نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۵، شماره ۴، سال ۱۴۰۲، صفحات ۴۹۵ تا ۵۱۴
DOI: 10.22060/mej.2023.22059.7560

مدل‌سازی میکرومکانیکی سه‌بعدی به‌منظور پیش‌بینی خواص موثر الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن‌نانوپلیتلت

هادی مهدی‌پور، عباس روحانی بسطامی *، محمد حسین سورگی

دانشکده مهندسی مکانیک و انرژی، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران.

خلاصه: در این پژوهش، یک روش میکرومکانیکی تحلیلی سه‌بعدی بر پایه سلول واحد جهت استخراج خواص الاستیک نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با گرافن‌نانوپلیتلت ارائه می‌شود. برای این مدل، یک المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت که دربرگیرنده تمامی خصوصیات نانوکامپوزیت است و شامل سه فاز تقویت‌کننده گرافن‌نانوپلیتلت، زمینه‌ی پلیمری و ناحیه فازمیانی که خواص آن به تدریج تغییر می‌کند، در نظر گرفته می‌شود. به‌منظورشبیه‌سازی جهت‌گیری تصادفی ذرات گرافن‌نانوپلیتلت، هندسه المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت به سلول مکعبی در سه بعد درون المان حجمی نماینده تقسیم می‌شود. اندازه گرافن‌نانوپلیتلت و تجمع وابسته به کسر حجمی گرافن نانوپلیتلت‌ها به عنوان دو فاکتور مهم تاثیرگذار بر روی خواص نانوکامپوزیت، از طریق دو ایده جدید مدل‌سازی می‌شوند. به‌منظور اعتبارسنجی مدل ارائه‌شده، ابتدا نتایج بدست‌آمده، با داده‌های تجربی و مدل‌های میکرومکانیکی پیشین در دسترس مقایسه می‌شوند. سپس، اثر پارامترهایی مانند درصد کسرحجمی، اندازه نانوذره، اثر تجمع و همچنین جهت‌گیری تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت‌ها درون رزین اپوکسی، و ضخامت فازمیانی بر پاسخ نانوکامپوزیت بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که تجمع گرافن‌نانوپلیتلت وابسته به کسرحجمی آن است و خواص الاستیک بدست‌آمده از مدل میکرومکانیکی حاضر با جهت‌گیری تصادفی ذرات گرافن‌نانوپلیتلت با درنظرگرفتن اندازه و تجمع نانوذرات و همچنین توجه به فازمیانی، توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی دارد.

تاریخچه داوری:
دریافت: ۱۴۰۱/۱۰/۰۶
بازنگری: ۱۴۰۲/۰۱/۰۴
پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۱۰
ارائه آنلاین: ۱۴۰۲/۰۲/۲۳

کلمات کلیدی:
نانوکامپوزیت
گرافن‌نانوپلیتلت
خواص موثر الاستیک
اثر اندازه گرافن
فاز میانی

۱- مقدمه

نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری با تقویت‌کننده‌های نانوساختار[1] که در سال‌های اخیر اهمیت فزاینده‌ای پیدا کرده‌اند، بدلیل خواص مکانیکی عالی و ویژگی‌های چندعملکردی، می‌توانند به‌طور گسترده در سازه‌های مهندسی از جمله اجزای پیشرفته در صنعت هوافضا استفاده شوند[۱]. نانولوله‌های کربنی[2] و نانوذرات گرافن دارای استحکام و سفتی استثنایی هستند و برای افزایش عملکرد مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری مناسب می‌باشند. در مقایسه با نانوتقویت‌کننده‌های سنتی، مانند نانوذرات سرامیکی یا نانولوله‌های کربنی، گرافن‌نانوپلیتلت‌ها[3] که از چندین لایه گرافن تشکیل شده‌اند، می‌توانند اثر تقویتی بهتری را نسبت به نانولوله‌های کربنی ارائه دهند. زیرا دارای سطح ویژه بسیار بزرگتری هستند که می‌تواند نقش کلیدی را در انتقال بار برشی بین دو فاز نانوکامپوزیت ایفا کنند .[۲] علاوه‌براین، گرافن‌نانوپلیتلت‌ها هزینه تولید پایین‌تری دارند [۲] . تحقیقات زیادی بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری تقویت‌شده با گرافن در چند سال گذشته انجام شده‌است. نتایج نشان داد که استحکام ماتریس پلیمر می‌تواند از طریق افزودن مقدار کم گرافن‌نانوپلیتلت (به طور کلی کم‌تر از ۲ درصد کسروزنی[4])، بدلیل اثر تقویت‌کنندگی عالی گرافن با پراکندگی یکنواخت، افزایش یابد. به عنوان نمونه، در پژوهش صورت‌گرفته در سال ۲۰۱۳، کینگ و همکارانش [۳] موفق شدند گرافن‌نانوپلیتلت‌ها را با اپوکسی[5] ترکیب کنند و مدول الاستیک[6] اپوکسی خالص را از ۲/۷۲ به ۳/۳۶ گیگاپاسکال افزایش دهند. همچنین، رفیعی و همکاران [۴] دریافتند که مدول الاستیک، استحکام کششی و چقرمگی شکست نانوکامپوزیت ۰/۰۰۲±۰/۱ درصد کسروزنی اپوکسی/ گرافن‌نانوپلیتلت به ترتیب ۳۱٪، ۴۰٪ و ۵۳٪ بیشتر از اپوکسی خالص است. در پژوهشی دیگر [۵]، نویسندگان گزارش کردند که

1 Nanostructure
2 Carbon nanotubes (CNTs)
3 Graphene nanoplatelets (GNPs)
4 weight fraction
5 Epoxy
6 Elastic modulus

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: a_rohani@sbu.ac.ir

حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode دیدن فرمائید.

استحکام تسلیم نانوکامپوزیت پلی‌تترافلوئورواتیلن[1] پرشده با ۳٪ کسروزنی گرافن‌نانوپلیتلت، در مقایسه با پلی‌تترافلوئورواتیلن خالص، ۶۰٪ نانوکامپوزیت را بهبود می‌دهد. اثر اندازه و مقدار محتوای تقویت‌کننده گرافن بر خواص کششی کامپوزیت‌های پلی‌پروپیلن[2] با استفاده از آزمایش کشش با نرخ کرنش ۳۰۰ مورد بررسی قرار گرفت [۶]. نتایج نشان داد که ارتباط معناداری در استحکام تسلیم و استحکام شکست نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده توسط گرافن با اندازه‌های مختلف وجود دارد. بنابراین، بررسی اثرات اندازه گرافن بر خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. با وجود تست‌های پرهزینه و شبیه‌سازی‌های مولکولی، وابستگی به اندازه نانوذره گرافن نیز در تحقیق حاضر با یک ایده جدید انجام می‌شود.

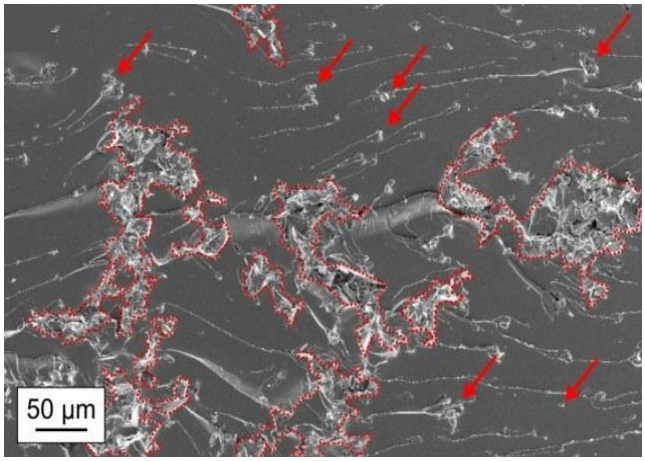
بر طبق آزمایشات تجربی انجام شده برای بررسی خواص ماتریس پلیمری تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت‌ها، فاکتورهای مختلفی مانند کسر حجمی گرافن‌نانوپلیتلت‌ها [۷–۱۰]، ناحیه فاز میانی [۲, ۹, ۱۱, ۱۲]، تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها [۲, ۱۳] و جهت‌گیری گرافن‌نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت [۲, ۷, ۸]، تاثیر مستقیمی بر روی خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها دارد. بنابراین، به‌منظور پیش‌بینی دقیق خواص موثر نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن، توجه به تمامی پارامترهای ذکر شده در مدل‌سازی ضروری می‌باشد. سطح مشترک ماتریس–تقویت‌کننده نقطه مورد علاقه محققین در تحقیقات بر روی نانوکامپوزیت می‌باشد.[۱۴] وضعیت پیچیده‌ای از فعل و انفعالات فیزیکی و شیمیایی موجود در سطح مشترک در نتیجه ناپیوستگی‌های هندسی و مواد بین تقویت‌کننده و ماتریس و اجزای پلیمری واکنش‌نداده در نانوکامپوزیت‌های پلیمری باعث شده است تا محققان یک فاز متمایز جدید به نام فاز میانی در مجاورت سطح مشترک درنظر بگیرند [۱۵]. پژوهش‌های مختلفی نشان داده‌اند که سفتی فاز میانی در محدوده بین سفتی ماتریس و سفتی نانوتقویت می‌باشد. بنابراین خواص فاز میانی به تدریج در محدوده بین ماتریس و نانوتقویت تغییر می‌کند [۱۶–۱۸].

علیرغم ویژگی‌های برجسته نانوذرات، یکی از مشکلات اصلی در فرایند تولید نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات که مانع افزایش خواص نانوکامپوزیت می‌شود، وضعیت پراکندگی ضعیف نانوذرات است که در نهایت منجر به تجمع نانوذرات درون نانوکامپوزیت و در نتیجه کاهش ناحیه فازمیانی می‌شود. بنابراین بدلیل کاهش برهمکنش سطحی پلیمر–نانوذرات، خواص موثر نانوکامپوزیت کاهش می‌یابد [۱۹]. بر اساس تحقیقات تجربی بر روی نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده توسط نانوذرات تجمیع‌شده [۲۰] و مطالعه تصاویر میکروسکوپی روبشی در آن، می‌توان دریافت که وضعیت کمّی تجمع نانوذرات به کسرحجمی نانوذرات وابسته است و این بدین معنی است که هرچه کسرحجمی نانوذرات افزایش یابد، وضعیت تجمع درون نانوکامپوزیت بیشتر می‌شود. شکل ۱ تصاویر میکروسکوپی روبشی گرفته شده از مرجع [۲۰] را نشان می‌دهد. شکل ۱–الف تجمع توده‌ای گرافن‌نانوپلیتلت‌ها را نشان می‌دهد که برای وضوح بیشتر این ناحیه تجمع با محدوده‌ای به رنگ قرمز نشان‌داده شده‌است. همچنین گرافن‌نانوپلیتلت‌های پراکنده نیز مشاهده می‌شود. وسعت تجمع را می‌توان در بزرگنمایی بالاتر در شکل۱–ب در خوشه‌بندی قابل توجهی از گرافن‌نانوپلیتلت‌ها مشاهده نمود.

علاوه بر آزمایش‌های تجربی، رویکردهای نظری ابزارهای مفیدی برای ارزیابی خواص موثر کامپوزیت‌ها هستند. تاکنون روش‌های مختلفی جهت پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن ارائه شده است که هر یک از این روش‌ها به بررسی اثر تعدادی از فاکتورهای ذکر شده، بر روی خواص نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن‌نانوپلیتلت‌ها پرداخته‌اند. مدل‌های موری–تاناکا و هالپین–تسای [۲, ۸] برای پیش‌بینی خواص الاستیک نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت‌ها مورد استفاده قرار گرفته‌اند. به‌منظور بررسی فاکتورهای تاثیرگذار بر روی خواص نانوکامپوزیت تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت، در پژوهش انجام‌شده در مرجع [۱۸]، پارامترهای مختلفی شامل تعداد لایه‌های گرافن‌نانوپلیتلت‌ها ، جهت‌گیری گرافن‌نانوپلیتلت‌ها، توزیع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها و فاز میانی درجه‌بندی شده نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت مورد بررسی قرار گرفته است. جهت بررسی اثر تعداد لایه‌های گرافن‌نانوپلیتلت بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت، نویسندگان سه مدل مختلف شامل یک، دو و سه لایه گرافن‌نانوپلیتلت را مورد بررسی قرار دادند. آنها گزارش کردند که مدول طولی نانوکامپوزیت با افزایش تعداد لایه‌های گرافن کاهش می‌یابد [۱۸].

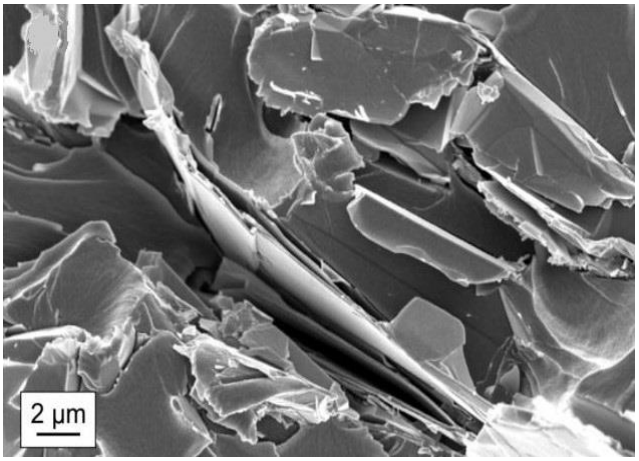
لایه‌ای شدن گرافن‌نانوپلیتلت‌ها پدیده‌ای است که در زمان ساخت نانوکامپوزیت مشاهده می‌شود و خواص موثر نانوکامپوزیت را کاهش می‌دهد [۲۱]. با این وجود، علاوه بر لایه‌ای شدن گرافن‌نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت، نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد که گرافن‌نانوپلیتلت‌های درون نانوکامپوزیت دارای ابعاد مختلفی در مقیاس نانو هستند که تغییر اندازه این نانوذرات می‌تواند بر روی خواص کامپوزیت اثرگذار باشد. به این ترتیب که با افزایش نسبت منظر (نسبت طول به ضخامت) نانوذره، بدلیل افزایش نسبت سطح به حجم گرافن‌نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت، خواص

1 Polytetrafluoroethylene (PTFE)
2 Polypropylene (PP)



الف- تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها در خوشه‌هایی با اندازه‌های متفاوت

a) Aggregation of graphene nanoplatelets in clusters with different sizes



ب- بزرگنمایی تصویر میکروسکوپی از تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها

b) Magnification of the microscopic image of the aggregation of graphene nanoplatelets

شکل ۱. اپوکسی اصلاح شده با XG-H-THF 1.0 wt %. نواحی محصور قرمزرنگ، خوشه‌های بزرگ و خوشه‌های کوچک‌تر از گرافن‌نانوپلیتلت‌ها هستند که با فلش‌های قرمز مشخص شده‌اند [۲۰].

Fig. 1. Epoxy modified with XG-H-THF 1.0 wt%. The red enclosed areas are large clusters and smaller clusters of GNPs, marked with red arrows [20].

موثر نانوکامپوزیت بهبود می‌یابد که پژوهش [۱۸] اثر اندازه نانوذره گرافن را مورد بررسی قرار نداده است. همچنین فاکتور مهم دیگر در بررسی خواص نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذره گرافن، تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها می‌باشد که در پژوهش [۱۸] مورد توجه قرار نگرفته است.

در پژوهشی دیگر [۲۱]، اثر فاکتورهای تجمع نانوتقویت‌های گرافن و لایه‌ای شدن این نانوذرات درون نانوکامپوزیت، بر روی خواص مکانیکی مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش از روش میکرومکانیکی موری–تاناکا به منظور پیش‌بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت استفاده شده است. آنها نشان داده‌اند که لایه‌ای شدن نانوذرات گرافن و تجمع آن‌ها هر دو منجر به کاهش خواص موثر نانوکامپوزیت می‌شود. این درحالی است که سایر فاکتورهای اثرگذار مانند فاز میانی، جهت‌گیری نانوذره گرافن و اندازه آن‌ها بررسی نشده است. در پژوهش انجام شده توسط حسن‌زاده اقدم [۲]، از روش میکرومکانیکی موری–تاناکا جهت پیش‌بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت استفاده شده است. روش ارائه شده در این پژوهش با توجه داشتن به تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها درون نانوکامپوزیت، جهت‌گیری و فاز میانی، قادر است مدول الاستیک را با دقت قابل قبولی تقریب بزند. البته این مدل در مواقعی که حجم ماتریس در نظر گرفته شده نسبت به حجم تقویت‌کننده بسیار بزرگ باشد، نتایج قابل قبولی را می‌دهد [۲۲].

شکریه و همکاران [۸] با استفاده از ترکیبی از روش میکرومکانیکی و روش دینامیک مولکولی سعی در تخمین سفتی نانوکامپوزیت‌های اپوکسی تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت‌ها داشته‌اند. آن‌ها، از هر دو روش موری–تاناکا و هالپین–تسای جهت پیش‌بینی سفتی نانوکامپوزیت استفاده کرده‌اند. بر طبق نتایج گزارش‌شده از این پژوهش، مدل موری–تانکا در مقایسه با مدل هالپین–تسای با نتایج آزمایش‌ها در کسروزنی کم نانوذرات (کم‌تر از ۰/۲۵٪) سازگارتر است. درحالی‌که، مدل میکرومکانیکی هالپین–تسای در کسر وزنی بالای نانوذرات (بیشتر از ۰/۲۵٪) قابل اعتمادتر است. بنابراین برطبق گزارش بدست‌آمده، هیچ یک از مدل‌های میکرومکانیکی موری–تاناکا و هالپین–تسای به تنهایی قادر به تخمین دقیق خواص الاستیک در تمامی کسرهای وزنی نانوذرات نیستند. در برخی از پژوهش‌ها، روش تعمیم‌یافته سلول‌ها [1] به منظور پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها بکاربرده شده است [۹, ۱۱]. در این پژوهش‌ها بسته نرم‌افزاری MAC–GMC به منظور پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت‌ها استفاده شده‌است. با این حال در هر دو پژوهش، اثر پارامتر مهمی مانند اثر اندازه نانوذره گرافن، مورد توجه قرار نگرفته است.

1 Generalized method of cells (GMC)

در مقاله حاضر، خواص موثر الاستیک نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با گرافن‌نانوپلیتلت‌ها با استفاده از یک رویکرد همگن‌سازی جدید تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا[1] مدل‌سازی و مورد مطالعه قرار می‌گیرد و دقت پیش‌بینی مدل حاضر با روش‌های میکرومکانیکی موجود مقایسه می‌شود. اثر تجمع نانوذرات به عنوان یک فاکتور وابسته به کسرحجمی نانوذرات مورد توجه قرار می‌گیرد و همچنین اثر اندازه ذرات گرافن با ارائه یک ایده مبتنی بر شهود، بر روی خواص الاستیک نانوکامپوزیت تحلیل و بررسی خواهد شد.

بر طبق مطالعه پژوهش‌های انجام گرفته تاکنون، بررسی اثر ابعاد (طول، عرض و ضخامت) گرافن‌نانوپلیتلت‌ها بر روی خواص موثر نانوکامپوزیت مورد توجه قرار نگرفته است. همچنین، با مطالعه پژوهش‌های انجام گرفته در زمینه نانوکامپوزیت های تقویت شده با نانوذره گرافن، مشاهده می‌شود که تعداد کمی از پژوهش‌ها به فاز میانی درجه بندی شده در نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت‌ها پرداخته‌اند که در روش المان محدود این مدلسازی انجام شده است [۱۸]. همچنین تاکنون پژوهش‌های اندکی در زمینه بررسی اثر تجمع وابسته به کسر حجمی سایر نانوذرات بر روی نانوکامپوزیت‌های پلیمری انجام گرفته است. به عنوان مثال، محمودی و همکاران [۱۶]، برای پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت تقویت شده با نانولوله کربن، از روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا استفاده کردند و با مدلسازی تجمع ذرات نانولوله کربن وابسته به کسر حجمی، خواص موثر نانوکامپوزیت را با دقت قابل قبولی تخمین زدند. همچنین در پژوهشی دیگر، وکیلی‌فرد و همکارانش [۱۷]، با فرض وابسته بودن تجمع نانوذرات سیلیکا به کسر حجمی، سعی در تخمین خواص موثر نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با سیلیکا کردند. بر اساس دانش نویسندگان در پژوهش حاضر، تاکنون مطالعه‌ای در زمینه اثر تجمع وابسته به کسر حجمی گرافن‌نانوپلیتلت‌ها بر روی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری صورت نگرفته است. بنابراین، با توجه به مطالعه پژوهش‌های انجام گرفته در زمینه بررسی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانوذره گرافن و همچنین بر اساس فاکتورهای تاثیرگذار در خواص نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت گزارش شده توسط مطالعات آزمایشگاهی، دستاوردهای پژوهش حاضر را میتوان به صورت زیر بیان نمود:

مجموعه کامل‌تری از فاکتورهای تاثیرگذار بر روی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با گرافن شامل بررسی اثر کسر حجمی گرافن‌نانوپلیتلت‌ها، اندازه گرافن‌نانوپلیتلت‌ها، فازمیانی درجه‌بندی شده، جهت‌گیری تصادفی نانوذره گرافن و تجمع وابسته به کسر حجمی در مقایسه با مطالعات پیشین، مدلسازی شده است. برای مدل‌سازی و پیش‌بینی خواص موثر نانوکامپوزیت، از روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا استفاده می‌شود که بر خلاف روش موری–تاناکا و هالپین–تسای به ازای تمامی کسرهای حجمی نانوذره گرافن درون ماتریس پلیمری، دارای دقت قابل قبولی است.

اندازه گرافن‌نانوپلیتلت‌ها درون ماتریس پلیمری و محاسبه فاز میانی درون نانوکامپوزیت با یک ایده جدید فرمول‌بندی شده است. مطابق با نتایج تجربی با افزایش نسبت منظر نانوذرات گرافن درون نانوکامپوزیت، بدلیل افزایش نسبت سطح به حجم، فازمیانی درون نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد [۱۷].

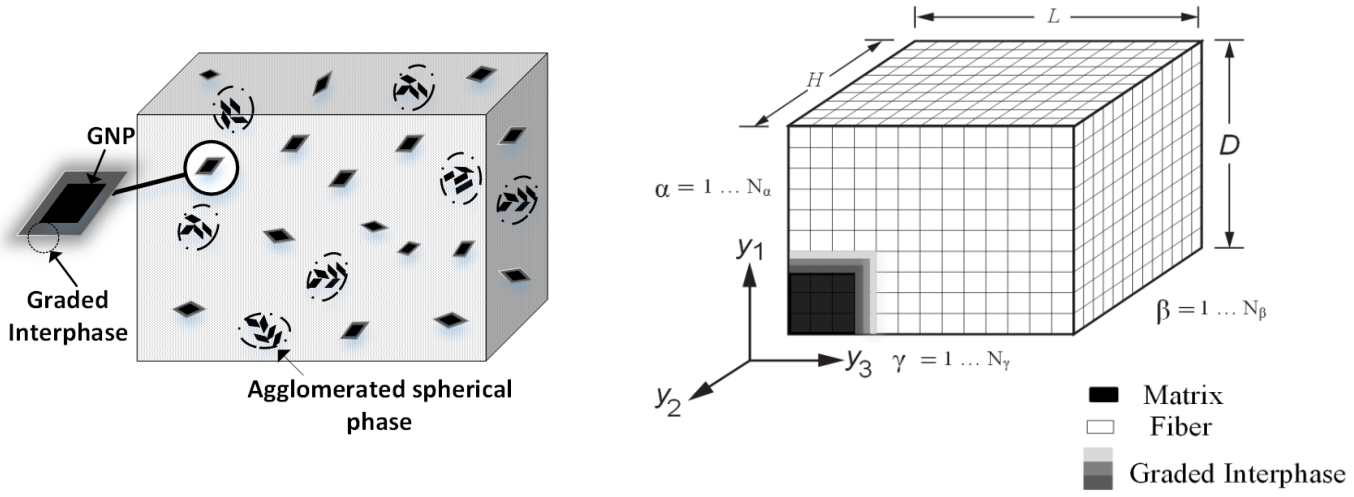
تجمع نانوذره گرافن وابسته به کسر حجمی مدلسازی شده است. با افزایش کسر حجمی نانوذره، تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌های درون نانوکامپوزیت افزایش یافته که منجر به کاهش فاز میانی می‌شود. در بخش ۴، فرمول‌بندی تجمع گرافن‌نانوپلیتلت‌ها وابسته به کسر حجمی آورده شده است که متفاوت از پژوهش‌های انجام گرفته برای سایر نانوذرات است و همچنین تاکنون پژوهش‌های مرتبط با نانوکامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذره گرافن به این مورد مهم نپرداخته‌اند.

۲- مبانی تئوری

روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا برای ارائه پیش‌بینی‌های محیط پیوسته استفاده شده‌است [۲۳, ۲۴]. در این روش یک سلول واحد تکرارشونده[2] که نشان‌دهنده ریزساختار تناوبی مواد است، در نظر گرفته می‌شود. سلول واحد تکرارشونده ممکن است حاوی هر تعداد فاز تشکیل‌دهنده باشد که برای نمایش دقیق مواد کامپوزیت لازم است. سلول واحد به تعدادی زیرسلول تقسیم می‌شود که هرکدام توسط یک فاز از کامپوزیت اشغال شده‌است. پیوستگی جابه‌جایی و پیوستگی ترکشن در هر یک از سطح‌مشترک‌های زیرسلول، همراه با شرایط مرزی تناوبی، بصورت میانگین به‌منظور رسیدن به یک ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی است. هنگامی که ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی بدست آمد، تنش‌ها و کرنش‌های زیرسلول موضعی و تانسور سفتی سلول واحد همگن‌شده را می‌توان به آسانی بدست آورد. روش میکرومکانیکی تحلیلی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا از نظر محاسباتی بسیار کارآمد است [۲۵].

1 High-fidelity generalized method of cells (HFGMC)

2 Repeated unit cell (RUC)



(ب) (الف)

(b) (a)

شکل ۲. الف- المان حجمی نماینده نانوکامپوزیت سه‌بعدی بادرنظر گرفتن فازمیانی درجه‌بندی‌شده، ب- جهت‌گیری تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت‌ها و تجمع نانوذرات درون کامپوزیت

Fig. 2. a- RVE of 3D nanocomposite considering graded interphase, b- random orientation of GNPs and aggregation of nanoparticles inside the composite

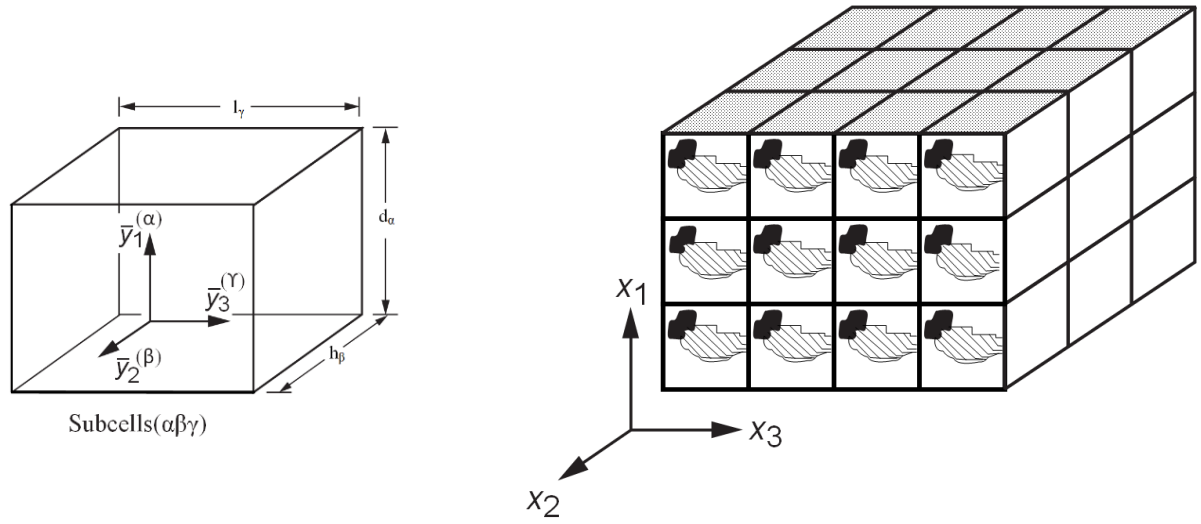
۲- ۱- مدل‌سازی میکرومکانیکی

به‌منظور کاهش محاسبات ریاضی و پیچیدگی‌های زمانی، یک المان حجمی نماینده[1] متشکل از سه نوع سلول حاوی گرافن‌نانوپلیتلت، فاز میانی و رزین اپوکسی، بصورت کوچکترین بخش تکرارشونده و در عین حال جامع اطلاعات در نظر گرفته می‌شود. شایان ذکر است که تمام خواص موثر ماده کامپوزیتی و المان حجمی نماینده همانند فرض می‌شود. در این مطالعه، مدل تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا از طریق یک رابطه مبتنی بر فیزیک، تمام خواص موثر ماده کامپوزیتی را محاسبه می‌کند. در اکثر مطالعات تحلیلی و عددی[۹, ۱۱] ، فرض می‌شود که فازتقویت در نانوکامپوزیت دارای یک چیدمان با آرایش تناوبی[2] می‌باشد.

روش ارائه‌شده خصوصیات موثر یک ماده همگن تناوبی را از طریق المان حجمی نماینده استخراج می‌کند. در این پژوهش، کامپوزیت اپوکسی تقویت شده با گرافن‌نانوپلیتلت، با روش تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا مدل‌سازی می‌شود و از طریق یک المان حجمی نماینده مناسب مطابق با شکل ۲-الف مدل‌سازی می‌شود. بواسطه المان حجمی نماینده می‌توان شرایط تناوبی متناظر با هندسه و مواد را مورد توجه قرار داد. در شکل ۲-الف مشاهده می‌شود که فازمیانی اطراف گرافن‌نانوپلیتلت‌ها، خواصی بین نانوذره و ماتریس دارد، به این معنی‌که خواص آن به تدریج تغییر می‌کند. بنابراین، خواص فازمیانی به صورت درجه‌بندی‌شده مدل‌سازی شده‌است. همچنین، شکل ۲-ب المان حجمی نماینده کامپوزیت را با جهت‌گیری تصادفی ذرات درون زمینه پلیمری نشان می‌دهد که پدیده‌ی تجمع ذرات نیز مورد توجه قرار گرفته‌است. مطابق با پژوهش‌هایی که تاکنون انجام گرفته‌است [۹, ۱۱, ۲۶]، فازتقویت گرافن‌نانوپلیتلت، فازمیانی اپوکسی/گرافن‌نانوپلیتلت و همچنین رزین اپوکسی، به طور کامل درون المان حجمی نماینده سه بعدی قرار گرفته‌اند.

رفتار گرافن‌نانوپلیتلت الاستیک خطی و ایزوتروپ عرضی و همچنین رزین اپوکسی و فازمیانی دارای رفتار الاستیک خطی و ایزوتروپ می‌باشند [۷]. یک دستگاه مختصات راستگرد (y_1, y_2, y_3) همانطور که در شکل ۲-الف نشان داده شده‌است، بکار گرفته می‌شود. ابعاد المان حجمی نماینده، H،D وL به ترتیب در جهت محورهای ۱، ۲ و ۳ به N_α ، N_β و N_γ زیرسلول تقسیم می‌شوند. هر زیرسلول به صورت $\alpha\beta\gamma$ برچسب‌گذاری می‌شود که α ، β و γ به عنوان شمارنده زیرسلول به ترتیب در جهت‌های ۱، ۲و ۳ مورد توجه قرار می‌گیرند.

1 Representative volume element (RVE)
2 Periodic



الف- کامپوزیت تناوبی سه‌بعدی حاوی ماده ناهمگن تناوبی متشکل از چندین سلول واحد تکرارشونده در دستگاه مختصات سراسری (X_1, X_2, X_3)

a) The 3D periodic composite containing periodic heterogeneous material consisting of several RUCs in the global coordinate system (X_1, X_2, X_3)

ب- زیرسلول واحد $\alpha\beta\gamma$ در المان حجمی نماینده با دستگاه مختصات موضعی $\left(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)}\right)$

b) The unit sub-cell $\alpha\beta\gamma$ in RVE with local coordinate system $\left(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)}\right)$.

شکل ۳. نمایش شماتیک کامپوزیت چند فازی با ریزساختارهای تناوبی سه‌بعدی [۲۴].

Fig. 3. Schematic representation of multiphase composite with three-dimensional periodic microstructures [24].

۲- ۲- فرمول‌بندی میکرومکانیکی تعمیم‌یافته

در فرمول‌بندی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا ، دو دستگاه مختصات وجود دارد. اول، یک دستگاه مختصات سراسری (X_1, X_2, X_3) حاکم بر کامپوزیت تناوبی که بیانگر ماده ناهمگن تناوبی می‌باشد. دوم، یک دستگاه موضعی $\left(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)}\right)$ در مرکز هر زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ که به ترتیب در شکل‌های ۳-الف و ۳-ب نمایش داده شده‌اند.

بسط جابه‌جایی درجه دوم زیرسلول در سیستم مختصات موضعی بصورت رابطه (۱) بیان می شود [۲۷].

$$
\begin{aligned}
u_i^{(\alpha\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{ij} x_j + W_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_1^{(\alpha)} W_{i(100)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
&\quad + \bar{y}_2^{(\beta)} W_{i(010)}^{(\alpha\beta\gamma)} + \bar{y}_3^{(\gamma)} W_{i(001)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
&+ \frac{1}{2}\left(3\bar{y}_1^{(\alpha)^2} - \frac{d_\alpha^2}{4}\right) W_{i(200)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
&+ \frac{1}{2}\left(3\bar{y}_2^{(\beta)^2} - \frac{d_\beta^2}{4}\right) W_{i(020)}^{(\alpha\beta\gamma)} \\
&+ \frac{1}{2}\left(3\bar{y}_3^{(\gamma)^2} - \frac{d_\gamma^2}{4}\right) W_{i(002)}^{(\alpha\beta\gamma)}, \quad i = 1,2,3
\end{aligned}
\tag{۱}
$$

این رابطه بر اساس یک بسط مرتبه دوم جابجایی که بر حسب فواصل از مرکز زیر سلول $\left(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)}\right)$ نوشته شده است، می‌باشد. لازم به ذکر است که جملات شامل حاصلضرب‌های $\bar{y}$ها به عنوان مثال $\bar{y}_1^{(\alpha)}\bar{y}_2^{(\beta)}$، به دلیل تعامد زیرسلول‌ها، مشارکتی در روابط ندارند. این بسط جابه‌جایی برای روش تعمیم‌یافته سلول‌ها از مرتبه اول و برای روش تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا از مرتبه دوم در نظر گرفته شده است [۲۴].

در رابطه (۱)، $\bar{\varepsilon}_{ij}$ بیانگر مولفه‌های کرنش متوسط سراسری و $d_\alpha, h_\beta, l_\gamma$ بیانگر اندازه زیرسلول $\alpha\beta\gamma$است. جابه‌جایی‌های متوسط حجمی $W_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)}$ و ترم‌های مرتبه بالاتر $W_{i(lmn)}^{(\alpha\beta\gamma)}$باید با درنظرگرفتن معادله تعادل در زیرسلول‌ها، اعمال شرایط بین‌سطحی بین زیرسلول‌ها و تحمیل شرایط مرزی تناوبی بر المان حجمی نماینده تعیین شوند. بنابراین $21\ N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله مستقل به‌منظور تعیین کامل میدان جابه‌جایی در تمامی زیرسلول‌ها موردنیاز است. معادله تعادل سه بعدی در یک زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ را می‌توان بصورت رابطه (۲) بیان نمود.

$$\frac{\partial\sigma_{1i}^{(\alpha\beta\gamma)}}{\partial\bar{y}_1^{(\alpha)}}+\frac{\partial\sigma_{2i}^{(\alpha\beta\gamma)}}{\partial\bar{y}_2^{(\beta)}}+\frac{\partial\sigma_{3i}^{(\alpha\beta\gamma)}}{\partial\bar{y}_3^{(\gamma)}}=0,\quad \alpha=1,...,N_\alpha,\ \beta=1,...,N_\beta,\quad \gamma=1,...,N_\gamma \tag{۲}$$

شرایط مرزی تناوبی جابه‌جایی المان حجمی نماینده در سه جهت را می‌توان به صورت روابط (۳) بیان نمود [۲۵].

$$\begin{aligned}
&\bar{y}_1^{(1)}=-\frac{d_1}{2}\Big)=u_i^{(N_\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_1^{(N_\alpha)}=\frac{d_{N_\alpha}}{2}\right),\\
&..,N_\beta,\quad \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&\bar{y}_2^{(1)}=-\frac{h_1}{2}\Big)=u_i^{(\alpha N_\beta\gamma)}\left(\bar{y}_2^{(N_\beta)}=\frac{h_{N_\beta}}{2}\right),\\
&..,N_\alpha,\quad \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&\bar{y}_3^{(1)}=-\frac{l_1}{2}\Big)=u_i^{(\alpha\beta N_\gamma)}\left(\bar{y}_3^{(N\gamma)}=\frac{l_{N\gamma}}{2}\right),\\
&..,N_\alpha,\quad \beta=1,...,N_\beta.
\end{aligned} \tag{۳}$$

شرایط مرزی تناوبی ترکشن المان حجمی نماینده در سه جهت بصورت رابطه (۴) تعریف می‌شود [۲۵].

$$\begin{aligned}
&\bar{y}_1^{(1)}=-\frac{d_1}{2}\Big)=\sigma_{1i}^{(N_\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_1^{(N_\alpha)}=\frac{d_{N_\alpha}}{2}\right),\\
&..,N_\beta,\ \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&\bar{y}_2^{(1)}=-\frac{h_1}{2}\Big)=\sigma_{2i}^{(\alpha N_\beta\gamma)}\left(\bar{y}_2^{(N_\beta)}=\frac{h_{N_\beta}}{2}\right),\\
&..,N_\alpha,\quad \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&\bar{y}_3^{(1)}=-\frac{l_1}{2}\Big)=\sigma_{3i}^{(\alpha\beta N_\gamma)}\left(\bar{y}_3^{(N\gamma)}=\frac{l_{N\gamma}}{2}\right),\\
&..,N_\alpha,\quad \beta=1,...,N_\beta.
\end{aligned} \tag{۴}$$

شرایط پیوستگی جابه‌جایی سطحی بین زیرسلول‌های همسایه که با فرض وجود پیوند کامل بین زیرسلول‌ها نوشته شده‌است [۲۸]، در رابطه (۵) آورده شده است.

$$\begin{aligned}
&u_i^{(\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_1^{(\alpha)}=\frac{d_\alpha}{2}\right)=u_i^{(\alpha+1\beta\gamma)}\left(\bar{y}_1^{(\alpha+1)}=-\frac{d_{\alpha+1}}{2}\right),\\
&\alpha=1,...,N_\alpha-1,\ \beta=1,...,N_\beta,\quad \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&u_i^{(\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_2^{(\beta)}=\frac{h_\beta}{2}\right)=u_i^{(\alpha\beta+1\gamma)}\left(\bar{y}_2^{(\beta+1)}=-\frac{h_{\beta+1}}{2}\right),\\
&\alpha=1,...,N_\alpha,\quad \beta=1,...,N_\beta-1,\ \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&u_i^{(\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_3^{(\gamma)}=\frac{l_\gamma}{2}\right)=u_i^{(\alpha\beta\gamma+1)}\left(\bar{y}_3^{(\gamma+1)}=-\frac{l_{\gamma+1}}{2}\right),\\
&\alpha=1,...,N_\alpha,\quad \beta=1,...,N_\beta,\ \gamma=1,...,N_\gamma-1.
\end{aligned} \tag{۵}$$

به‌همین‌ترتیب، شرایط پیوستگی ترکشن سطحی بین زیرسلول‌های مجاور را می‌توان از طریق رابطه (۶) تعریف نمود.

$$\begin{aligned}
&\sigma_{1i}^{(\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_1^{(\alpha)}=\frac{d_\alpha}{2}\right)=\sigma_{1i}^{(\alpha+1\beta\gamma)}\left(\bar{y}_1^{(\alpha+1)}=-\frac{d_{\alpha+1}}{2}\right),\\
&\alpha=1,...,N_\alpha-1,\ \beta=1,...,N_\beta,\quad \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&\sigma_{2i}^{(\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_2^{(\beta)}=\frac{h_\beta}{2}\right)=\sigma_{2i}^{(\alpha\beta+1\gamma)}\left(\bar{y}_2^{(\beta+1)}=-\frac{h_{\beta+1}}{2}\right),\\
&\alpha=1,...,N_\alpha,\quad \beta=1,...,N_\beta-1,\ \gamma=1,...,N_\gamma.\\
&\sigma_{3i}^{(\alpha\beta\gamma)}\left(\bar{y}_3^{(\gamma)}=\frac{l_\gamma}{2}\right)=\sigma_{3i}^{(\alpha\beta\gamma+1)}\left(\bar{y}_3^{(\gamma+1)}=-\frac{l_{\gamma+1}}{2}\right),\\
&\alpha=1,...,N_\alpha,\quad \beta=1,...,N_\beta,\ \gamma=1,...,N_\gamma-1.
\end{aligned} \tag{۶}$$

در نهایت، با درنظرگرفتن معادلات ۲ تا ۶ ، $۲۱\times N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله مستقل حاصل می‌شود. این دستگاه معادلات را می‌توان بصورت نمادین مطابق رابطه (۷) نشان داد. $۲۱\times N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله مستقل را می‌توان درون سه گروه طبقه‌بندی نمود. در اولین گروه، $۳\times N_\alpha N_\beta N_\gamma$ معادله برای توصیف حالت تعادل قرار دارد، گروه دوم از طریق $۶\times\left(N_\alpha N_\beta+N_\alpha N_\gamma+N_\beta N_\gamma\right)$ معادله، شرایط تناوبی المان حجمی نماینده را تعیین می‌کند و گروه سوم از طریق $۶\times\left(N_\alpha N_\beta\left(N_\gamma-۱\right)+N_\alpha N_\gamma\left(N_\beta-۱\right)+N_\beta N_\gamma\left(N_\alpha-۱\right)\right)$ معادله، میدان جابه‌جایی زیر سلول ها را محاسبه می‌کند که اشاره به پیوستگی بین سطحی دارد.

$$K_{P\times P}U_{P\times1}=F_{P\times1},\ P=21\ N_\alpha N_\beta N_\gamma \tag{۷}$$

در رابطه (۷)، ماتریس $[K]$ شامل هندسه و خواص مکانیکی مواد در داخل هر زیرسلول است. همچنین بردار $\{F\}$ کرنش متوسط خارجی اعمال‌شده را نشان می دهد. بردار جابجایی $\{U\}$ نیز شامل ریزمتغیرهای سمت راست معادله جابجایی مرتبه دوم هر زیرسلول می باشد. با حل دستگاه خطی رابطه (۷)، می‌توان میدان‌های تنش و کرنش درون هر زیرسلول را محاسبه نمود. شایان ذکر است، حل معادله (۷) برقراری رابطه موضعی‌سازی (۸) را امکانپذیر می‌سازد که بیانگر ارتباط کرنش متوسط $\overline{\varepsilon}_{ij}^{(\alpha\beta\gamma)}$ درون زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ با کرنش سراسری $\overline{\varepsilon}_{ij}$ است. این ارتباط را ماتریس $A^{(\alpha\beta\gamma)}$ برقرار می‌کند که به آن ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی گفته می شود.

$$\overline{\varepsilon}^{(\alpha\beta\gamma)} = A^{(\alpha\beta\gamma)}\overline{\varepsilon} \qquad (۸)$$

در نهایت، ماتریس سفتی الاستیک موثر المان حجمی نماینده بصورت رابطه (۹) استخراج می‌شود [۲۴].

$$C^{*} = \frac{1}{DHL}\sum_{\alpha=1}^{N_\alpha}\sum_{\beta=1}^{N_\beta}\sum_{\gamma=1}^{N_\gamma} d_{(\alpha)}h_{(\beta)}l_{(\gamma)}C^{(\alpha\beta\gamma)}A^{(\alpha\beta\gamma)} \qquad (۹)$$

در رابطه (۹)، $C^{(\alpha\beta\gamma)}$ بیانگر ماتریس سفتی زیرسلول $\alpha\beta\gamma$ است. جزئیات معادلات حاکم تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا به طور کامل در مرجع [۲۴] آورده شده‌است.

۳- مدل‌سازی فازمیانی

به‌طورکلی فازمیانی، به صورت یک مکعب مستطیل توخالی که گرافن‌نانوپلیتلت را احاطه کرده‌است، مدل‌سازی شده است و خواص آن از نظر عملکردی بصورت حد واسط بین ویژگی‌های گرافن‌نانوپلیتلت و ماتریس، درجه‌بندی می‌شود [۱۹, ۲۹] . شایان ذکر است که فازمیانی درجه‌بندی‌شده در نانوکامپوزیت، نماینده مناطق ماتریس اطراف نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت در یک نانوکامپوزیت واقعی است.

همانطور که در مرجع [۳۰] نشان داده شده‌است، یک توزیع توانی برای خواص فازمیانی، بهتر از توزیع خطی است. با تبعیت از توزیع توانی استفاده‌شده در [۳۱]و با متوسط‌گیری از ضخامت فازمیانی، می‌توان سفتی فازمیانی را به صورت رابطه (۱۰) محاسبه نمود.

$$E^{Int} = \frac{1}{1-\alpha}\int_{\alpha}^{1}\left[E^{GNP} - \left(E^{GNP} - E^{m}\right)\left|\frac{r-\alpha}{1-\alpha}\right|^{e}\right]dr, \qquad (۱۰)$$
$$\alpha = \frac{R_{GNP}}{R_{GNP} + t_{Int}}$$

E^{m}، E^{GNP} و E^{Int} به ترتیب بیانگر سفتی رزین اپوکسی، سفتی گرافن‌نانوپلیتلت و سفتی فازمیانی می‌باشد. R_{GNP} و t_{Int} به ترتیب بیانگر فاصله وجه بزرگتر از مرکز گرافن‌نانوپلیتلت و ضخامت فازمیانی می‌باشد. علاوه‌براین، پارامتر e ضریب چسبندگی است که به ویژگی‌های بین‌سطحی بین گرافن‌نانوپلیتلت و ماتریس پلیمر بستگی دارد[۳۱].

۴- مدل‌سازی تجمع نانوذرات گرافن‌نانوپلیتلت

وضعیت پراکندگی نانوذرات گرافن‌نانوپلیتلت در ماتریس پلیمر، نقش مهمی در خواص موثر نانوکامپوزیت دارد. بنابراین در زمان تحلیل، تجمع نانوذرات گرافن‌نانوپلیتلت درنظرگرفته می‌شود. برای این منظور، وضعیت تجمع گرافن‌نانوپلیتلت را از طریق نسبت تعداد گرافن‌نانوپلیتلت تجمیع‌شده به کل گرافن‌نانوپلیتلت‌ها می‌توان محاسبه نمود. در کار فعلی، میزان تجمع به عنوان یک تابع خطی از کسرحجمی است که دلالت بر $\xi_{ag} \times V_{GNP}$ دارد که V_{GNP} نشان‌دهنده کسرحجمی و ξ_{ag} فاکتور تجمیع است و بیان می‌کند که حالت پراکندگی نانوذره با افزایش کسرحجمی بدتر می‌شود. همانطور که در شکل ۲-ب نشان داده شده‌است، حالت تجمع گرافن‌نانوپلیتلت از طریق نزدیک‌شدن نانوذرات گرافن‌نانوپلیتلت به یکدیگر، مدل شده است.

به‌منظور مدل‌سازی حالت تجمع گرافن‌نانوپلیتلت، ابتدا المان حجمی نماینده به تعداد N_{GNP} نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت با آرایش تصادفی پر می‌شوند، N_{GNP} برحسب کسرحجمی به صورت رابطه (۱۱) محاسبه می‌شود.

$$N_{GNP} \times W_{GNP} \times L_{GNP} \times H_{GNP} = V_{GNP} \times D \times L \times H \qquad (۱۱)$$

در رابطه (۱۱) H_{GNP},L_{GNP},W_{GNP} به ترتیب عرض، طول و ضخامت گرافن‌نانوپلیتلت می‌باشد. شایان ذکر است که با توجه به حالت تجمع گرافن‌نانوپلیتلت، تعداد مشخصی از نانوذرات گرافن‌نانوپلیتلت خوشه‌ای می‌شوند (که با N_{ag} بیان می‌شود) و می‌توان مقدار N_{ag} را بصورت رابطه (۱۲) تعیین نمود.

$$N_{ag}=\left(\xi_{ag}\times V_{GNP}\right)N_{GNP} \qquad (۱۲)$$

بنابراین المان حجمی نماینده مدل‌سازی شده با $N_{GNP}-N_{ag}$ نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت پراکنده و N_{ag} نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت تجمیع‌شده پر می‌شود.

۵- مدل‌سازی اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت

در این بخش، اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت بر روی خواص موثر الاستیک نانوکامپوزیت مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد. به‌طورکلی، روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا توضیح داده شده در بخش ۲-۲ قادر به توصیف تغییرات اندازه اجزای کامپوزیت نمی‌باشد. همانطور که در مقدمه بیان شد، فازمیانی عمدتا مسئول تقویت نانوکامپوزیت است. بنابراین، به منظور پیش‌بینی رفتار نانوکامپوزیت، می‌بایست فازمیانی را درنظر گرفت. از آنجایی‌که فازمیانی در اطراف نانوذرات ایجاد می‌شود، اثر اندازه نانوذرات می‌تواند بر روی حجم فازمیانی تاثیر بگذارد که با توجه به ابعاد نانوذره $\left(H_{GNP},L_{GNP},W_{GNP}\right)$ متغیر خواهد بود. بنابراین، تاثیر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت بر روی حجم فازمیانی ایجادشده درون نانوکامپوزیت مورد بررسی قرار می‌گیرد. حجم فازمیانی اطراف گرافن‌نانوپلیتلت را می‌توان با استفاده از رابطه (۱۳) محاسبه نمود.

$$V_{Int}=N_{GNP}\begin{bmatrix}\left(W_{GNP}+t_{Int}\right)\times\\ \left(L_{GNP}+t_{Int}\right)\times\left(H_{GNP}+t_{Int}\right)\\ -W_{GNP}L_{GNP}H_{GNP}\end{bmatrix} \qquad (۱۳)$$

با جایگذاری رابطه (۱۱) درون رابطه (۱۳)، رابطه (۱۴) حاصل می‌شود.

$$V_{Int}=V_{GNP}\left(DLH\right)\begin{bmatrix}\dfrac{8{t_{Int}}^3}{W_{GNP}L_{GNP}H_{GNP}}+\\ 4{t_{Int}}^2\left(\dfrac{1}{W_{GNP}L_{GNP}}+\dfrac{1}{W_{GNP}H_{GNP}}+\dfrac{1}{L_{GNP}H_{GNP}}\right)\\ +2t_{Int}\left(\dfrac{1}{W_{GNP}}+\dfrac{1}{H_{GNP}}+\dfrac{1}{L_{GNP}}\right)\end{bmatrix} \qquad (۱۴)$$

رابطه (۱۴) نشان می‌دهد که در صورت ثابت نگه‌داشتن مقدار کسرحجمی گرافن‌نانوپلیتلت، کاهش و یا افزایش ابعاد گرافن‌نانوپلیتلت منجر به افزایش و یا کاهش حجم فازمیانی می‌شود و از اینرو منجر به بهبود و یا بدترشدن خواص کلی نانوکامپوزیت می‌شود. علاوه‌براین، رابطه (۱۴) بیان می‌کند که ضخامت فازمیانی و اندازه گرافن‌نانوپلیتلت با یکدیگر رابطه عکس دارند. به این معنی که کاهش و یا افزایش ابعاد گرافن‌نانوپلیتلت ، به ترتیب منجر به افزایش و کاهش ضخامت فازمیانی می‌شود. این ایده جدید قادر است به صورت دقیق اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت را برروی خصوصیات کلی نانوکامپوزیت بدون انجام محاسبات هزینه‌بر مدل‌سازی کند.

۶- مدل‌سازی جهت‌گیری تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت

شواهد تجربی نشان می‌دهد که نانوتقویت‌ها به‌طور تصادفی درون ماتریس جهت‌گیری می‌کنند. بنابراین فرض توزیع همراستا نانوذرات منجر به بدست آوردن خواصی می‌شود که با نتایج تجربی کامپوزیت اختلاف دارد [۳۲]. بنابراین توجه به جهت‌گیری تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت، نسبت به فرض جهت‌گیری منظم آن‌ها به واقعیت نزدیک‌تر است. شایان ذکر است که جهت‌گیری تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت منجر به رفتار ایزوتروپ نانوکامپوزیت می‌شود که نحوه جهت‌گیری تصادفی آن‌ها را می‌توان در شکل ۲-ب مشاهده نمود. جهت نانوذرات با جهت‌گیری تصادفی را می‌توان با دو زاویه ϕ و ψ اویلر توصیف نمود. اگر توزیع احتمال جهت گرافن‌نانوپلیتلت از یک تابع پیوسته $p(\phi,\psi)$ تبعیت کند، تانسور سفتی موثر نانوکامپوزیت $\left[C^{random}\right]$ می‌تواند مطابق با ماتریس سفتی نانوکامپوزیت تک‌جهته $\left[C^{aligned}\right]$ به صورت رابطه (۱۵) [۳۱] بیان شود.

$$\left[C^{random}\right]=\frac{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2}\left[C^{aligned}\right](\phi,\psi)\,p(\phi,\psi)\sin(\psi)\,d\psi\,d\phi}{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2}p(\phi,\psi)\sin(\psi)\,d\psi\,d\phi} \qquad (۱۵)$$

جدول ۱. خواص ایزوتروپ عرضی گرافن‌نانوپلیتلت [۸]

Table 1. Properties of GNP nanoparticles [8].

نسبت منظر	ضخامت	طول=عرض	G_{12}	ν_{23}	ν_{21}	$E_2 = E_3$	E_1
۸۰/۳	۳ نانومتر	۸۰ نانومتر	۱ مگاپاسکال	۰/۰۳	۰/۸۱	۶۹۰ گیگاپاسکال	۴۰۰ گیگاپاسکال

جدول ۲. خواص ایزوتروپ برای EPON 828 [۸].

Table 2. Properties of EPON 828 resin [8].

ν	E
۰/۳	۲/۵ گیگاپاسکال

برای جهت‌گیری تصادفی یکنواخت سه‌بعدی، $p(\phi,\psi) = 1/2\pi$ [۳۳]، در نظر گرفته می‌شود. بنابراین مدول‌های حجمی و برشی نانوکامپوزیت با جهت تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت به صورت رابطه (۱۶) بدست می‌آید.

$$K^{random} = \frac{1}{9}\left[4k + 2\left(l + l'\right) + n'\right]$$
$$G^{random} = \frac{1}{15}\left[k - \left(l + l'\right) + n' + 6\left(m + p'\right)\right] \quad (۱۶)$$

n', k, l, l', m, p'، ثوابت هیل هستند که متناظر با ماتریس سفتی نانوکامپوزیت تقویت‌شده با گرافن‌نانوپلیتلت جهت‌دار است. در نهایت، مدول کلی الاستیک و نسبت پواسون را می‌توان مطابق با رابطه (۱۷) تعیین نمود [۳۴].

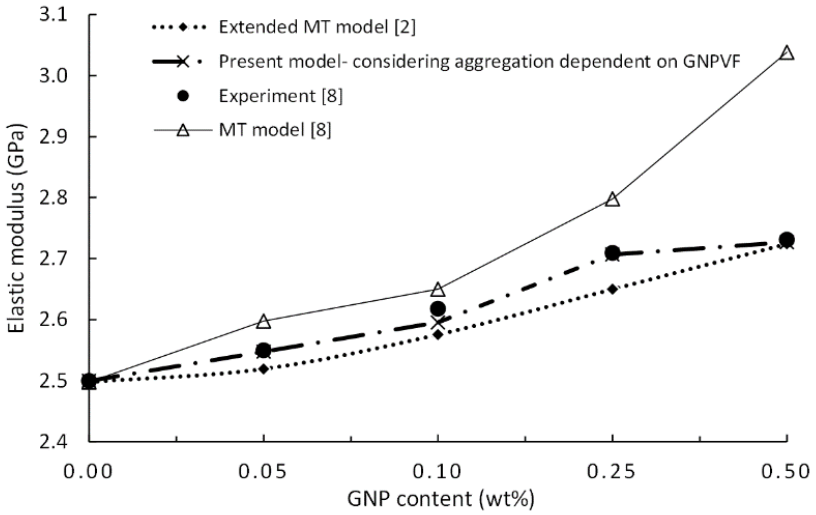
$$E^{random} = \frac{9K^{random}G^{random}}{3K^{random} + G^{random}}$$
$$\nu^{random} = \frac{3K^{random} - 2G^{random}}{6K^{random} + 2G^{random}} \quad (۱۷)$$

۷- نتایج و بحث

۷- ۱- اعتبارسنجی مدل

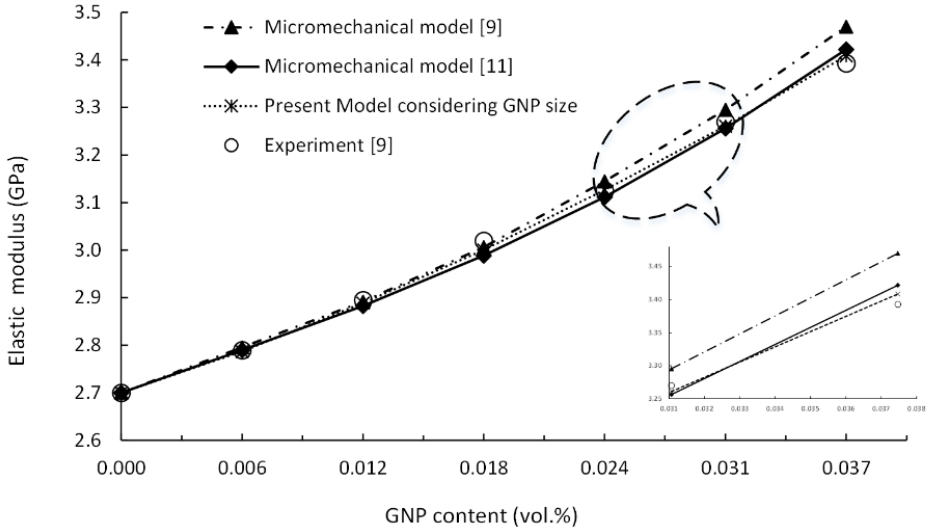
به‌منظور اعتبارسنجی، مدل حاضر، با نتایج آزمایشگاهی [۸, ۹]و همچنین مدل‌های میکرومکانیکی ارائه شده در [۲, ۸, ۹, ۱۱, ۱۳] مقایسه می‌شود. در اولین اعتبارسنجی، سیستم نانوکامپوزیت حاوی یک ماده اپوکسی EPON ۸۲۸ با رفتار ایزوتروپ و خواص الاستیک که با گرافن‌نانوپلیتلت تقویت‌شده است، می‌باشد. خواص الاستیک گرافن‌نانوپلیتلت با رفتار ایزوتروپ عرضی، ابعاد و نسبت‌منظر در جدول ۱ آورده شده است [۸] . خواص رزین اپوکسی =مطابق با مرجع[۸] نیز در جدول ۲ مشاهده می‌شود.

شایان ذکر است که چگالی گرافن‌نانوپلیتلت و اپوکسی EPON ۸۲۸ به ترتیب ۲/۲۵ و ۱/۱۸۵ گرم بر سانتیمترمکعب می‌باشد [۸]. نحوه ساخت نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت در مرجع [۸]شرح داده شده است. در بخش‌های بعدی، مدل پیشنهادی، ابتدا با آزمایش‌های تجربی اعتبارسنجی می‌شود، سپس، اثرات کسرحجمی و نسبت منظر، اثر تجمع، اثر اندازه، جهت‌گیری تصادفی نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت و همچنین ضخامت فازمیانی و پارامترهای مربوط به آن بررسی می‌شود.



الف) نانوکامپوزیت زمینه‌ی *EPON 828* با فاز تقویت گرافن‌نانوپلیتلت

a) EPON 828 matrix nanocomposite with graphene nanoplatelet reinforcement phase



شکل ۴. مقایسه تغییرات مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن‌نانوپلیتلت به ازای مقادیر مختلف (الف) کسر وزنی و (ب) کسرحجمی

Fig. 4. The variation of elastic modulus of GNP-reinforced nanocomposite at GNP contents

۷- ۲- اثرات درصد حجمی گرافن‌نانوپلیتلت

در ابتدا، اثرات کسر وزنی تقویت‌کننده بر خواص موثر نانوکامپوزیت اپوکسی /EPON ۸۲۸گرافن‌نانوپلیتلت مورد بررسی قرار می‌گیرد. در اینجا، مدل حاضر با نتایج تجربی ارائه‌شده در مراجع [۸, ۹] اعتبارسنجی و مقایسه می‌شود. شکل ۴-الف، تغییرات مدول الاستیک /EPON ۸۲۸گرافن‌نانوپلیتلت بر حسب کسر وزنی را نشان می‌دهد [۸]. بر اساس تحلیل نتایج تجربی [۸]، پارامتر مدل‌سازی ξ_{ag} = ۲/۶۴ بدست می‌آید. ضخامت فاز میانی برای داده‌های تجربی شکل ۴-الف برابر با ۲۵ نانومتر تعریف شده است. مقایسه‌ای بین برآوردهای رویکرد همگن‌سازی فعلی، با خروجی‌های مدل موری-تاناکا [۸]، مدل موری-تاناکا توسعه داده‌شده [۲] و داده های تجربی [۸] انجام می‌شود. همانطور که در شکل ۴-الف مشاهده می‌شود، پیش‌بینی‌های مدل حاضر با درنظرگرفتن تجمع گرافن‌نانوپلیتلت در تطابق بسیار بهتری با داده های تجربی [۸] در مقایسه با تخمین‌های مدل موری-تاناکا توسعه داده‌شده در هر دو پژوهش [۲, ۸]می‌باشد. این

جدول ۳. خواص ایزوتروپ عرضی برای گرافن‌نانوپلیتلت [۹].

Table 3. Properties of GNPs reported in [9].

E_1	$E_2 = E_3$	ν_{21}	ν_{23}	G_{12}
۳/۲۵۱ گیگاپاسکال	۲۹۴/۳ گیگاپاسکال	۰/۴۵۵	۰/۱۵۹	۱ مگاپاسکال

جدول ۴. خواص ایزوتروپ برای EPON 862 [۹].

Table 4. Properties of EPON 862 resin reported in [9].

E	ν
۲/۷ گیگاپاسکال	۰/۳

اختلاف در دقت پیش‌بینی مدل حاضر در مقایسه با مدل‌های [۲, ۸]در کسروزنی بالاتر گرافن‌نانوپلیتلت بسیار آشکارتر است. تا ۰/۱٪ کسروزنی، اختلاف پیش‌بینی مدل حاضر با دو مدل [۲, ۸] قابل قبول است که این مقدار را می‌توان به پراکندگی خوب گرافن‌نانوپلیتلت درون اپوکسی نسبت داد. با افزایش کسروزنی نانوذره گرافن و تشکیل خوشه، مدل حاضر با درنظر گرفتن تجمع نانوذرات، قادر به تخمین مدول الاستیک با دقت بهتری نسبت به دو روش دیگر است.

در پژوهش دیگر انجام‌شده در مرجع [۹] نمونه‌ای از کامپوزیت پلیمری ساخته شد و از طریق آزمایشات تجربی خواص الاستیک کامپوزیت استخراج شد. آن‌ها از EPON ۸۶۲ به عنوان رزین و از گرافن‌نانوپلیتلت به عنوان فازتقویت استفاده کردند. همانطور که در شکل ۲-الف مشاهده می‌شود، در مدل حاضر، صفحه ایزوتروپی ۳-۲ تعریف‌شده و محور ۱ عمود بر صفحه ایزوتروپ است. با توجه به محورهای تعریف‌شده در شکل ۲-الف، خواص ایزوتروپ عرضی گزارش‌شده از نتایج تجربی در پژوهش [۹] برای گرافن‌نانوپلیتلت و EPON ۸۶۲ به ترتیب مطابق با جدول ۳ و جدول ۴ می‌باشد.

شایان ذکر است که چگالی گرافن‌نانوپلیتلت، ۲ گرم بر میلی‌لیتر، طول و عرض آن ۲ میکرومتر و ضخامت آن ۲ نانومتر است . همچنین در پژوهش [۹]و پژوهش انجام گرفته در [۱۱] سعی شده است با استفاده از روش میکرومکانیکی تعمیم‌یافته سلول‌ها، ارائه شده در بسته نرم افزاری MAC_GMC، مدول الاستیک نانوکامپوزیت را پیش‌بینی کنند. در مدل حاضر، مدول الاستیک کامپوزیت پیش‌بینی‌شده و با نتایج گزارش‌شده در [۹] و [۱۱]مقایسه شده است. شکل ۴-ب تغییرات مدول الاستیک کامپوزیت EPON/ ۸۶۲گرافن‌نانوپلیتلت را به عنوان تابعی از کسرحجمی گرافن نشان می‌دهد. توجه به این نکته ضروری است که چون در هنگام تولید نانوکامپوزیت‌ها جهت‌گیری نانوذرات به صورت تصادفی است، درنظرگرفتن آرایش منظم در مدل‌سازی ممکن است از نتایج واقعی دور باشد. بنابراین، به‌منظور نزدیک‌شدن نتایج حاصل از پیش‌بینی مدول‌الاستیک کامپوزیت با داده‌های تجربی، در مدل حاضر، آرایش گرافن‌نانوپلیتلت درون رزین EPON ۸۶۲ در فضای سه‌بعدی بصورت تصادفی مدل‌سازی شده‌است. بنابراین، رفتار کامپوزیت ایزوتروپ می‌باشد. دو نکته متمایز را می‌توان به وضوح در شکل ۴-ب مشاهده نمود. اول، پیش‌بینی مدول الاستیک در مدل حاضر با درنظر گرفتن جهت‌گیری تصادفی نانوذرات گرافن دقیق‌تر از پیش‌بینی‌های انجام‌شده در پژوهش‌های [۹] و [۱۱]است. دوم، با افزودن محتوای کمی از گرافن‌نانوپلیتلت (کم‌تر از ۰/۰۴ کسرحجمی)، مدول الاستیک کامپوزیت ۲۷٪ افزایش می‌یابد. این نشان‌دهنده افزایش قابل توجهی در سفتی مواد با وجود مقدار کمی از محتوای گرافن است.

۷- ۳- اثر تجمع گرافن‌نانوپلیتلت

یکی از مشکلات اصلی که مانع افزایش خواص نانوکامپوزیت می‌شود، وضعیت پراکندگی ضعیف نانوذرات است که در نهایت منجر به تجمع می‌شود. از طرفی، تجمع نانوذرات، منجر به کاهش ناحیه فازمیانی می‌شود.

بنابراین، بدلیل کاهش برهمکنش سطحی پلیمر- نانوذرات، خواص موثر نانوکامپوزیت تخریب می‌شود [۱۹, ۲۶, ۳۵]. بر اساس تحقیقات تجربی بر روی کامپوزیت‌های تقویت‌شده توسط نانوذرات [۸, ۹] و مطالعه تصاویر میکروسکوپی روبشی[1] در آن‌ها، می‌توان دریافت که وضعیت کمّی تجمع نانوذرات به کسرحجمی نانوذرات وابسته است. به این معنی که، با افزایش کسرحجمی نانوذره، وضعیت تجمع نانوذرات درون رزین تشدید می‌شود.

به‌منظور بررسی اثر تجمع گرافن‌نانوپلیتلت وابسته به کسرحجمی، نتایج پیش‌بینی مدول الاستیک وابسته به کسرحجمی، در حالتی که تجمع وابسته به کسرحجمی است با دو حالت دیگر، یعنی عدم توجه به تجمع و همچنین مستقل بودن تجمع به کسرحجمی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از این بررسی و مقایسه با نتایج تجربی [۸] در شکل ۵-الف مشاهده می‌شود و نشان می‌دهد که تا کسروزنی ۰/۱٪ ، بدلیل کسر وزنی پایین، شاهد پراکندگی خوب نانوذرات درون رزین خواهیم بود. به‌همین دلیل، هر سه روش در کسر وزنی ۰/۱٪ به خوبی قادر به پیش‌بینی مدول الاستیک کامپوزیت هستند و به داده‌های تجربی نزدیک می‌باشند. حال آنکه، با افزایش هرچه بیشتر محتوای نانوذرات گرافن، تجمع نانوذرات افزایش می‌یابد که به تدریج منجر به تخریب خواص کامپوزیت و کاهش سرعت در افزایش مدول الاستیک آن می‌شود. بنابراین، از آنجایی که مدل حاضر به تجمع گرافن‌نانوپلیتلت وابسته به کسر حجمی توجه کرده است، نتایج پیش‌بینی آن نزدیک به داده های تجربی می‌باشد.

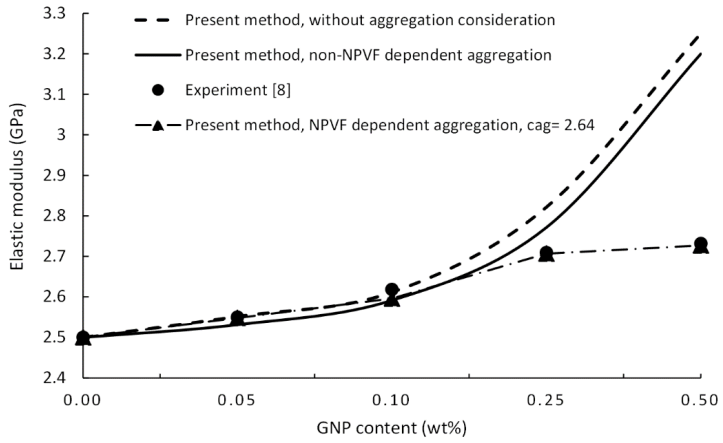
به‌منظور بررسی پارامتر ξ_{ag}، برروی خواص کامپوزیت، شکل‌های ۵-ب و ۵-ج تاثیر مقادیر مختلف ξ_{ag} را بر روی خواص کامپوزیت نشان می‌دهد. از شکل ۵-ب مشخص است که با افزایش محتوای گرافن‌نانوپلیتلت ، مدول الاستیک افزایش می‌یابد. با این‌حال، با توجه به تجمع وابسته به محتوای گرافن‌نانوپلیتلت درون ماتریس، پس از ۰/۱٪ کسروزنی، سرعت افزایش مدول الاستیک به تدریج روبه‌کاهش است و برعکس با افزایش محتوای گرافن‌نانوپلیتلت، ضریب پواسون کاهش می‌یابد. با بدتر شدن حالت پراکندگی نانوذره گرافن‌نانوپلیتلت (۲= ξ_{ag}) مدول الاستیک کامپوزیت کاهش می‌یابد. در شکل ۵-ج، ضریب پواسون نانوکامپوزیت رفتاری نزولی با افزایش محتوای کسروزنی نانوذره و حالت تجمع از خود نشان می‌دهد. به‌نحوی‌که، با کاهش ξ_{ag} از مقدار ۲ به ۰، وقتی کسروزنی گرافن‌نانوپلیتلت از ۰ به ۰/۲۵٪ می‌رسد، ضریب پواسون به میزان ۲/۳٪ کاهش می‌یابد. این مقدار برای مدول الاستیک به ازای تغییرات ξ_{ag} از ۲ به ۰ به میزان ۱۴/۵٪ افزایش می‌یابد. علاوه‌براین، نشان داده شده‌است که درنظرگرفتن مقدار جزئی۲ = ξ_{ag}، مانع روند صعودی نادرست برای مدول الاستیک کامپوزیت می‌شود که تاثیر قابل توجه وابسته بودن تجمع نانوذره گرافن به کسرحجمی آن و تاثیر آن بر روی مدول الاستیک و ضریب پواسون کامپوزیت را نشان می‌دهد.

۷- ۴- اثرات فاز میانی

در شکل ۶-الف، مدول الاستیک کامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با گرافن به ازای کسرهای وزنی مختلف گرافن‌نانوپلیتلت با در نظر گرفتن ناحیه فازمیانی محاسبه شده‌است. مدل حاضر همراه با فازمیانی توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی [۸] دارد. حال‌آنکه، در صورت عدم‌توجه به فازمیانی، نمی‌توان بدرستی خواص الاستیک را پیش‌بینی نمود. در شکل ۶-الف مشاهده می‌شود که همواره با افزایش کسروزنی گرافن‌نانوپلیتلت، مدول الاستیک بدلیل افزایش حجم فازمیانی درون کامپوزیت، افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که با افزایش تنها مقدار بسیار اندکی نانوذره گرافن (۰/۵٪ کسر وزنی)، بدلیل وجود فازمیانی، مدول الاستیک کامپوزیت به میزان ۹٪ افزایش می‌یابد. بنابراین، به وضوح مشهود است که مدول الاستیک نانوکامپوزیت پلیمری به ناحیه فازمیانی اپوکسی- گرافن حساس است. با توجه به سفتی بیشتر فازمیانی در مقایسه با ماتریس پلیمری، مدول الاستیک برای نانوکامپوزیت پلیمری با فازمیانی بیشتر از نانوکامپوزیت پلیمری بدون فازمیانی است.

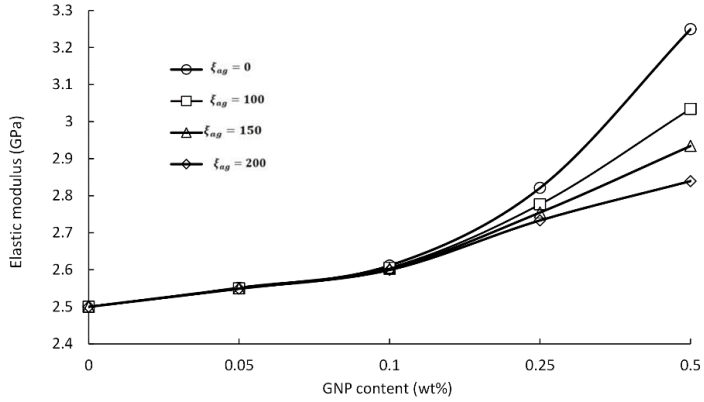
علاوه بر بررسی اثر فازمیانی در این بخش، به بررسی پارامتری اثرات خواص فازمیانی، یعنی ضریب چسبندگی (e) و ضخامت فازمیانی t_{Int} پرداخته می‌شود. شکل ۶-ب و ۶-ج، به ترتیب اثر مقدار چسبندگی را بر روی مدول الاستیک نشان می‌دهد. بر طبق پژوهش انجام‌گرفته در [۳۱] به منظور تعیین دقیق مدول الاستیک در نانوکامپوزیت‌های پلیمری، لازم است مقدار e، مقداری بزرگتر از ۱ داشته باشد. مشاهده می‌شود که مدول کامپوزیت با افزایش e افزایش می‌یابد. برای eهای بزرگتر از ۱، مقدار افزایش مدول الاستیک تقریبا یکسان است و تفاوت منحنی‌ها بسیار ناچیز می‌باشد. بنابراین در این پژوهش، مقدار e برابر با ۲ درنظر گرفته شده است. به طورمشابه، در شکل ۶-ج تغییرات منحنی ضریب پواسون برای محتوای گرافن‌نانوپلیتلت در حضور مقادیر مختلف e بررسی شده است. بیشترین کاهش در ضریب پواسون زمانی اتفاق می‌افتد که ضریب چسبندگی مقداری برابر با ۲ و یا بالاتر داشته باشد و به ازای مقادیر بیشتر و مساوی با ۲، روند کاهش یکسان و تقریبا منحنی‌ها منطبق بر یکدیگر هستند.

1 Scanning Electron Microscopy



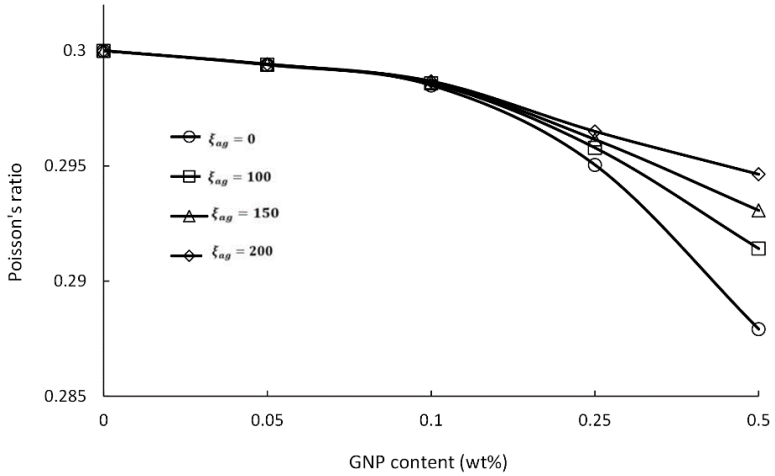
الف- تجمع گرافن وابسته به کسر حجمی بر مدول الاستیک نانوکامپوزیت گرافن/اپوکسی

a) The effect of graphene aggregation dependent on volume fraction on the elastic modulus of graphene/epoxy nanocomposite



ب- تاثیر پارامتر تجمع گرافن‌نانوپلیتلت بر روی مقادیر مدول الاستیک نانوکامپوزیت

b) Effect of graphene nanoplatelet aggregation parameter on the elastic modulus of nanocomposite

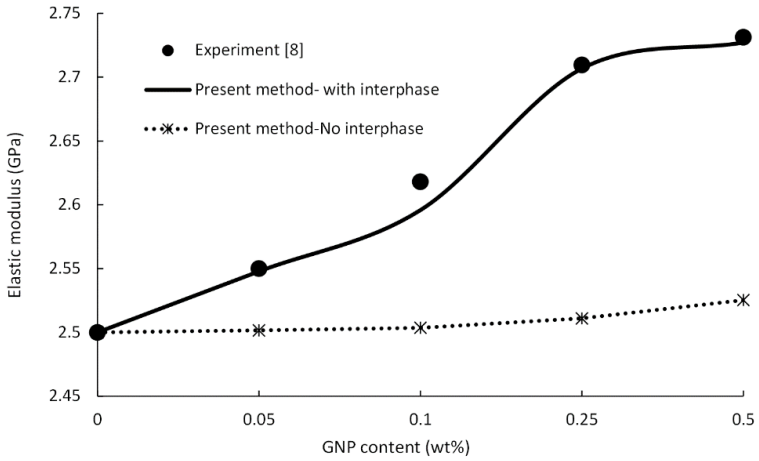


ج- تاثیر پارامتر تجمع گرافن‌نانوپلیتلت بر روی مقادیر ضریب پواسون نانوکامپوزیت

c) Effect of graphene nanoplatelet aggregation parameter on Poisson's ratio values of nanocomposite

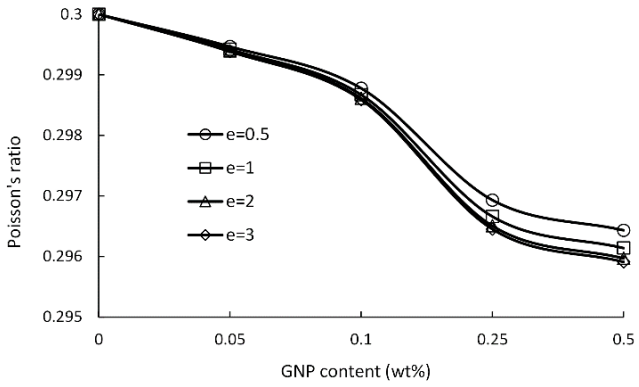
شکل ۵. تغییرات خواص نانوکامپوزیت با تجمع گرافن‌نانوپلیتلت به ازای کسروزنی مختلف نانوذره

Fig. 5. The variation of the effective properties of nanocomposites at GNP contents versus aggregation factor containing 0, 100, 150, and 200



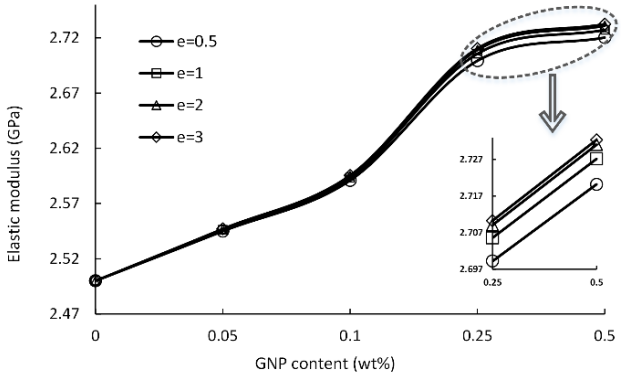
الف- اثر فازمیانی بر روی دقت روش میکرومکانیکی برای پیش‌بینی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

a) The effect of the interphase on the accuracy of the micromechanical method for predicting the elastic modulus of nanocomposite



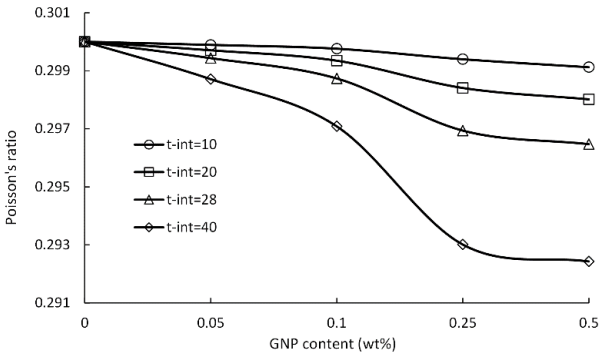
ج- بررسی اثر ضریب چسبندگی بر روی ضریب پواسون نانوکامپوزیت

c) Investigating the effect of adhesion coefficient on Poisson's ratio of nanocomposite



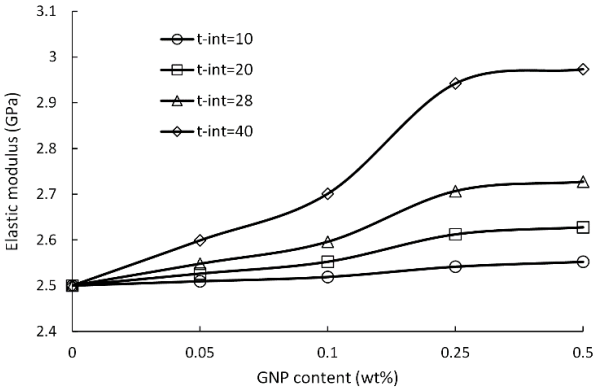
ب- بررسی اثر ضریب چسبندگی بر روی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

b) Investigating the effect of adhesion coefficient on the elastic modulus of nanocomposite



ه- بررسی ضخامت فازمیانی بر روی ضریب پواسون نانوکامپوزیت

e) Investigation of interphase thickness on Poisson's ratio of nanocomposite



د - بررسی اثر ضخامت فازمیانی بر روی مدول الاستیک نانوکامپوزیت

d) Investigating the effect of interphase thickness on the elastic modulus of nanocomposite

شکل ۶. بررسی اثر وجود فازمیانی و اثر هر یک از پارامترهای فازمیانی بر روی مدول الاستیک و ضریب پواسون نانوکامپوزیت به ازای کسر وزنی مختلف گرافن‌نانوپلیتلت با درنظرگرفتن حالت تجمع و جهت‌گیری تصادفی نانوذرات

Fig. 6. The variation of the effective properties of nanocomposites at GNP contents versus (a) interphase (b,c) adhesion coefficient, (d,e) interphase thickness

از جمله پارامتر دیگری که در بررسی فاز میانی مورد تحلیل قرار گرفته است، بررسی ضخامت فازمیانی برروی خواص کامپوزیت می‌باشد. همانطور که در رابطه (۱۳) مشاهده می‌شود، حجم فاز میانی ارتباط مستقیمی با ضخامت فازمیانی دارد. به این معنی‌که با افزایش ضخامت فازمیانی، حجم‌فازمیانی بیشتر می‌شود. درنتیجه افزایش حجم فازمیانی درون کامپوزیت، بدلیل بالاتر بودن سفتی فازمیانی در مقایسه با سفتی ماتریس، منجر به بهبود خواص موثر کامپوزیت می‌شود. این اثر را به وضوح می‌توان در شکل ۶–د مشاهده نمود که با اضافه کردن کسروزنی جزئی از گرافن‌نانوپلیتلت (۰/۵٪)، درصورتی که ضخامت فازمیانی ۱۰ نانومتر باشد، شاهد افزایش به‌میزان ۲٪ در مدول الاستیک کامپوزیت خواهیم بود. حال‌آنکه، وجود فازمیانی اطراف گرافن‌نانوپلیتلت ، با ضخامت ۴۰ نانومتر در کسروزنی ۰/۵٪، مدول‌الاستیک کامپوزیت را به میزان ۲۰٪ افزایش خواهد داد. شکل ۶–ه اثر ضخامت فازمیانی را بر روی ضریب پواسون کامپوزیت نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که به ازای کسروزنی ۰/۲۵٪، افزایش ضخامت فازمیانی از ۱۰ نانومتر به ۴۰ نانومتر، ضریب پواسون کامپوزیت را به میزان ۲۱٪ کاهش خواهد داد که نشان‌دهنده تاثیر زیاد ضخامت فازمیانی برروی ضریب پواسون کامپوزیت می‌باشد.

۷– ۵– اثرات نسبت منظر گرافن‌نانوپلیتلت

نانوذرات تقویت‌کننده گرافن‌نانوپلیتلت، در زمان ساخت ممکن است در ابعاد و اندازه‌های مختلف بدست آیند. هندسه نانوذره تقویت‌کننده و همچنین ابعاد آن برروی خواص موثر کامپوزیت اثرگذار است. در این بخش به بررسی اثر پارامتر نسبت‌منظر AR=w/h بر روی خواص کامپوزیت پرداخته می‌شود. در شکل ۷–الف مشاهده می‌شود که با افزایش نسبت منظر، مدول الاستیک کامپوزیت نیز افزایش می‌یابد. در زمانی که کسر وزنی گرافن درون کامپوزیت ۰/۱٪ است، بدلیل وجود میزان بسیارکم گرافن‌نانوپلیتلت درون کامپوزیت، تفاوت مدول الاستیک به‌ازای نسبت‌منظرهای مختلف، کم است. درحالی‌که با افزایش محتوای گرافن‌نانوپلیتلت درون ماتریس از ۰/۱٪ به ۰/۵٪ کسروزنی، مدول الاستیک کامپوزیت به ازای نسبت‌منظر بالاتر، افزایش بیشتری خواهد داشت. همچنین، مشاهده می‌شود که به ازای کسر وزنی گرافن ۰/۵٪ و نسبت‌منظر برابر با ۱، مدول الاستیک به میزان ۸٪ افزایش و ضریب پواسون کامپوزیت ۱٪ کاهش می‌یابد. حال‌آنکه، در صورت افزایش نسبت‌منظر به مقداری برابر با ۱۰۰، افزایش مدول الاستیک به ۱۰/۵٪ خواهد رسید. نکته‌ای که به وضوح در تغییر نسبت‌منظر مشاهده می‌شود، تغییر آهسته مدول الاستیک و ضریب پواسون در نسبت‌های منظر ۶۰ به بالاتر است.

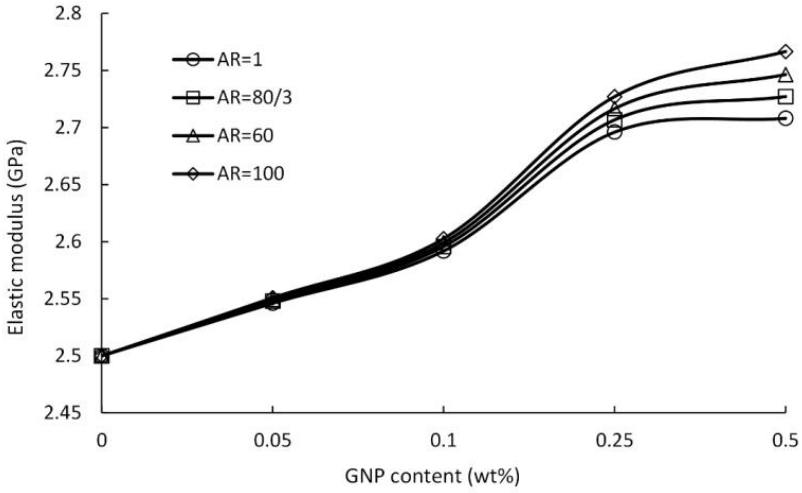
۸– نتیجه‌گیری

خصوصیات موثر کامپوزیت زمینه اپوکسی با تقویت‌کننده گرافن‌نانوپلیتلت با استفاده از یک مدل میکرومکانیکی جدید تعمیم‌یافته سلول‌ها با قابلیت اطمینان بالا به‌منظور استخراج خواص موثر کامپوزیت مورد بررسی قرار گرفت. پس از آن، یک فازمیانی درجه‌بندی‌شده به عنوان فاز سوم به‌منظور توصیف ناحیه تعامل اپوکسی/گرافن‌نانوپلیتلت تعریف و مورد بررسی قرار گرفت. هم‌چنین، حالت تجمع گرافن‌نانوپلیتلت توسط یک نرخ تجمع که به کسرحجمی نانوذره وابسته است، تعریف شده است که بیانگر میزان گرافن‌نانوپلیتلت تجمیع‌شده به کل گرافن‌نانوپلیتلت‌ها بکاررفته درون کامپوزیت می‌باشد. مرحله بعد، اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت با یک ایده جدید مورد مطالعه قرار گرفت. اشاره به این نکته حائز اهمیت است که حالت تجمع وابسته به کسر حجمی گرافن‌نانوپلیتلت و ایده اثراندازه مطرح‌شده، پارامترهای اثرگذاری هستند که مطالعات بسیار اندکی به این موضوع توجه داشته‌اند. سپس، جهت‌گیری تصادفی گرافن‌نانوپلیتلت درون اپوکسی با میانگین‌گیری زاویه‌های اویلر در فضای سه‌بعدی مورد توجه قرارگرفت. با توجه به جهت‌گیری تصادفی یکنواخت توزیع‌شده گرافن‌نانوپلیتلت، نانوکامپوزیت حاصل ایزوتروپ درنظر گرفته شد. تجزیه و تحلیل ارائه‌شده، توسط داده‌های تجربی تایید شد. علاوه‌براین، مطالعات پارامتری، شامل اثر محتوای گرافن‌نانوپلیتلت و حالت تجمع، اثر ویژگی‌های فازمیانی برروی مدول الاستیک کامپوزیت و اثر نسبت‌منظر نانوذره گرافن مورد بررسی قرار گرفت. باتوجه به نتایج و بحث ارائه‌شده، می‌توان به نتایج زیر اشاره کرد.

وابستگی تجمع گرافن‌نانوپلیتلت به کسرحجمی گرافن‌نانوپلیتلت، از طریق نتایج تجربی تایید شد.

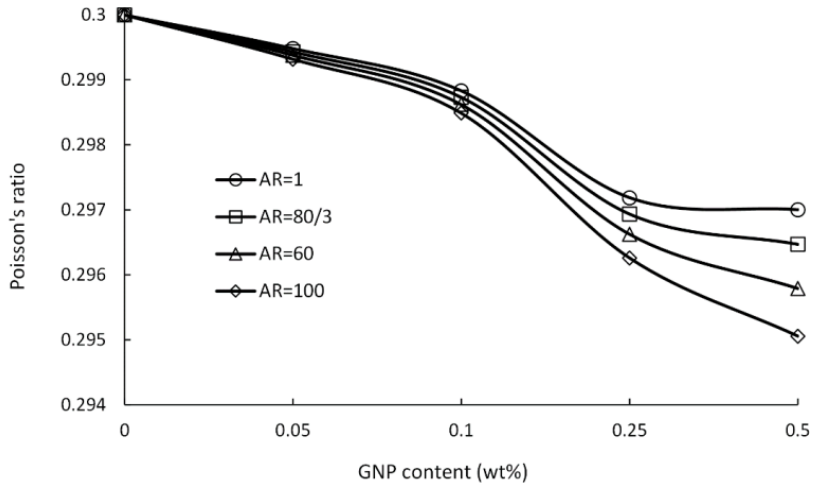
بدلیل رخدادن حالت تجمع در محتوای بالای گرافن‌نانوپلیتلت، خواص الاستیک در محتوای بالاتر از یک حدآستانه مشخص برای کسرحجمی گرافن‌نانوپلیتلت، تخریب می‌شود.

نسبت‌منظر گرافن‌نانوپلیتلت می‌تواند برروی مدول الاستیک کامپوزیت اثرگذار باشد. حال‌آنکه در نسبت‌منظر بالاتر از یک مقدار مشخص، مدول الاستیک کامپوزیت افزایش نخواهد داشت.



الف-بررسی اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت بر روی مدول الاستیک کامپوزیت

a) Investigating the effect of graphene nanoplatelet size on the composite elastic modulus



ب-بررسی اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت بر روی ضریب پواسون کامپوزیت

b) Investigating the effect of graphene nanoplatelet size on Poisson's ratio of composite

شکل ۷. بررسی اثر اندازه گرافن‌نانوپلیتلت بر روی خواص نانوکامپوزیت به ازای مقادیر مختلف کسروزنی

Fig. 7. The variation of effective properties of nanocomposite at GNP contents versus aspect ratios (AR) including 1, 80/3, 60, and 100

۹- فهرست علائم

علائم انگلیسی

$d_\alpha, h_\beta, l_\gamma$	اندازه زیرسلول $\alpha\beta\gamma$
$W_{i(000)}^{(\alpha\beta\gamma)}$	جابه‌جایی‌های متوسط حجمی
$[K]$	ماتریس دربرگیرنده هندسه و خواص مکانیکی مواد در داخل هر زیرسلول
$\{F\}$	بردار کرنش متوسط خارجی اعمال‌شده
$\{U\}$	بردار جابجایی
$A^{(\alpha\beta\gamma)}$	ماتریس تمرکز کرنش مکانیکی
C^*	ماتریس سفتی الاستیک موثر المان حجمی نماینده
$C^{(\alpha\beta\gamma)}$	ماتریس سفتی زیرسلول $\alpha\beta\gamma$
E^m	سفتی رزین اپوکسی
E^{GNP}	سفتی گرافن‌نانوپلیتلت
E^{Int}	سفتی فازمیانی
R_{GNP}	فاصله وجه بزرگتر از مرکز گرافن‌نانوپلیتلت
t_{Int}	ضخامت فازمیانی
e	ضریب چسبندگی
V_{GNP}	کسرحجمی گرافن‌نانوپلیتلت
C_{ag}	فاکتور تجمیع
N_{GNP}	تعداد ذرات گرافن‌نانوپلیتلت درون المان حجمی نماینده
$H_{GNP}, L_{GNP}, W_{GNP}$	عرض، طول و ضخامت گرافن‌نانوپلیتلت
N_{ag}	تعداد گرافن‌نانوپلیتلت‌های تجمیع‌شده
V_{Int}	حجم فازمیانی اطراف گرافن‌نانوپلیتلت
$N_\alpha \times N_\beta \times N_\gamma$	تعداد سلول‌های مکعبی درون المان حجمی نماینده در سه بعد
(X_1, X_2, X_3)	دستگاه مختصات سراسری کامپوزیت تناوبی سه‌بعدی حاوی ماده ناهمگن تناوبی
$(\bar{y}_1^{(\alpha)}, \bar{y}_2^{(\beta)}, \bar{y}_3^{(\gamma)})$	یک دستگاه موضعی در مرکز هر زیرسلول $\alpha\beta\gamma$

علائم یونانی

$\bar{\varepsilon}_{ij}$	مولفه‌های کرنش متوسط سراسری
$\bar{\varepsilon}_{ij}^{(\alpha\beta\gamma)}$	کرنش متوسط درون زیرسلول $\alpha\beta\gamma$

منابع

[1] K. Hu, D.D. Kulkarni, I. Choi, V.V. Tsukruk, Graphene-polymer nanocomposites for structural and functional applications, Progress in polymer science, 39(11) (2014) 1934-1972.

[2] M. Hassanzadeh-Aghdam, Evaluating the effective creep properties of graphene-reinforced polymer nanocomposites by a homogenization approach, Composites Science and Technology, 209 (2021) 108791.

[3] J.A. King, D.R. Klimek, I. Miskioglu, G.M. Odegard, Mechanical properties of graphene nanoplatelet/epoxy composites, Journal of applied polymer science, 128(6) (2013) 4217-4223.

[4] M.A. Rafiee, J. Rafiee, Z. Wang, H. Song, Z.-Z. Yu, N. Koratkar, Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content, ACS nano, 3(12) (2009) 3884-3890.

[5] J. Suh, D. Bae, Mechanical properties of polytetrafluoroethylene composites reinforced with graphene nanoplatelets by solid-state processing, Composites Part B: Engineering, 95 (2016) 317-323.

[6] J.-Z. Liang, Effects of graphene nano-platelets size and content on tensile properties of polypropylene composites at higher tension rate, Journal of Composite Materials, 52(18) (2018) 2443-2450.

[7] Z. Shokrieh, M. Shokrieh, Z. Zhao, A modified micromechanical model to predict the creep modulus of polymeric nanocomposites, Polymer Testing, 65 (2018) 414-419.

[8] M.M. Shokrieh, M. Esmkhani, Z. Shokrieh, Z. Zhao, Stiffness prediction of graphene nanoplatelet/epoxy nanocomposites by a combined molecular dynamics–micromechanics method, Computational materials science, 92 (2014) 444-450.

nanoparticle-on the nanoparticle size and volume fraction dependent aggregation, Composites Part B: Engineering, 167 (2019) 277-301.

[18] K.A. Zarasvand, H. Golestanian, Investigating the effects of number and distribution of GNP layers on graphene reinforced polymer properties: Physical, numerical and micromechanical methods, Composites Science and Technology, 139 (2017) 117-126.

[19] S. Boutaleb, F. Zaïri, A. Mesbah, M. Nait-Abdelaziz, J.-M. Gloaguen, T. Boukharouba, J.-M. Lefebvre, Micromechanics-based modelling of stiffness and yield stress for silica/polymer nanocomposites, International Journal of Solids and Structures, 46(7-8) (2009) 1716-1726.

[20] H. Chong, S. Hinder, A. Taylor, Graphene nanoplatelet-modified epoxy: effect of aspect ratio and surface functionality on mechanical properties and toughening mechanisms, Journal of materials science, 51(19) (2016) 8764-8790.

[21] X.-Y. Ji, Y.-P. Cao, X.-Q. Feng, Micromechanics prediction of the effective elastic moduli of graphene sheet-reinforced polymer nanocomposites, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18(4) (2010) 045005.

[22] M. Vakilifard, M. Mahmoodi, Three dimensional micromechanical modeling of damping capacity of nano fiber reinforced polymer nanocomposites, Modares Mechanical Engineering, 16(9) (2016) 257-266.

[23] M. Paley, J. Aboudi, Micromechanical analysis of composites by the generalized cells model, Mechanics of materials, 14(2) (1992) 127-139.

[24] J. Aboudi, S.M. Arnold, B.A. Bednarcyk, Micromechanics of composite materials: a generalized multiscale analysis approach, Butterworth-Heinemann, 2012.

[25] J. Aboudi, R. Haj-Ali, A fully coupled thermal–electrical–mechanical micromodel for multi-phase periodic thermoelectrical composite materials and devices, International Journal of Solids and Structures, 80 (2016) 84-95.

[9] C.M. Hadden, D.R. Klimek-McDonald, E.J. Pineda, J.A. King, A.M. Reichanadter, I. Miskioglu, S. Gowtham, G.M. Odegard, Mechanical properties of graphene nanoplatelet/carbon fiber/epoxy hybrid composites: Multiscale modeling and experiments, Carbon, 95 (2015) 100-112.

[10] R. Rafiee, A. Eskandariyun, Predicting Young's modulus of agglomerated graphene/polymer using multi-scale modeling, Composite Structures, 245 (2020) 112324.

[11] H. Al Mahmud, M.S. Radue, S. Chinkanjanarot, G.M. Odegard, Multiscale modeling of epoxy-based nanocomposites reinforced with functionalized and non-functionalized graphene nanoplatelets, Polymers, 13(12) (2021) 1958.

[12] H. Al Mahmud, M.S. Radue, S. Chinkanjanarot, W.A. Pisani, S. Gowtham, G.M. Odegard, Multiscale modeling of carbon fiber-graphene nanoplatelet-epoxy hybrid composites using a reactive force field, Composites Part B: Engineering, 172 (2019) 628-635.

[13] H. Wan, L. Fan, J. Jia, Q. Han, M.Y.A. Jamalabadi, Micromechanical modeling over two length-scales for elastic properties of graphene nanoplatelet/graphite fiber/polyimide composites, Materials Chemistry and Physics, 262 (2021) 124255.

[14] Y. Pan, G. Weng, S. Meguid, W. Bao, Z. Zhu, A. Hamouda, Interface effects on the viscoelastic characteristics of carbon nanotube polymer matrix composites, Mechanics of Materials, 58 (2013) 1-11.

[15] D. Ciprari, K. Jacob, R. Tannenbaum, Characterization of polymer nanocomposite interphase and its impact on mechanical properties, Macromolecules, 39(19) (2006) 6565-6573.

[16] M. Mahmoodi, M. Vakilifard, CNT-volume-fraction-dependent aggregation and waviness considerations in viscoelasticity-induced damping characterization of percolated-CNT reinforced nanocomposites, Composites Part B: Engineering, 172 (2019) 416-435.

[17] M. Vakilifard, M. Mahmoodi, Dynamic moduli and creep damping analysis of short carbon fiber reinforced polymer hybrid nanocomposite containing silica

188-199.

[31] Y.-N. Rao, H.-L. Dai, Micromechanics-based thermo-viscoelastic properties prediction of fiber reinforced polymers with graded interphases and slightly weakened interfaces, Composite Structures, 168 (2017) 440-455.

[32] A. Melro, P. Camanho, S. Pinho, Generation of random distribution of fibres in long-fibre reinforced composites, Composites Science and Technology, 68(9) (2008) 2092-2102.

[33] M. Yas, M. Heshmati, Dynamic analysis of functionally graded nanocomposite beams reinforced by randomly oriented carbon nanotube under the action of moving load, Applied Mathematical Modelling, 36(4) (2012) 1371-1394.

[34] L. Walpole, On the overall elastic moduli of composite materials, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 17(4) (1969) 235-251.

[35] M. Hassanzadeh-Aghdam, R. Ansari, M. Mahmoodi, A. Darvizeh, Effect of nanoparticle aggregation on the creep behavior of polymer nanocomposites, Composites Science and Technology, 162 (2018) 93-100.

[26] Y. Zare, K.Y. Rhee, D. Hui, Influences of nanoparticles aggregation/agglomeration on the interfacial/interphase and tensile properties of nanocomposites, Composites Part B: Engineering, 122 (2017) 41-46.

[27] T.M. Ricks, T.E. Lacy Jr, E.J. Pineda, B.A. Bednarcyk, S.M. Arnold, Computationally efficient High-Fidelity Generalized Method of Cells micromechanics via order-reduction techniques, Composite Structures, 156 (2016) 2-9.

[28] M. Mahmoodi, M. Vakilifard, Interfacial effects on the damping properties of general carbon nanofiber reinforced nanocomposites–a multi-stage micromechanical analysis, Composite Structures, 192 (2018) 397-421.

[29] S. Ben, J. Zhao, T. Rabczuk, A theoretical analysis of interface debonding for coated sphere with functionally graded interphase, Composite Structures, 117 (2014) 288-297.

[30] T. Sabiston, M. Mohammadi, M. Cherkaoui, J. Lévesque, K. Inal, Micromechanics for a long fibre reinforced composite model with a functionally graded interphase, Composites Part B: Engineering, 84 (2016)

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

H. Mehdipour, A. Rohani Bastami, M. H. Soorgee , Three-dimensional micromechanical modelling of effective elastic properties of graphene nanoplatelet-reinforced polymer nanocomposite using a HFGMC-based homogenization approach , Amirkabir J. Mech Eng., 55(4) (2023) 495-514.

DOI: 10.22060/mej.2023.22059.7560