانی Si-69 درون داخل مخلوط‌کن داخلی Banbury ساخت شرکت Farrel (انگلستان) ترکیب شد. ضریب پرشدگی، دما و سرعت چرخاننده به‌ترتیب روی ۰/۷۵، ۵۰°C و ۱۰۰ rpm تنظیم شد. هنگامی که دما به ۱۴۰°C رسید، سرعت چرخاننده به‌طور دستی کاهش یافت و در این دما برای انجام واکنش سیلانی‌شدن نگه داشته شد. پس از آن، نمونه‌ها درون آسیاب دوغلتکی مدل Polymix 200 L ساخت شرکت Schwabenthan (آلمان) مخلوط و سپس خنک شدند. در مرحله دوم، اختلاط نمونه درون مخلوط‌کن انجام شده و شتاب‌دهنده DPG به آن اضافه شد. ضریب پرشدگی، دما و سرعت چرخاننده به‌ترتیب روی ۰/۷۰، ۵۰°C و ۱۰۰ rpm تنظیم شد. دمای سیلانی‌شدن نهایی درون مخلوط‌کن با تنظیم دستی سرعت چرخاننده روی ۱۴۰°C ثابت نگه داشته شد. در مرحله سوم نمونه با سامانه پخت مخلوط شد. ضریب پرشدگی، دما و سرعت چرخاننده به‌ترتیب روی ۰/۶۵، ۵۰°C و ۶۰ rpm تنظیم شد. سپس همانند مرحله قبل، نمونه روی آسیاب دوغلتکی مخلوط و در نهایت نمونه پخت‌شده با قالب‌گیری زیر فشار در دمای ۱۶۰°C تهیه شد. انجام واکنش سیلانی‌شدن درون مخلوط‌کن داخلی با تجزیه‌گر فرایند لاستیک (rubber process analyzer, RPA) مدل RPA 2000 ساخت شرکت Alpha Technologies انگلستان و به‌صورت روبش کرنش (اثر Payne) در پژوهش پیشین تأیید شد [۱۵]. فرمول‌بندی آمیزه تهیه‌شده و نام شرکت تولیدکننده هر یک از مواد در جدول ۱ آمده است.

نمونه دمبلی با دستگاه کشش HIWA، مطابق با استاندارد ASTM D412 در آزمون کشش تک‌محوری قرار گرفت [۱۶]. به‌منظور اندازه‌گیری تراکم‌پذیری آمیزه، آزمون حجم‌سنجی مطابق با کار پیشین [۶] انجام شد که در آن کاهش حجم نمونه لاستیک تحت بارگذاری محدود اندازه‌گیری شد. این آزمون با دستگاه کشش مدل HIWA 200 (ایران) انجام شد. به‌منظور تعیین مقدار لاستیک مقید، مقدار ۰/۲۵ g از نمونه پخت‌نشده در ۴۰ mL حلال تولوئن در دمای ۲۵°C غوطه‌ور شد.

جدول ۱- فرمول‌بندی نمونه‌ها و شرکت‌های تولیدکننده مواد.
Table 1. Formulation of samples and material product companies.

Ingredients	Amount (phr)	Supplier
SSBR	100	Kumho (South Korea)
Silica	60	Gujarat Multi Gas (India)
Si-69	6	Evonik (Germany)
IPPD [1]	1.5	Duslo (Slovakia)
Zinc oxide (ZnO)	3	Rangineh Pars (Iran)
Stearic acid (SA)	1	Unichema International (Netherlands)
1,3-Diphenyl guanidine (DPG)	1.2	Rhein Chemie (Germany)
CBS [2]	1.5	Vulkacit CZ (China)
Sulfur	1.4	Rangineh Pars (Iran)

(1) N-isopropyl-N′-phenyl-p-phenylenediamine, (2) N-cyclohexyl-2-benzothiazole sulfenamide.

پس از ۷ روز، نمونه از حلال خارج و در دمای ۸۰°C درون آون خلأ به‌مدت ۲۴ h قرار گرفت و سپس وزن نمونه تعیین شد. BRC از معادله (۱) به‌دست آمد [۱۷]:

$$BRC = (\frac{m_d - m_f}{m_m}) \times 100 \quad (۱)$$

در این معادله، m_d وزن نمونه پس از خشک‌شدن، m_f وزن پرکننده و m_m وزن ماتریس در نمونه اولیه هستند.

نظری

هندسه مدل

در این مطالعه، آمیزه لاستیکی بسیار پرشده به‌صورت آرایش منظم از نوع مربع دارای ذرات تقویت‌کننده کروی سیلیکا در حالت دوبعدی و مکعب مربع دارای ذرات تقویت‌کننده کروی سیلیکا در حالت سه‌بعدی درنظر گرفته شد. در اطراف مدل‌ها، میدان تنش و کرنش در توافق با رفتار مکانیکی کلی کامپوزیت برقرار شد. به‌منظور شبیه‌سازی دوبعدی، مدل‌سازی به‌صورت تقارن محوری درنظر گرفته شد. زیرا در مدل تنش صفحه‌ای، شکل پرکننده به‌صورت صفحه‌ای فرض شده و اثرهای حجمی با اثرهای سطحی جایگزین می‌شود. پیش‌فرض‌های مدل‌های دوبعدی و سه‌بعدی، شامل مواردی از قبیل تمرکز تمام حجم تقویت‌کننده در یک ذره در مدل کامپوزیت لاستیکی، درنظرگرفتن تمام آثار بین‌سطحی تقویت‌کننده با اضافه‌کردن بخش سوم به مدل با نام ناحیه بین‌فازی و تبیین اثرهای بین‌سطحی مانند کاملاً مقید و لغزش اصطکاکی با تعریف برهم‌کنش‌ها بین ماتریس و ذره است. سازوکار تقویت‌کنندگی ناشی از وجود ذرات سیلیکا با درنظرگرفتن یک ذره سیلیکا منفرد درون ماتریس لاستیک مربوط به حجم اشغال‌شده به‌وسیله پرکننده در آمیزه دارای ۶۰ phr سیلیکا درنظر گرفته شد. با توجه به تصاویر میکروسکوپی از کامپوزیت تقویت‌شده با ۶۰ phr سیلیکا، مشخص شده است، اندازه ذره حدود پنج تا هشت برابر اندازه واقعی یک انبوهه است [۱۸]. هندسه استفاده‌شده در حالت دوبعدی، صفحه‌ای است که با چرخش ۳۶۵ درجه حول محور تقارن به استوانه‌ای با اندازه ذره ۷۱۵ nm تبدیل می‌شود. برای حالت سه‌بعدی نیز همین اندازه ذره برای نمایندگی از آمیزه دارای ۶۰ phr سیلیکا درنظر گرفته شد. رفتار ذرات تقویت‌کننده سیلیکایی به‌صورت کشسان خطی با مدول یانگ ۷۰ GPa و نسبت پواسون ۰/۱۷ فرض شد [۱۹،۲۰]. ضخامت ناحیه بین‌فازی با انجام آزمون BRC تعیین و برابر ٪۳۱ حجم کل لاستیک درنظر گرفته شد. چنین حجمی با ایجاد پوسته‌ای با فاصله ۱۶۳ nm نسبت به سطح پرکننده قابل لحاظ است. بنابراین مقادیر کسر حجمی ماتریس، ناحیه بین‌فازی و پرکننده به‌ترتیب ۵۲، ۲۵ و ٪۲۳ درنظر گرفته شد. هندسه مدل‌های طراحی‌شده در شکل ۱ نشان داده شده است.

معادله حاکم

به‌منظور توصیف رفتار مکانیکی پیچیده کامپوزیت پایه‌لاستیکی، از مدل‌های چندگانه متشکل از یک معادله ابرکشسان و یک معادله گران‌روکشسان غیرخطی استفاده شد که در ادامه هر یک معرفی می‌شوند.

ابرکشسان

پاسخ کشسان لحظه‌ای آمیزه لاستیکی، منحنی تنش-کرنش بسیار غیرخطی را نشان می‌دهد. افزون بر این، رفتار مواد ترکیبی از SSBR با یک تقویت‌کننده کروی مانند سیلیکا ممکن است، به‌خوبی با مدل‌های ابرکشسان سنتی مانند Arruda-Boyce یا بر پایه کشش مانند معادله Ogden که معمولاً برای الاستومرها استفاده می‌شود، توصیف نشود. بنابراین، برای انطباق مناسب، مدل معروف Yeoh انتخاب شد که به‌صورت معادله (۲) تعریف می‌شود [۲۱]:

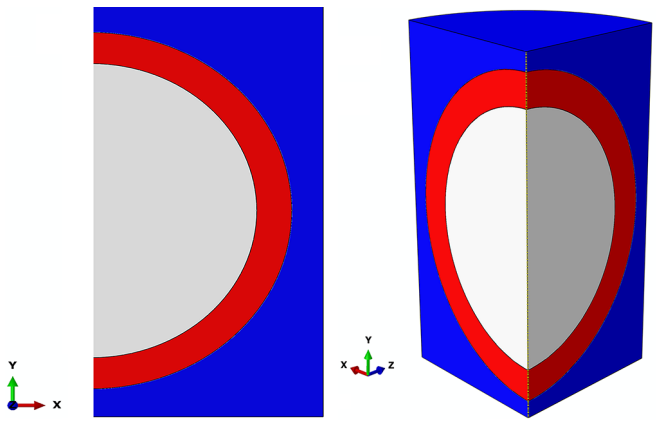
$$W = \sum_{j=1}^{3} C_{i0} (\bar{I}_1 - 3)^i + \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{D_k} (J-1)^{2k} \quad (۲)$$

در این معادله، J نسبت حجم پیش و پس از تغییرشکل است. C_{i0} و D_k پارامترهای ماده هستند. برای مواد تراکم‌ناپذیر $J = 1$ است. $\bar{I}_1$ اولین ناورده تانسور کرنش Caushy-Green است. برای کشش تک‌محوری، کشش‌های اصلی $\lambda_1=\lambda$ و $\lambda_1=\lambda_2$ است. از تراکم ناپذیری $\lambda_1\lambda_2\lambda_3 = 1$ نتیجه می‌شود. بنابراین، $\lambda_2^2+\lambda_3^2=\frac{1}{\lambda}$. از این‌رو:

$$\bar{I}_1=\lambda_1^2+\lambda_2^2+\lambda_3^2=\lambda^2+\frac{2}{\lambda} \qquad (۳)$$

λ نسبت کشش اصلی از آزمون تک‌محوری مربوط به مقدار محاسبه‌شده $\bar{I}_1$ در یک تغییرشکل پیچیده سه‌بعدی است. برتری اصلی این مدل آن است که تنها لازم است، مقادیر عددی داده‌های تنش-کرنش به‌دست‌آمده از یک آزمون کشش تک‌محوری را به‌دست آورد تا رفتار دقیق مستقل از زمان (لحظه‌ای کشسان) را به‌درستی نشان دهد. به‌طور مشابه، برای تعریف پاسخ حجمی، داده‌های آزمون حجمی نیز باید وارد شود. در انتخاب مدل ابرکشسان، پیش‌بینی دقیق رفتار تنش-کرنش تجربی و حفظ شرط پایداری از اصول اولیه است. به‌منظور تعیین محدوده‌ای از کرنش مجاز که در آن مدل‌های نام‌برده پایداری لازم را در پیش‌بینی خواص مکانیکی داشته باشند، از ضابطه پایداری Drucker استفاده شد. شرط پایداری رابطه، مثبت‌بودن ضرب نقطه‌ای تغییر جزئی تنش در کرنش لگاریتمی به‌عنوان معیاری از چگالی انرژی کرنشی بوده که در معادله (۴) آمده است [۲۲]:

$$d\sigma : d\varepsilon > 0 \qquad (۴)$$



(a) (b)

شکل ۱- هندسه مدل طراحی‌شده کامپوزیت با ناحیه بین‌فازی: (a) مدل دوبعدی و (b) مدل سه‌بعدی.

Fig. 1. Geometry of the generated composite model with interphase: (a) 2D model and (b) 3D model.

گران‌روکشسان

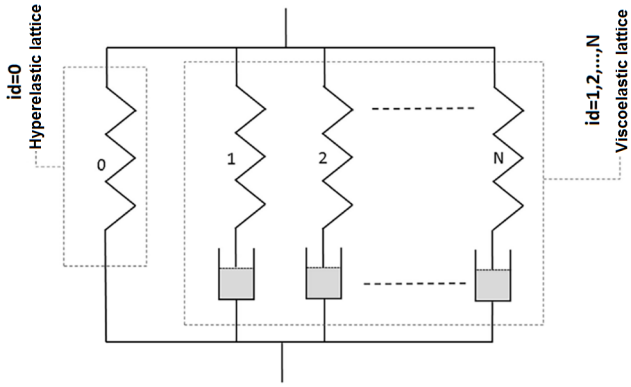
رفتار گران‌روکشسان غیرخطی کامپوزیت‌های پایه‌لاستیکی با چارچوب رئولوژیکی موازی (parallel rheological framework, PRF) مدل‌سازی شد که در شکل ۲ نشان داده شده است [۲۳]. فرض بر این است که رفتار گران‌روکشسان نمونه‌ها با چگالی انرژی کرنش کل (W_T) توصیف می‌شود که با مجموع مقادیر چگالی انرژی کرنش هر شبکه مجزا (W_i) (همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است) با ضریب وزنی مرتبط (S_i) به‌شکل معادله (۵) تعریف می‌شود:

$$W_T=\sum_{i=0}^{N} S_i W_i \qquad (۵)$$

در این معادله، id=۰ شبکه به زمان مستقل یا ابرکشسان مربوط است، در حالی که id=۱,۲,...,N شبکه دیگر به بخش‌های وابسته به زمان یا گران‌روکشسان مربوط است. پارامتر N یک عدد صحیح دلخواه است. این عدد به‌طور کلی بر اساس برازش مناسب تعیین می‌شود. گرادیان تانسور تغییرشکل در بخش‌های گران‌روکشسان (F) با ضرب بخش‌های کشسان و گران‌روکشسان به‌صورت معادله (۶) تعریف می‌شود:

$$F=F_i^e F_i^{cr} \qquad i=1,2,...,N \qquad (۶)$$

در این معادله F^e_i و F^{cr}_i به‌ترتیب بخش کشسان و خزشی گرادیان تغییرشکل در شبکه گران‌روکشسان هستند. اگرچه F^e_i با استفاده از شکل کلاسیک آن محاسبه می‌شود، اما F^{cr}_i معمولاً با ادغام زمانی بر اساس شکل گرادیان تغییرشکل خزشی (F^{cr}_i) که برای یک ماده همسان‌گرد نوشته شده است، محاسبه می‌شود. مانند:



شکل ۲- طرح‌واره مدل چارچوب رئولوژیکی موازی برای آمیزه لاستیکی.

Fig. 2. The Schematic of the parallel rheological framework (PRF) model for rubber compound.

$$\dot{F}^{cr} = F^{e^{-1}}.D^{cr}.F^{e}.F^{cr} \quad (۷)$$

که D^{cr} قانون جریان است و با معادله (۸) بیان می‌شود:

$$D^{cr} = \frac{3}{2\tilde{q}}\dot{\bar{\varepsilon}}^{cr}\bar{\tau} \quad (۸)$$

که در آن $\tilde{q} = J\bar{q}$ (J تعیین‌کننده گرادیان تغییرشکل و q معادل تنش Cauchy انحرافی است)، $\bar{\tau}$ تنش کیرشهف انحرافی و $\dot{\bar{\varepsilon}}^{cr}$ مقدار کرنش خزشی معادل است. برای تکمیل فرمول خزش، یک قانون تکامل برای $\dot{\bar{\varepsilon}}^{cr}$ باید داده شود. شکل زیر که به‌عنوان سخت‌شوندگی کرنشی مدل قانون توانی شناخته می‌شود، برای این متغیر انتخاب شده است [۲۴]:

$$\dot{\bar{\varepsilon}}^{cr} = (A\tilde{q}^{n}[(m+1)\bar{\varepsilon}^{cr}]^{m})^{\frac{1}{m+1}} \quad (۹)$$

که در آن $\bar{\varepsilon}^{cr}$ معادل کرنش خزشی و m، n و A پارامترهای مربوط به ماده هستند. برای دستیابی به راه‌حل منطقی فیزیکی، A و n باید مثبت و $0 \le m < 1$ باشد.

برهم‌کنش‌ها و شرایط مرزی

برای مدل‌سازی اتصال اشتراکی (کووالانسی) پلیمر-پرکننده در ناحیه بین‌فازی از دستور گره‌زنی Abaqus استفاده شد. این عملگر، تماس کاملاً محدودشده را شبیه‌سازی می‌کند و طی آن از جداشدگی یا سرخوردگی گره‌های سطوح برده نسبت به سطوح چیره ممانعت می‌شود. در نقطه مقابل این نوع برهم‌کنش، ناحیه بین‌فازی از نوع لغزش اصطکاکی وجود دارد که با حذف دستور گره‌زنی ایجاد شده و از آن در ارزیابی اثر جدایش و اصطکاک بین‌سطحی بهره برده می‌شود. از آنجا که برهم‌کنش کاملاً مفید حالت بسیار حدی و دور از فیزیک مسئله بوده، در این مطالعه، شبیه‌سازی برهم‌کنش زنجیر لاستیکی با اتصال سیلانی با فرض ترکیبی از لغزش و اتصال است. در این حالت، افزون بر اعمال تنش برشی که پس از آن لغزش رخ می‌دهد (ضریب اصطکاک)، مقدار تنش نرمال که پس از آن ناحیه بین‌فازی از سطح ذره جدا می‌شود، نیز اعمال می‌شود. این مقدار از کار چسبندگی محاسبه‌شده از انرژی سطحی لاستیک و سیلیکا تخمین زده می‌شود. مقدار کار چسبندگی (w_{adh}) برای آمیزه SSBR تقویت‌شده با ۶۰ phr سیلیکا و دارای جفت‌کننده سیلانی TESPT حدود ۷۵ mN/m محاسبه شده است [۱۸]. بر اساس پتانسیل برهم‌کنش Dugdale ساده‌شده [۲۵]، تنش بهنجار ثابت و برابر با σ_0 است تا زمانی که جدایی بین سطوح از فاصله δ (محدوده عمل پتانسیل جذب‌کننده) فراتر نرود. بنابراین تنش بهنجار با دارابودن کار چسبندگی و فاصله بین سطوح به‌صورت $w_{adh}=\sigma_0\delta$ محاسبه می‌شود. ضریب اصطکاک میان ذرات سیلیکا و لاستیک نیز ۱/۶ درنظر گرفته شد [۲۶]. با توجه به اینکه مدل استفاده‌شده در این مطالعه دارای تقارن محوری است، شرایط مرزی استفاده‌شده در این پژوهش شامل موارد زیر است:

- ثابت نگه‌داشتن صفحه چپ در جهت x (جهت کشش) و آزاد نگه‌داشتن نقاط روی صفحه برای حرکت در جهت y ($U_x=0$)؛
- آزادگذاشتن صفحه بالایی برای حرکت در جهت x و اعمال تغییر مکان طولی برای صفحه سمت راست و
- آزادگذاشتن وجوه جانبی برای حرکت در جهت y و اعمال شرط جابه‌جایی یکسان برای تمام نقاط روی این صفحه در جهت x.

شرایط مرزی دوره‌ای و همگن‌سازی

شرایط مرزی دوره‌ای (periodic boundary conditions, PBCs) مجموعه‌ای از شرایط مرزی هستند که اغلب برای تقریب سامانه ماکرو با استفاده از یک بخش میکرو RVE انتخاب می‌شوند. با استفاده از RVE، شرایط مرزی دوره‌ای و محاسبه نظری همگن‌سازی، محاسبه رفتار مکانیکی ماکرو از تغییرشکل‌های میکروسکوپی ممکن می‌شود. بنابراین، PBC تضمین می‌کند که سطوح خارجی تغییرشکل‌یافته با RVE به‌صورت دوره‌ای باقی می‌مانند. مختصات ماکروسکوپی X به مختصات میکروسکوپی Y با نسبت مقیاس ξ مرتبط می‌شود [۲۷]:

$$Y = \frac{x}{\xi} \quad (۱۰)$$

نسبت مقیاس ξ بسیار کوچک است، بنابراین مقیاس میکرو بسیار کوچک‌تر از ساختار ماکروست. رفتار ماکروسکوپی ماده از میانگین رفتارهای مکانیکی میکروسکوپی مانند متوسط کرنش یا تنش با استفاده از نظریه همگن‌سازی محاسبه می‌شود. جابه‌جایی کل ریزساختار y به جابه‌جایی ریزساختار دوره‌ای w و یک جابه‌جایی یکنواخت Y تقسیم می‌شود:

$$y = \tilde{F}Y + w \quad (۱۱)$$

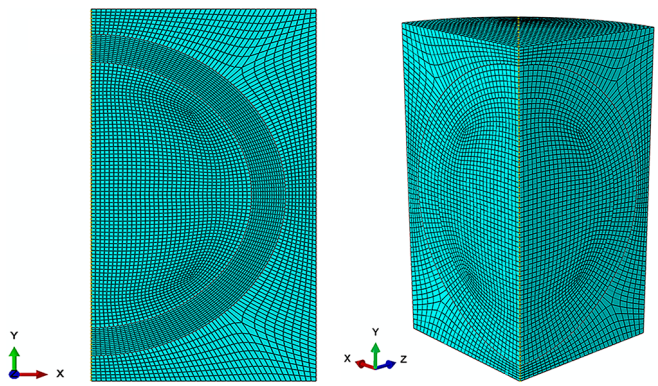
که $\tilde{F}$ تانسور گرادیان تغییرشکل ماکروسکوپی است که برای بررسی روش اجزای محدود به‌عنوان شرایط مرزی تعمیم‌یافته اعمال می‌شود. بنابراین، گرادیان تغییرشکل میکروسکوپی F به‌صورت

معادله (۱۲) محاسبه می‌شود:

$$F = \nabla y = \tilde{F} + \frac{\partial w}{\partial y} \qquad (۱۲)$$

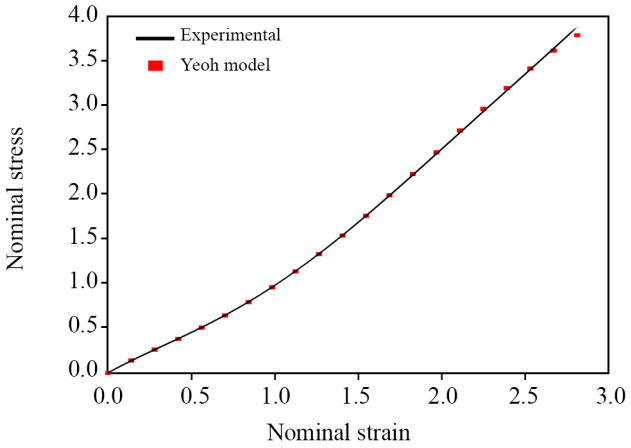
شبکه‌بندی

در این پژوهش، هندسه مدل‌های مطالعه‌شده با اجزای چهارضلعی شبکه‌بندی شد. برای بخش‌های لاستیکی مدل شامل لاستیک آزاد و ناحیه بین‌فازی، از اجزای هیبریدی فرمول‌بندی‌شده بر مبنای کار Herman استفاده شد [۲۸]. با این کار، در درجه‌های آزادی اجزا، ضریب پواسون نزدیک به ۰/۵ لحاظ می‌شود که تراکم‌ناپذیری را به‌همراه دارد. در حالت دوبعدی، دامنه مدل با استفاده از ۲۴۶۴ جزء چهارضلعی خطی از نوع CAX4 برای ذره سیلیکا، ۱۸۶۰ جزء برای ۳۲۴۸ جزء چهارضلعی خطی از نوع CAX4RH برای ماتریس و ناحیه بین‌فازی شبکه‌بندی شد. در حالت سه‌بعدی، دامنه مدل با استفاده از تعداد ۲۳۴۴۶ جزء مکعبی از نوع C3D8 برای ذره سیلیکا و ۴۰۸۷۶ جزء مکعبی از نوع C3D8RH برای ماتریس و ناحیه بین‌فازی شبکه‌بندی شد. از بهسازی شبکه‌بندی انطباقی (adaptive mesh refinement) برای بهینه‌سازی شبکه اجزای محدود و حذف حساسیت پاسخ خروجی به اندازه جزء استفاده شد. با تکرار فرایند کوچک‌سازی اجزای شبکه، شبکه مناسبی تعیین شد که مقدار خطای آن به‌مقدار حداقلی ٪۲ برسد. مدل‌های شبکه‌بندی‌شده دوبعدی و سه‌بعدی در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل ۳- شبکه‌بندی مدل کامپوزیت طراحی‌شده با ناحیه بین‌فازی: (a) مدل دوبعدی و (b) مدل سه‌بعدی.

Fig. 3. The meshing of the generated composite model with interphase: (a) 2D model and (b) 3D model.



شکل ۴- برازش مدل Yeoh روی داده‌های تجربی حاصل از نمودار تنش-کرنش لاستیک SSBR.

Fig. 4. The fitting of the Yeoh model on the experimental data obtained from the stress-strain curve of SSBR.

نتایج و بحث

به‌منظور بررسی پایداری مدل Yeoh برای بخش ابرکشسان نمونه، از شرایط پایداری Drucker استفاده شد که در Abaqus موجود است. برازش مدل Yeoh روی داده‌های تجربی تنش-کرنش برای لاستیک SSBR در شکل ۴ نشان داده شده است. این مدل، زمانی که روی داده‌های تجربی برازش می‌شود، تا کرنش ۳/۵۱ پایدار بوده که بیانگر قابلیت مناسب این مدل در پیش‌بینی رفتار لاستیک SSBR است. پارامترهای حاصل از برازش مدل Yeoh نیز در جدول ۲ آمده است.

به‌منظور بررسی رفتار گران‌روکشسان غیرخطی نمونه تهیه‌شده، آزمون آسایش از تنش در ازدیاد طول‌های مختلف ۳۰، ۶۰ و ٪۹۰ انجام شد. تغییرات تنش مهندسی بهنجارشده (σ/σ_{max}) با زمان برای کامپوزیت تقویت‌شده با ۶۰ phr سیلیکا در شکل ۵ نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، منحنی‌ها با یکدیگر منطبق نیستند، بدین معنی که رفتار گران‌روکشسان در این نمونه‌ها به کرنش اولیه

جدول ۲- پارامترهای مدل Yeoh حاصل از برازش روی منحنی تنش- کرنش لاستیک SSBR.

Table 2. The parameters of the Yeoh model result from fitting on the stress-strain curve of SSBR.

Parameter	Amount (MPa)
C_{10}	0.19
C_{20}	2.61×10^{-2}
C_{30}	-7.04×10^{-4}

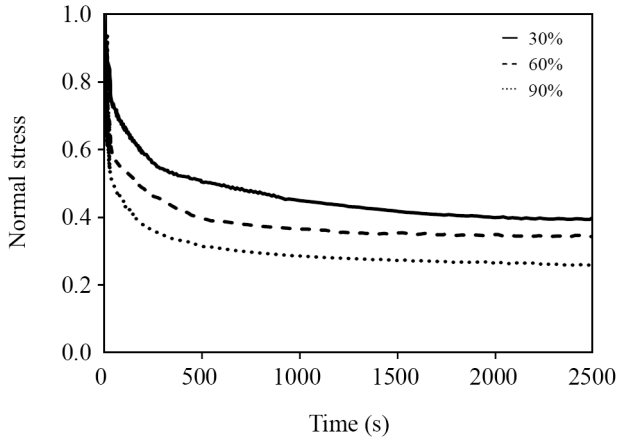
جدول ۳- پارامترهای مدل گران‌روکشسان غیرخطی PRF برای آمیزه SSBR تقویت‌شده با سیلیکا.

Table 3. Parameters of PRF nonlinear viscoelastic model for silica-reinforced SSBR compound.

Parameter	Amount	
	Network 1	Network 2
S	0.34	0.14
A	2.79	2.03
n	2.46	3.18
m	-0.63	-0.36

اعمال‌شده بستگی دارد. این نتیجه به‌وضوح نشان می‌دهد، رفتار گران‌روکشسان نمونه غیرخطی است. دلایل اصلی این رفتار به تفاوت بین رفتار مکانیکی SSBR به‌عنوان الاستومر با زنجیرهای انعطاف‌پذیر و سیلیکا به‌عنوان ذره کروی صلب با رفتار کشسان و نیز جدایش اتصال پلیمر–پرکننده و ایجاد شبکه‌های پرکننده–پرکننده به‌ویژه در کرنش‌های بیشتر مرتبط است.

در جدول ۳ پارامترهای مدل گران‌روکشسان غیرخطی PRF نشان داده شده است. همان‌طور که از داده‌های ارائه‌شده در این جدول دیده می‌شود، دو شبکه برای کامپوزیت (N=۲) در رابطه انتخاب شد. مهم‌ترین نتیجه‌ای که از داده‌ها به‌دست می‌آید، غیرخطی‌بودن رفتار گران‌روکشسان کامپوزیت‌ها، به‌ویژه در کرنش‌های بزرگ است که به زنجیرهای پلیمری و شبکه پرکننده نسبت داده می‌شود. حین آسایش از تنش، پدیده‌های شکستن و لغزش زنجیرها، جدایش زنجیرهای

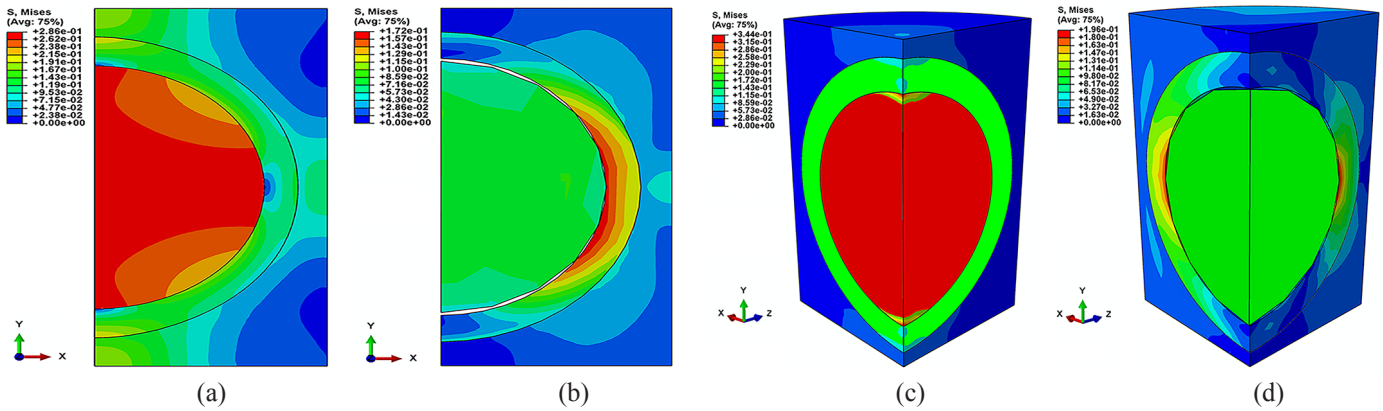


شکل ۵- کاهش تنش کامپوزیت SSBR تقویت‌شده با سیلیکا در سه ازدیاد طول مختلف ۳۰، ۶۰ و ۹۰٪.

Fig. 5. The stress reduction of SSBR composite reinforced with silica in three different elongations of 30%, 60% and 90%.

پلیمر از سطح پرکننده و نیز تخریب شبکه پرکننده، منابع اصلی رفتار غیرخطی هستند [۲۷]. انحراف پارامترهای m و n به‌ترتیب از مقادیر ۰ و ۱ به‌دلیل درجه‌ای از غیرخطی‌بودن رفتار گران‌روکشسان مواد است. این نتایج نشان می‌دهد، هر دو پارامتر با مقادیر ذکرشده فاصله دارند و رفتار گران‌روکشسان غیرخطی کامپوزیت‌های تهیه‌شده را تأیید می‌کند.

در شکل ۶ نتایج شبیه‌سازی به‌شکل تغییرات تنش در چهار مدل RVE مختلف شامل دوبعدی کاملاً مقید، دوبعدی همراه با لغزش–اتصال، سه‌بعدی کاملاً مقید و سه‌بعدی همراه با لغزش–اتصال



شکل ۶- مقدار تنش مدل‌های ریزساختاری دوبعدی و سه‌بعدی با ناحیه بین‌فازی مختلف: (a) دوبعدی کاملاً مقید، (b) دوبعدی همراه با لغزش–اتصال، (c) سه‌بعدی کاملاً مقید و (d) سه‌بعدی همراه با لغزش–اتصال (واحد تنش در تمام شکل‌ها، MPa است).

Fig. 6. The stress level of 2D and 3D microstructural models with different interphases: (a) 2D completely bonded, (b) 2D with slip-bond, (c) 3D completely bonded, and (d) 3D with slip-bond (unit of stress in all figures is MPa).

جدول ۴- خواص مکانیکی آمیزه و مدل‌های ریزساختاری دوبعدی و سه‌بعدی.

Table 4. Compound mechanical properties and 2D and 3D microstructural models.

Mechanical Properties	Compund	2D	3D	Proposed 2D	Propose 3D
Tensile strength (MPa)	0.222 ± 0.008	0.286	0.344	0.172	0.196
Difference with Experimental (%)	-	28.83	54.95	-22.52	-11.71
Strain	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
Modulus (kPa)	4.56 ± 0.35	6.75	8.10	0.60	4.63
Difference with Compund (%)	-	48.20	77.85	-11.08	-1.62

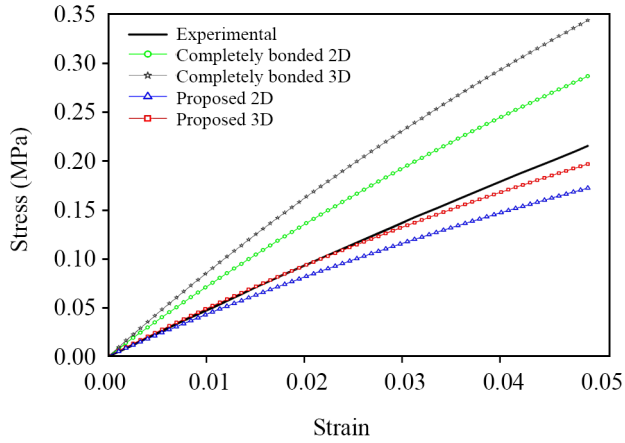
نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، در تمام مدل‌ها، تمرکز تنش در همسایگی ذرات به حداکثر مقدار رسیده است. این مشاهده با مطالعات دیگر نیز هم‌خوانی دارد [۲۹،۳۰]. از طرفی، در مدل‌هایی که اتصال کامل بین ذره و ماتریس درنظر گرفته شده است، جدایش به کمترین مقدار رسیده و انتقال تنش به‌خوبی از ماتریس به ذرات انجام شده است. همچنین، در مدل‌های سه‌بعدی انتقال تنش به ذره بیشتر از مدل‌های دوبعدی رخ داده است. بیشترین مقادیر تنش محوری در نواحی در راستای محور Y است که به‌دلیل اتصال گرهی بین پلیمر و پرکننده تمرکز تنش زیادی در این نواحی ایجاد می‌شود. نواحی موجود در راستای X و Z ذره، مقدار تنش کششی کمتری را تجربه می‌کنند و نواحی بینابین این دو ناحیه، مقادیر میانگینی از این دو مقدار را خواهند داشت. با ترکیبی از اتصال گرهی و لغزش میان پلیمر و سطح پرکننده، توزیع تنش تغییر می‌کند و در راستای Y مقدار تنش کمتر، اما در راستای X و Z بیشترین مقدار تنش را خواهند داشت.

منحنی‌های تنش-کرنش مدل‌های شبیه‌سازی‌شده و نمونه تجربی تهیه‌شده در شکل ۷ مقایسه شده‌اند. همان‌طور که دیده می‌شود، درنظرگرفتن ناحیه بین‌فازی کاملاً مقید، انحراف بسیار بیشتری نسبت به نتایج داده‌های تنش-کرنش نمونه تهیه‌شده به‌صورت تجربی نشان داده است. با وجود این، مدل سه‌بعدی نتایج بهتری نسبت به مدل دوبعدی ارائه کرده است. اما باید درنظر داشت، شبیه‌سازی سه‌بعدی با مشکل زمان تحلیل زیاد همراه است. دلیل بیشتربودن تنش در مدل‌های سه‌بعدی نسبت به مدل‌های دوبعدی، انتقال بهتر تنش از ماتریس به ذره است که در شکل ۶ نیز به‌وضوح دیده می‌شود. در جدول ۴ مقادیر استحکام کششی و مدول در ازدیاد طول تا شکست ثابت برابر با ٪۵ برای کامپوزیت تهیه‌شده و نیز مدل‌های ریزساختاری دوبعدی و سه‌بعدی کاملاً مقید و حالت پیشنهادی همراه با لغزش-اتصال با یکدیگر مقایسه شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، بیشترین استحکام کششی و مدول در نمونه سه‌بعدی به‌همراه ناحیه بین‌فازی کاملاً مقید نتیجه شده است. در حالی که مدل‌های ساختاری دارای لغزش اصطکاکی در حالت دوبعدی و نیز در حالت سه‌بعدی، دارای نتایج نزدیک‌تری به نتایج تجربی است. فرض اتصال کامل در حالت سه‌بعدی به پیش‌بینی بیش از حد تنش منجر شده است. زیرا در واقعیت، مقداری لغزش نیز بین زنجیرها و ذرات وجود دارد. با واردکردن نتایج حاصل از آزمون حجم‌سنجی آمیزه و داده‌های تنش-کرنش آمیزه و هر یک از مدل‌ها، تراکم‌پذیری آن‌ها با نرم‌افزار Abaqus ارزیابی می‌شود. تراکم‌پذیری نسبی یک ماده به نسبت مدول حجمی اولیه به مدول برشی اولیه ($\xi=k_0/\mu_0$) وابسته است. این نسبت برحسب ضریب پواسون (ν) به‌صورت معادله (۱۳) بیان می‌شود [۳۱]:

جدول ۵- پارامترهای حاصل از برازش و ضریب پواسون برای آمیزه و مدل‌های ریزساختاری دوبعدی و سه‌بعدی.

Table 5. The parameters resulting from fitting and Poisson's ratio for compound and 2D and 3D microstructural.

Parameter	Compund	2D	3D	Proposed 2D	Propose 3D
C_{10}	0.735	1.199	1.439	0.719	0.822
D_1	0.175	0.175	0.175	0.175	0.175
ξ	7.768	4.760	3.967	7.934	6.942
υ	0.438	0.402	0.384	0.440	0.431
Difference with Compund (%)	-	-8.22	-12.33	0.46	-1.60



شکل ۷- نمودار تنش-کرنش تجربی و مقایسه آن با مدل‌های ریزساختاری دوبعدی و سه‌بعدی کاملاً مقید و همراه با لغزش-اتصال.

Fig. 7. Experimental stress-strain curve and its comparison with completely bonded 2D and 3D microstructural models with slip-bond.

$$\nu = \frac{3(\xi) - 2}{6(\xi) - 2} \qquad (۱۳)$$

مدول برشی اولیه و مدول حجمی اولیه با استفاده از مدل Yeoh به‌صورت معادله‌های (۱۴) و (۱۵) محاسبه می‌شود:

$$\mu_0 = 2C_{10} \qquad (۱۴)$$

$$K_0 = \frac{2}{D_1} \qquad (۱۵)$$

ضریب پواسون با جاگذاری پارامترهای ارزیابی‌شده با Abaqus در معادله (۱۳) محاسبه و در جدول ۵ برای آمیزه و مدل‌های مختلف آمده است. همان‌طور که دیده می‌شود، ضریب پواسون مدل‌های پیشنهادی همراه با لغزش-اتصال نسبت به مدل‌های با فرض اتصال کامل به ضریب پواسون آمیزه نزدیک‌تر است. به‌طوری که مدل دوبعدی پیشنهادی تنها به مقدار ۰/۴۶٪ و مدل سه‌بعدی پیشنهادی ۱/۶٪- با ضریب پواسون آمیزه اختلاف دارد. در حالی که این اختلاف برای مدل‌های دوبعدی و سه‌بعدی با فرض اتصال کامل به‌ترتیب ۸/۲۲ - و ۱۲/۳۳٪- است.

نتیجه‌گیری

کامپوزیت SSBR تقویت‌شده با سیلیکا تهیه و خواص مکانیکی آن تعیین شد. به‌موازات آن، مدل‌های مولکولی و ریزساختاری به‌صورت دوبعدی و سه‌بعدی طراحی شد و با شبیه‌سازی جزء محدود بررسی شد. ناحیه بین‌فازی به دو صورت کاملاً مقید و همراه با لغزش اصطکاکی مطالعه شد. نتایج حاصل از مقایسه داده‌های تجربی و شبیه‌سازی‌ها نشان داد، درنظرگرفتن ناحیه بین‌فازی همراه با لغزش اصطکاکی باعث کاهش انتقال تنش از ماتریس به ذره می‌شود. اما در ناحیه بین‌فازی کاملاً مقید، خواص مکانیکی نسبت به داده‌های تجربی بسیار بیشتر است. همچنین نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها بیانگر مطابقت بیشتر پیش‌بینی مدل سه‌بعدی نسبت به مدل دوبعدی با نتایج تجربی است. با درنظرگرفتن مدل‌های سه‌بعدی چندذره‌ای و نیز استفاده از مدل‌های حاکم چندجزئی شامل ابرکشسان، گران‌روکشسان و نرم‌شوندگی ناشی از تنش به‌منظور پیش‌بینی رفتار لاستیک و ناحیه بین‌فازی، می‌توان با دقت بیشتری به‌ویژه در کرنش‌های بیشتر، رفتار مکانیکی کامپوزیت‌ها را تعیین کرد که در پژوهش‌های آینده بررسی خواهد شد.

مراجع

1. Ginzburg V.V. and Hall L.M., *Theory and Modeling of Polymer Nanocomposites*, Springer, 45-77, 2021.
2. Azizli M.J., Mokhtary M., Barghamadi M., and Rezaeeparto K., *Structure-Property Relationship of Graphene-Rubber Nanocomposite*, CRC, 141-176, 2022.
3. Mittal V., M*odeling and Prediction of Polymer Nanocomposite Properties*, John Wiley and Sons, 129-142, 2013.
4. Ghoreishy M.H.R. and Abbassi-Sourki F., Development of a New Model Based on Ogden-Roxburgh Model for the Prediction of the Stress-Softening Behavior of Carbon Black-Filled Rubber Compounds, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **35**, 69-82, 2022.
5. Ghoreishy M.H.R. and Abbassi-Sourki F., Study the Hyper-Viscoelastic and Stress Softening Behaviors of Various SBR/CB Filled Compounds Using a Triple Model, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **33**, 339-350, 2020.
6. Barghamadi M., Ghoreishy M.H.R., Karrabi M., and Mohammadian-Gezaz S., Modeling of Nonlinear Hyper-

viscoelastic and Stress Softening Behaviors of Acrylonitrile Butadiene Rubber/Polyvinyl Chloride Nanocomposites Reinforced by Nanoclay and Graphene, *Polym. Compos.*, **42**, 583-596, 2021.

7. Barghamadi M., Karrabi M., Ghoreishy M.H.R., and Mohammadian-Gezaz S., Effects of Two Types of Nanoparticles on the Cure, Rheological, and Mechanical Properties of Rubber Nanocomposites Based on the NBR/PVC Blends, *J. Appl. Polym. Sci.*, **136**, 47550, 2019.
8. Barghamadi M., Karrabi M., Ghoreishy M.H.R., and Mohammadian-Gezaz S., Effect of Graphene Nanoplatelets on Rheology, Tensile Properties and Curing Behavior of Nanocomposites Based on NBR/PVC Blends Prepared by Melt Intercalation Method, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **31**, 289-301, 2018.
9. Hammerand D.C., Seidel G.D., and Lagoudas D.C., Computational Micromechanics of Clustering and Interphase Effects in Carbon Nanotube Composites, *Mech. Adv. Mater. Struct.*, **14**, 277-294, 2007.
10. Deng F. and Van Vliet K.J., Prediction of Elastic Properties for Polymer-Particle Nanocomposites Exhibiting an Interphase, *Nanotechnology*, **22**, 165703, 2011.
11. Pisano C., Priolo, P., and Figiel Ł., Prediction of Strength in Intercalated Epoxy–Clay Nanocomposites via Finite Element Modelling, *Comput. Mater. Sci.*, **55**, 10-16, 2012.
12. Shojaei Dindarloo A., Karrabi M., Hamid M., and Ghoreishy R., Various Nano-Particles Influences on Structure, Viscoelastic, Vulcanization and Mechanical Behaviour of EPDM Nano-Composite Rubber Foam, *Plast. Rubber Compos.*, **48**, 218-225, 2019.
13. Wan H., Delale F., and Shen L., Effect of CNT Length and CNT-Matrix Interphase in Carbon Nanotube (CNT) Reinforced Composites, *Mech. Res. Commun.*, **32**, 481-489, 2005.
14. Alimardani M., Razzaghi-Kashani M., and Ghoreishy M.H.R., Prediction of Mechanical and Fracture Properties of Rubber Composites by Microstructural Modeling of Polymer-Filler Interfacial Effects, *Mater. Des.*, **115**, 348-354, 2017.
15. Barghamadi M., Karrabi M., Ghoreishy M.H.R., and Naderi G., Effect of TESPT on Viscoelastic and Mechanical Properties with the Morphology of SSBR/BR Hybrid Nanocomposites, *J. Appl. Polym. Sci.*, e53863, 2023.
16. Samaei S., Ghoreishy M.H.R., and Naderi G., Effects of SBR Molecular Structure and Filler Type on the Hyper-Viscoelastic Behavior of SBR/BR Radial Tyre Tread Compounds Using a Combined Numerical/Experimental Approach, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **32**, 65-78, 2019.
17. Ghorashi M., Alimardani M., and Hosseini S.M., Comparative Performance and Modification of Rubber and Reinforcing Filler on the Tearing Resistance of Peroxide-Cured Natural Rubber/ Silica Compounds, *Iran. J. Polym. Sci. Technol. (Persian)*, **35**, 487-500, 2022.
18. Alimardani M., Razzaghi-Kashani M., Karimi R., and Mahtabani A., Contribution of Mechanical Engagement and Energetic Interaction in Reinforcement of SBR-Silane–Treated Silica Composites, *Rubber Chem. Technol.*, **89**, 292-305, 2016.
19. Alberola N.D., Benzarti K., Bas C., and Bomal Y., Interface Effects in Elastomers Reinforced by Modified Precipitated Silica, *Polym. Compos.*, **22**, 312-325, 2001.
20. Dittanet P. and Pearson R.A., Effect of Bimodal Particle Size Distributions on the Toughening Mechanisms in Silica Nanoparticle Filled Epoxy Resin, *Polymer*, **54**, 1832-1845, 2013.
21. Yeoh O.H., Some Forms of the Strain Energy Function for Rubber, *Rubber Chem. Technol.*, **66**, 754-771, 1993.
22. Drucker D.C., A Definition of Stable Inelastic Material, *J. Appl. Mech.*, **26**, 101-106, 1959.
23. Hyttinen J., Österlöf R., Drugge L., and Jerrelind J., Constitutive Rubber Model Suitable for Rolling Resistance Simulations of Truck Tyres, *Proc. Inst. Mech. Eng., Part D: J. Automob. Eng.*, **237**, 174-192, 2023.
24. Aldhufairi H.S., Olatunbosun O., and Essa K., Determination of a Tyre's Rolling Resistance Using Parallel Rheological Framework, *SAE Tech. Pap.,* **5069**, 1-11, 2019.
25. Dugdale D.S., Yielding of Steel Sheets Containing Slits, *J. Mech. Phys. Solids*, **8**, 100-104, 1960.
26. Mokhtari M., Schipper D.J., and Tolpekina T.V., On the Friction of Carbon Black-and Silica-Reinforced BR and S-SBR Elastomers, *Tribol. Lett.*, **54**, 297-308, 2014.
27. Geers M.G.D., Kouznetsova V.G., Matouš K., and Yvonnet J., Homogenization Methods and Multiscale Modeling: Nonlinear Problems, *Encycl. Comput. Mech. Second Ed.*, 1-34, 2017.
28. Herrmann L.R., Finite-Element Bending Analysis for Plates, *J. Eng. Mech. Div.*, **93**, 13-26, 1967.
29. Yin Z., Zhu P., and Li B., Study of Nanoscale Wear of SiC/ Al Nanocomposites Using Molecular Dynamics Simulations, *Tribol. Lett.*, **69**, 1-17, 2021.

30. Atli A., Noyel J.-P., Hajjar A., Antouly K., Lemaire E., and Simon S., Exploring the Mechanical Performance of $BaTiO_3$ Filled HDPE Nanocomposites: A Comparative Study of the Experimental and Numerical Approaches, *Polymer*, **254**, 125063, 2022.
31. Simulia D.S., Abaqus 2017, Documentation, *Dassault Systemes:* Waltham, MA, USA, 2017.