

تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری زمینه PLA تقویت شده با ذرات سیلیکا با مدل های میکرومکانیکی بهبود یافته و مولکولی

محمد کاظم نیکزاد

دانشجوی دکتری، گروه طراحی جامدات، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی، تهران، ایران، kazem.nikzad@yahoo.com

فرامرز آشنای قاسمی*

استاد، گروه طراحی جامدات، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی، تهران، ایران، f.a.ghasemi@sru.ac.ir & faramarz_ashenai_ghasemi@yahoo.com

فرشید آقاداتودی

دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد خمینی شهر، دانشگاه آزاد اسلامی، خمینی شهر، اصفهان، ایران، davoodi@iaukhsh.ac.ir

چکیده

در این مطالعه از مدل های میکرو مکانیک بهبود یافته، برای پیش بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری با زمینه پلی لاکتیک اسید (PLA)، تقویت شده با نانوذرات سیلیکا استفاده شده است. مدول یانگ و استحکام نهایی کششی سه نمونه نانوکامپوزیت با کسر حجمی متفاوت بررسی شده است. برای پیش بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت ها از دو نظریه بهبود یافته هالپین-سای و کرنر استفاده شده است. برای تعیین استحکام نهایی نیز، دو نظریه نیکولایس-نارکس و پوکانسکی به کار گرفته شد. در مورد مدول یانگ، نتایج نشان داد که مقدار خطای دو نظریه هالپین-سای و کرنر در پیش بینی نتایج برای کسرهای حجمی مختلف، به ترتیب بین ۰/۰۷۷ تا ۰/۴ درصد و ۰/۱۹ تا ۲/۱۳ درصد است. هر دو نظریه در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی، با دقت قابل قبولی مدول یانگ را پیش بینی کرده اند. در مدل های استحکام نهایی، رابطه پوکانسکی به دلیل وجود ضرایب تصحیح، دقت بیشتری در پیش بینی داشته است. همچنین بر اساس نتایج اعلام شده از مدل های دینامیک مولکولی، معادله ای معرفی شده است که نتایج دینامیک مولکولی را به نتایج آزمایشگاهی مرتبط کند. ضرایب این معادله نماینده اثر شرایط عملی مانند تجمع ذرات و اثر ابعاد نانوذره است.

واژه های کلیدی: نانوکامپوزیت، مدول یانگ، استحکام نهایی، مدل میکرومکانیکی بهبود یافته، دینامیک مولکولی، PLA.

Mechanical properties analysis of PLA matrix polymer nanocomposite reinforced with silica particles using improved micromechanical and molecular models

M. K. Nikzad

Solids Design Group, Faculty of Mechanical Engineering, Shahid Rajaee Teacher Training University of Education, Tehran, Iran

F. Ashenai Ghasemi

Solids Design Group, Faculty of Mechanical Engineering, Shahid Rajaee Teacher Training University of Education, Tehran, Iran

F. Aghadavoudi

Department of Mechanical Engineering, Kho.C., Islamic Azad University, Khomeinishahr Iran

Abstract

In this study, modified micromechanical models are used to predict the mechanical properties of polymer nanocomposites with a polylactic acid (PLA) matrix and reinforced with silica nanoparticles. The mechanical properties of three nanocomposite samples with different volume fractions, including Young's modulus and ultimate tensile strength, are investigated. Two modified micromechanical theories including Halpin-Tsai and Kerner, are used to predict Young's moduli of nanocomposite samples. Moreover, Nicolais-Narkis and Pukánszky equations are used to determine the ultimate strength. The results for Young's modulus showed that the error of the two theories of Halpin-Tsai and Kerner in predicting the results for different volume fractions is between 0.077 and 0.4 percent and 0.19 and 2.13 percent, respectively, and both theories have predicted Young's modulus with acceptable accuracy compared to the experimental results. In the ultimate strength models, the Pukánszky relationship has more accurate in predicting due to the presence of correction factors. Also, based on the published results from molecular dynamics models, an equation has been introduced that relates the molecular dynamics results to the experimental results. The coefficients of this equation represents the effect of practical conditions such as particle aggregation and the effect of nanoparticle size.

Keywords: Nanocomposite, Young's modulus, Ultimate strength, Modified micromechanical model, Molecular dynamics, PLA.

۱-مقدمه

معمولی، خواص مکانیکی و فیزیکی مناسب تری را ارائه می کنند. مخصوصاً نانوکامپوزیت های پلیمری در کاربردهای صنعتی مانند صنایع شیمیایی، خودروسازی، ساخت وساز، صنایع پزشکی، لوازم خانگی، ورزش، کشاورزی و صنایع الکترونیک کاربردهای بسیاری پیدا کرده اند [۱]. در سال های اخیر، به دلیل نگرانی های زیست محیطی و انرژی، مطالعه بر روی خواص مختلف پلیمرهای سازگار با محیط زیست و

امروزه کاربرد مواد نانوکامپوزیت در صنایع مختلف توسعه یافته است. مواد نانوکامپوزیت جایگزین بسیار خوبی برای کامپوزیت های معمولی هستند، زیرا علاوه بر سبک تر بودن، عملکرد بهتری نیز دارند [۱]. ذرات تقویت کننده در ابعاد نانو، به دلیل ابعاد بسیار کوچک و داشتن سطح تماس بالا با ماتریس، در مقایسه با تقویت کننده های

* نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: f.a.ghasemi@sru.ac.ir & faramarz_ashenai_ghasemi@yahoo.com

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۱۰/۲۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۷/۰۷

بهبود خواص آنها، به‌طور فزاینده‌ای موردتوجه قرار گرفته است. یکی از این پلیمرهای سازگار با محیط‌زیست، پلی‌لاکتیک اسید (PLA) است که با توجه به خاصیت تجزیه‌پذیری خوبی که دارد، نسبت به پلیمرهای مبتنی بر نفت بیشتر موردتوجه قرار گرفته است [۳]. در میان نانوذرات تقویت‌کننده موجود، نانوذرات سیلیس در انواع مختلف، به‌ویژه در بهبود خواص مکانیکی پلیمرها مؤثر بوده است [۴].

پیش‌بینی خواص مکانیکی و حرارتی نانوکامپوزیت‌ها از طریق شبیه‌سازی آنها، راهی بسیار سودمند برای کاهش هزینه آزمون‌هاست. در ادامه به چند نمونه از مقالاتی که در آن نتایج شبیه‌سازی و تجربی با هم مقایسه شده‌اند اشاره می‌شود. در سال ۲۰۱۵ شکریه و همکاران [۵] نانوکامپوزیت‌هایی از جنس پلی‌پروپیلن و گرافن در درصد‌های وزنی ۰/۵، ۱ و ۲ ساختند و آن را با مدل مواد جانسون-کوک توسط کد المان محدود صریح شبیه‌سازی کردند. در نمونه با ۰/۵ درصد وزنی گرافن، ۲۱ درصد افزایش استحکام کششی و ۳۴ درصد افزایش مدول یانگ مشاهده شد که نتایج تجربی نیز تقریباً نتایج شبیه‌سازی را تأیید کرد.

در سال ۲۰۱۹ هورتامونز و همکاران [۶] نانوکامپوزیتی با زمینه رزین اپوکسی و نانوذرات تقویت‌کننده گرافن در ۰/۳ درصد حجمی را ابتدا در نرم‌افزار ABAQUS شبیه‌سازی کردند و آن را مورد تست کشش قرار دادند. نتایج شبیه‌سازی نشان داد، با افزوده شدن ۰/۳ درصد وزنی نانوذرات گرافن، مدول یانگ ۳۹ درصد افزایش می‌یابد درحالی‌که با انجام تست کشش، این افزایش مدول یانگ، ۳۴ درصد گزارش شد. نتایج شبیه‌سازی با تجربی، حدود ۱۴ درصد اختلاف داشتند.

در سال ۲۰۱۹ ماننا و همکاران [۷] آزمون کشش را بر روی نانوکامپوزیت‌های از جنس اپوکسی و ذرات تقویت‌کننده گرافن در درصد‌های حجمی ۰/۵، ۲/۵ و ۷/۵ شبیه‌سازی کردند. سپس این آزمایش را به‌صورت تجربی انجام دادند. با توجه به اعداد به‌دست‌آمده، نتایج تجربی و شبیه‌سازی در ۲/۵ درصد وزنی ۱۷ درصد، در ۵ درصد وزنی ۲۵ درصد و در ۷/۵ درصد وزنی، ۲۶ درصد اختلاف داشتند. در سال ۲۰۲۱ فراذین و همکاران [۸] خواص مکانیکی الاستیک نانوکامپوزیت‌هایی از جنس زمینه پلیمر و تقویت‌کننده نانوذرات دی‌اکسید تیتانیوم در نرم‌افزار Materials Studio شبیه‌سازی کردند. در این شبیه‌سازی، مدول یانگ نمونه نانوکامپوزیت و ضریب پواسون محاسبه شده و نتایج آن در محاسبات خواص مکانیکی نانوکامپوزیت سه فازی استفاده شده است.

در سال ۲۰۲۱ رحمانیان [۹] نانوکامپوزیت‌هایی مبتنی بر زمینه پلی‌اتیلن سنگین و ذرات تقویت‌کننده روی اکسید، در چند درصد وزنی مختلف با المان محدود طراحی و سپس آزمون ضربه چارپی را با آن شبیه‌سازی کرد. بهترین نتیجه آزمون ضربه را ۱ درصد وزنی داشت، که البته نتایج شبیه‌سازی و تجربی حدود ۱۱ درصد اختلاف داشتند. در سال ۲۰۲۱ زمین‌پیما و همکاران [۱۰] آزمون کشش و دمای انتقال شیشه را بر روی نانوکامپوزیت‌هایی از جنس زمینه پلی‌اکسی متیلن و نانولوله‌های کربنی در ۰/۲ وزنی و در دمای ۳۰۰ کلوین شبیه‌سازی کردند. اعداد به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی برای مدول یانگ ۳/۹۲ گیگاپاسکال و دمای انتقال شیشه ۲۴۳ کلوین بود. اعداد به‌دست‌آمده از آزمون تجربی برای مدول یانگ ۳ گیگاپاسکال و دمای انتقال شیشه ۲۴۴ کلوین بود. نتایج آزمون تجربی و شبیه‌سازی برای مدول یانگ

حدود ۳۰ درصد و برای دمای انتقال شیشه، کمتر از ۱ درصد اختلاف داشتند.

در این تحقیق با مقایسه نتایج تجربی و شبیه‌سازی خواص الاستیک نانوکامپوزیت‌های مورد مطالعه، از طریق روابط میکرومکانیک، بهترین رابطه برای پیش‌بینی خواص مکانیکی شامل مدول یانگ و استحکام نهایی برای نانوکامپوزیت با زمینه پلی‌لاکتیک اسید و تقویت‌کننده نانوذرات سیلیکا ارائه شده است. همچنین با مقایسه نتایج عملی و دینامیک مولکولی ضریب اصلاحی برای تعیین خواص واقعی نانوکامپوزیت از نتایج دینامیک مولکولی به‌دست‌آمده است. نتایج ارائه شده در شبیه‌سازی‌ها با نتایج به‌دست‌آمده از آزمون‌های مربوط به خواص نانوکامپوزیت‌ها در بیشتر موارد با هم اختلاف دارند. علت این امر را می‌توان به متفاوت بودن اندازه واقعی نانوذرات، متفاوت بودن شرایط محیطی در آزمون تجربی و شبیه‌سازی و تغییرات دما در حین آزمایش نسبت داد.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- مواد

مواد به کار گرفته شده در قسمت تجربی، پلی‌لاکتیک اسید خالص با گرید Ingeo® 2002D محصول شرکت نیچر ورکز آمریکا و نانوذرات سیلیکا با اندازه ۲۰ تا ۳۰ نانومتر ساخت شرکت USNANO هیوستون تگزاس کشور آمریکا بودند. شکل ۱ تصویر مواد اولیه مورد استفاده برای ساخت نمونه را نشان می‌دهد.



شکل ۱- مواد اولیه مورد استفاده الف. گرانول پلی لاکتیک اسید ب. نانوذرات ۲۰-۳۰ نانومتری سیلیکا

نمونه‌های مورد مطالعه با دستگاه مخلوط‌کن داخلی HBI SYS90 ساخت کشور آمریکا ساخته شدند. دقت بالا و نیاز کمتر به مواد اولیه و کنترل پارامترهایی مانند گشتاور و دما از قابلیت‌های این دستگاه بود. این دستگاه قادر بود حدود ۴۵ تا ۵۰ گرم از نمونه را در خود جای دهد. دمای مخلوط‌کن داخلی روی ۱۹۰ درجه سلسیوس تنظیم شد و سرعت چرخش مارپیچ دستگاه به ۶۰ دور در دقیقه تعیین گردید. شکل ۲ تصویر دستگاه مخلوط‌کن داخلی را نشان می‌دهد.

شدت این پدیده در حدی نبود که به جداسازی فاز منجر شود، ولی می‌تواند در تغییرات خواص مکانیکی مورد مطالعه (مدول یانگ و استحکام کششی) مؤثر باشد [۱۱].

آزمون کشش با استفاده از دستگاه سننام مدل STM50 در پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران در دمای محیط انجام شد. سرعت حرکت فک‌ها روی ۵ میلی‌متر بر دقیقه تنظیم شد. این آزمون برای محاسبه مدول یانگ و استحکام کششی نهایی نمونه ها، ۳ بار انجام شد و میانگین آنها به عنوان نتیجه نهایی در نظر گرفته شد. اعداد ۰/۵۹ گیگاپاسکال برای مدول یانگ و ۵۶/۵۸ گیگاپاسکال برای استحکام کششی نهایی پلی لاکتیک اسید خالص ثبت شدند. برای نمونه های با کسر حجمی ۰/۶۴۲، ۰/۶۱ و ۰/۶۴۴ درصد نیز، به ترتیب مدول یانگ ۵۷/۵۸، ۵۶/۵۰ و ۵۷/۴۰ گیگاپاسکال و استحکام کششی ۰/۶۴۲، ۰/۶۱ و ۰/۶۴۴ گیگاپاسکال به دست آمدند.

۲-۲- مدل سازی میکرومکانیک

یکی از روش‌های پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری، استفاده از روش‌های نیمه تجربی مبتنی بر نظریه‌های میکرومکانیک می‌باشد. در این روش‌ها برخی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها مانند مدول یانگ یا استحکام نهایی به کمک روابط تحلیلی بهبود یافته، محاسبه می‌شوند. ضرایب تصحیح استفاده شده در این روابط، از مقادیر تجربی یا آزمایشگاهی به دست می‌آیند. خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری که بخش تقویت کننده آنها به صورت ذره‌ای است، علاوه بر کسر حجمی ذرات، تابع پارامترهای دیگری مانند ابعاد ذرات یا میزان چسبندگی ذرات به ماتریس یا میزان تجمع ذرات است [۱۱ و ۱۳].

نظریه‌های متعددی برای پیش‌بینی خواص مکانیکی کامپوزیت‌های با تقویت کننده ذره‌ای پیشنهاد شده است. در این مطالعه دو نظریه هالپین-سای^۱ برای نانوکامپوزیت‌های ذره‌ای و نظریه کرنر^۲ برای پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت مورد توجه قرار گرفته است. در نظریه هالپین-سای رابطه (۱) برای پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت دارای خواص طولی و عرضی متفاوت پیشنهاد شده است [۱۲].

$$E_C = E_M \left[\frac{3}{8} \left(\frac{1 + 2\xi \eta_L V_f}{1 - \eta_L V_f} \right) + \frac{5}{8} \left(\frac{1 + 2\xi \eta_T V_f}{1 - \eta_T V_f} \right) \right] \quad (1)$$

در رابطه (۱) E_C و E_M به ترتیب معرف مدول یانگ کامپوزیت و ماتریس هستند و V_f کسر حجمی تقویت کننده است. دو ضریب η_L و η_T مربوط به خواص طولی و عرضی نمونه هستند و با روابط (۲) و (۳) تعریف می‌شوند [۱۲].

$$\eta_L = \frac{\frac{E_f}{E_m} - 1}{\frac{E_f}{E_m} + 2\xi} \quad (2)$$

$$\eta_T = \frac{\frac{E_f}{E_m} - 1}{\frac{E_f}{E_m} + 2} \quad (3)$$

¹ Halpin-Tsai

² Kerner



شکل ۲- دستگاه مخلوط کن داخلی (اینترنال میکسر)

برای ساخت نمونه ها، گرانول‌های پلی لاکتیک اسید، به تدریج وارد دستگاه شده و به مدت ۳ دقیقه در این شرایط مخلوط شدند. برای پلی لاکتیک اسید خالص، ۳ دقیقه زمان برای ترکیب کافی بود. در نمونه‌هایی که شامل نانوذرات سیلیکا بودند، پس از ۳ دقیقه، گرانول‌های پلی لاکتیک اسید کاملاً مخلوط شده و به حالت یکنواختی رسیدند. سپس نانوذرات سیلیکا، با درصدهای حجمی و اندازه‌های مورد نظر، به خمیر پلی لاکتیک اسید خالص اضافه شدند و حدود ۷ دقیقه دیگر نیز به همان صورت ترکیب شدند [۳].

سپس دستگاه مخلوط کن داخلی خاموش شد و ترکیب نرم و خمیری به دست آمده، جمع‌آوری شد. پس از تولید نمونه‌ها توسط دستگاه، ورقه‌ها داخل دستگاه پرس داغ قرار گرفتند. ابتدا ترکیبات با استفاده از صفحات مخصوص و کاغذهای نسوز، در دمای ۱۸۰ درجه سلسیوس به مدت ۶ دقیقه تحت فشار در دستگاه پرس داغ قرار داده شدند. سپس، با استفاده از دستگاه پرس دیگری، با فشار ۲۰ مگاپاسکال، سرد شدند. قالب استاندارد نمونه‌های مورد نظر برای آزمون کشش، بر اساس استاندارد D638 و ابعاد ۱۶۵×۱۹×۳/۲ میلی‌متر تهیه شدند. شکل ۳ نمونه تولید شده برای آزمون کشش را نشان می‌دهد.



شکل ۳- نمونه پلی لاکتیک اسید خالص تولید شده برای آزمون کشش

قبل از انجام آزمون کشش، با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روشی از نمونه‌های ساخته شده برای بررسی ریز ساختار و میزان پراکندگی نانوذرات سیلیکا در ماتریس پلی لاکتیک اسید، عکس‌های FESEM تهیه شد. بررسی ریزساختار نمونه‌های مورد مطالعه نشان داد که پراکندگی نانوذرات تقویت کننده سیلیکا در ماتریس پلی لاکتیک اسید مناسب بوده است و تنها در چند نقطه از نمونه‌ها، پدیده آگلومره شدن (تجمع نانوذرات) مشاهده شد. هر چند

در رابطه (۲)، مقدار γ برابر با نسبت منظری تقویت کننده در نظر گرفته می شود. در مورد کامپوزیت های با تقویت کننده ذره ای شکل انتظار می رود، به دلیل توزیع تصادفی تقویت کننده ها، رفتار طولی و عرضی کامپوزیت مشابه باشد و رابطه (۱) به صورت رابطه (۴) ساده می شود [۱۳].

$$E_C = E_M \left(\frac{1+2\xi\eta V_f}{1-\eta V_f} \right) \quad (4)$$

نظریه کرنر، نظریه دیگری است که برای پیش بینی مدول یانگ کامپوزیت های با تقویت کننده ذره ای استفاده می شود. طبق این نظریه مدول یانگ کامپوزیت از رابطه (۵) محاسبه می شود [۱۴].

$$E_C = E_M \left[1 + \frac{15V_f(1-\nu)}{(1-V_f)(8-10\nu)} \right] \quad (5)$$

در رابطه (۵)، ν ضریب پواسون ماتریس است که مقدار آن ۰/۳ در نظر گرفته شد. از این رابطه برای تخمین مدول یانگ نانوکامپوزیت های با تقویت کننده کروی شکل استفاده می شود.

به دلیل آن که رفتار کامپوزیت های پلیمری عمدتاً رفتاری ترد است، به جای استحکام تسلیم، بیشتر از استحکام نهایی استفاده می شود. برای تخمین استحکام نهایی کامپوزیت های دارای تقویت کننده کروی شکل، معمولاً از روابط نیمه تجربی استفاده می شود. به دلیل ماهیت پیچیده شکست در نانوکامپوزیت های پلیمری و وابستگی استحکام کامپوزیت به نحوه چسبندگی تقویت کننده و ماتریس، فرم روابط ارائه شده در این زمینه تنوع زیادی دارد. نیکولایس - نارسکی^۱ رابطه (۶) را برای پیش بینی استحکام نهایی کامپوزیت ارائه کرده اند [۱۵].

$$S_C = S_m(1 - K V_f^{2/3}) \quad (6)$$

در رابطه (۶)، S_m و S_c به ترتیب استحکام نهایی (کششی) کامپوزیت و ماتریس هستند و K یک ضریب تجربی است که نشانگر میزان چسبندگی ماتریس و تقویت کننده است. ضریب K برای چسبندگی ضعیف، حدود ۱/۲۱ پیشنهاد شده است [۱۵]. یکی دیگر از روابط پیش بینی استحکام نهایی، رابطه پوکانسکی^۲ است. طبق رابطه پوکانسکی، استحکام نهایی کششی از رابطه (۷) قابل محاسبه است [۱۴].

$$S_C = S_m \left[\frac{1 - V_f}{(1 + 2.5V_f)} \right] e^{B(V_f)} \quad (7)$$

در رابطه (۷)، B یک ضریب تجربی است که بر اساس نتایج آزمایشگاهی مربوط به هر کامپوزیت قابل استخراج است.

۲-۳- مدل سازی دینامیک مولکولی

در قسمت شبیه سازی دینامیک مولکولی، مدل های مولکولی نانوکامپوزیت دارای نانوذرات سیلیکا با اندازه ۳۰ آنگستروم در نرم افزار لمپس شبیه سازی شدند. شبیه سازی دینامیک مولکولی، روشی برای تحلیل و پیش بینی خواص توده اتمی بر اساس نیروهای بین اتمی است [۱۶]. در این روش، اتم ها در محدوده مشخصی از زمان و بر اساس قوانین فیزیک، اجازه برهمکنش با هم را دارند. روش شبیه سازی دینامیک مولکولی، روشی واسطه بین روش آزمایشگاهی و روش نظری ایجاد می کند و در حکم یک آزمایشگاه مجازی، روابط بین ساختار و حرکت مولکول ها را تحلیل می کند [۱۷].

معادله حرکت شبیه سازی های صورت گرفته در شکل کلی به صورت رابطه (۸) زیر است:

$$F_i^{\rightarrow}(t) = m_i \left(\frac{d^2 r_i^{\rightarrow}}{dt^2} \right) \quad (8)$$

در رابطه (۸)، F_i ، m_i و r_i به ترتیب نیروی اعمال شده بر اتم i ام در زمان t ، جرم اتم و مکان اتم هستند [۱۸-۲۰]. یکی از مهمترین مراحل مهم در شبیه سازی دینامیک مولکولی، انتخاب میدان نیرو است. هر چه این میدان نیرو با دقت بیشتری انتخاب و تعریف شود، اندرکنش های بین اتمی دقیق تر تعریف شده و پیش بینی فرآیندهای فیزیکی به واقعیت نزدیک تر خواهد بود [۲۱]. میدان نیرو اصطلاحاً به روابط ریاضی گفته می شود که تعیین کننده تعاملات نیرویی بین اتم های مختلف در ساختار ماده است. در روابط میدان نیرو، پتانسیل نیرویی اندرکنش بین اتم ها طبق رابطه (۹) به دو دسته اندرکنش های پیوندی و غیر پیوندی تقسیم می شوند:

$$E_{total} = E_{bonded\ interactions} + E_{non-bonded\ interactions} \quad (9)$$

اندرکنش های پیوندی، نماینده پیوند شیمیایی بین دو یا چند اتم هستند. اتم ها بر اساس نوع اتصال، زوایای تشکیل شده و پیچش های ساختاری درون مولکول ها با یکدیگر تعامل نیرویی دارند. پتانسیل های پیوندی نقشی اساسی در ایجاد یا تعیین روابط نیرویی بین اتم های دارای پیوند شیمیایی، نقش مهمی در ایجاد خواص اساسی ماده، مانند خواص مکانیکی دارند. پتانسیل های پیوندی طبق رابطه (۱۰) شامل مجموع پتانسیل های کششی، خمشی زاویه ای، پیچش زاویه دو وجهی هستند:

$$E_{bonded\ interactions} = E_{stretching} + E_{angle} + E_{dihedral} \quad (10)$$

روابط مربوط به توابع پتانسیل پیوندی طبق معادلات (۱۱) تا (۱۳) تعریف می شوند.

$$E_{stretching}(r) = \frac{1}{2} K_b (r - r_0)^2 \quad (11)$$

$$E_{angle}(\theta) = \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 \quad (12)$$

$$E_{dihedral}(\varphi) = \sum_{i=0}^3 C_i (\cos \varphi)^i \quad (13)$$

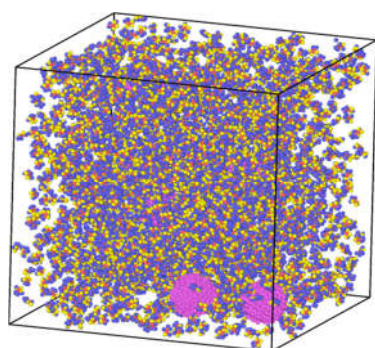
در این روابط، r نشان دهنده کشش پیوند است، θ به خمشی زاویه پیوند اشاره دارد و φ پیچش زاویه دووجهی را نمایش می دهد. ثابت های K_b و K_θ نیز به ترتیب مربوط به سختی های پتانسیل زاویه پیوند و طول پیوند هستند. مقادیر θ_0 و r_0 به ترتیب زاویه و طول پیوند تعادلی را مشخص می کنند. متغیر C_i شامل ضرایب چندگانه هارمونیک دووجهی می باشد [۲۲-۲۴].

اندرکنش های غیرپیوندی نماینده تعاملات بین اتم هایی هستند که دارای پیوند شیمیایی نیستند. به عبارت دیگر، اتم ها بدون توجه به نوع اتم های مرتبط با خود، با یکدیگر وارد واکنش می شوند. از جمله مهم ترین این تعاملات، می توان به اندرکنش های واندروالسی و الکترواستاتیکی اشاره کرد. شبیه سازی اندرکنش های غیرپیوندی و پیوندی مواد در این پژوهش، شامل شبیه سازی پلی لاکتیک اسیدخالص و نانوذرات سیلیکا، بر اساس تابع پتانسیل دریدینگ انجام شده است. در این شبیه سازی در بخش پتانسیل غیرپیوندی واندروالسی، از رابطه (۱۴)، رابطه پتانسیل لنارد - جونز استفاده شده است:

$$E_{non-bonded\ interactions} = E_{vdw} \quad (14)$$

¹ Nicolais- Narkis

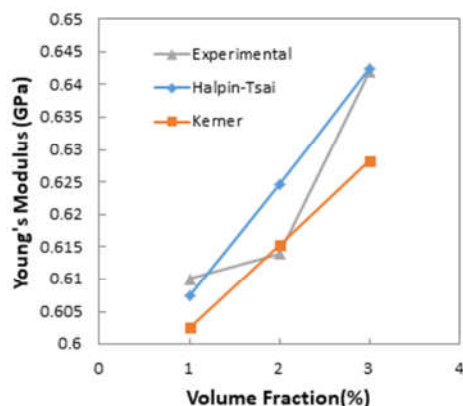
² Pukánszky



شکل ۴- نمونه اتمی نانوکامپوزیت شبیه‌سازی شده

۳- نتایج و بحث

در این تحقیق از روش‌های میکرومکانیک مرسوم برای پیش‌بینی خواص نانوکامپوزیت پلیمری ساخته‌شده، استفاده شده است. دو نظریه هالپین-سای و کرنر برای پیش‌بینی مدول یانگ و دو نظریه نیکولایس-نارکس و پوکانسکی برای پیش‌بینی استحکام کششی نانوکامپوزیت پلی‌لاکتیک اسید با تقویت‌کننده ذرات سیلیکا استفاده شده است. شکل ۵ نمودار تغییرات مدول یانگ نانوکامپوزیت را برحسب کسر حجمی نانوذرات تقویت‌کننده نشان می‌دهد. با توجه به شکل مشخص است پیش‌بینی هر دو نظریه برای مدول یانگ نسبت به نتایج آزمایشگاهی با خطای اندکی همراه بوده است.



شکل ۵- نتایج نظریه‌های هالپین-سای و کرنر و نتایج تجربی در مورد مدول یانگ

همان‌گونه که در شکل مشخص است با افزایش کسر حجمی در محدوده آزمایش، به دلیل آنکه مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط نظریه‌هایی مانند قانون مخلوط‌ها یا قانون مخلوط‌های اصلاح‌شده، برای این نانوکامپوزیت در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی با خطای بسیار زیادی توأم بود، لذا این دسته از نظریه‌ها در این تحقیق مورد استفاده قرار نگرفته است. مشاهده می‌شود که هم در نتایج آزمایشگاهی و هم در نتایج پیش‌بینی روابط میکرو مکانیک، مدول یانگ افزایش یافته است. نتایج خطای پیش‌بینی‌ها در جدول ۱ ارائه شده است.

این پتانسیل برای توصیف تعامل بین ذرات، اتم‌ها یا مولکول‌ها به کار می‌رود. رابطه ریاضی این پتانسیل به صورت رابطه (۱۵) بیان می‌شود:

$$E_{vdW} = 4 \varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{a_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{a_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (15)$$

در رابطه (۱۵)، ε_{ij} بیانگر اختلاف انرژی بین پیوند و جابجایی است، σ_{ij} نشان‌دهنده فاصله‌ای است که در آن پتانسیل بین دو ذره به صفر می‌رسد و r_{ij} فاصله بین مراکز دو ذره را مشخص می‌کند. مقادیر ε و σ نیز با محاسبه انرژی پیوند بین دو اتم در فواصل مختلف و سپس برازش منحنی برای اتم‌های موردنظر به دست می‌آیند [۲۵].

در این شبیه‌سازی، ابعاد نمونه‌های نانوکامپوزیت به صورت سه‌بعدی در نظر گرفته شده و شرایط مرزی به صورت متناوب اعمال شده است. شکل ۴ نمونه‌ای از نانوکامپوزیت شبیه‌سازی شده را نشان می‌دهد. برای تنظیمات باند، زاویه و پیچش زاویه دو وجهی از سبک هارمونیک استفاده شد.

محاسبه مدول یانگ نمونه‌ها، با شرایط دمای جعبه شبیه‌سازی ۳۰۰ کلوین و دامنه نوسانات دمایی ۱۰ کلوین تنظیم شد. گام‌های زمانی (تایم استپ) نیز ۰/۰۰۰۱ فمتوثانیه تعیین گردید و تکانه نیز در نظر گرفته شد. چرخش و پتانسیل نابجا (ایمپروپر) نیز، صفر فرض شد. در این حالت، هنگرد دمای ثابت و حجم ثابت^۱ استفاده شد، به این معنا که تعداد اتم‌ها، حجم سیستم و دما ثابت باقی می‌مانند. هدف از اعمال این هنگرد، حذف تنش داخلی اولیه ساختار مولکولی بود که در هنگام ساخت جعبه شبیه‌سازی به وجود آمده بود. با توجه به چرخه ۱۰ میلیون مرتبه‌ای و گام‌های زمانی ۰/۰۰۰۱ فمتوثانیه‌ای، زمان شبیه‌سازی ۱ پیکو ثانیه تعیین شد [۲۶].

در شبیه‌سازی‌های انجام‌شده، تنش سیستم بر اساس رابطه (۱۶) که به رابطه تنش ویرال مشهور است، محاسبه می‌شود:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[- \sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right] \quad (16)$$

در این معادله، V به حجم سیستم اشاره دارد، m_i جرم و V_i سرعت ذره‌ای i هستند. F_{ij} نشان‌دهنده نیروی بین اتم‌های i و j است، r_{ij} فاصله بین آنها را مشخص می‌کند و α و β مؤلفه‌های مختصات دکارتی می‌باشند [۲۷].

^۱ NVT

جدول ۱- نتایج مدول یانگ دو نظریه هالپین - سای و کرنر و نتایج

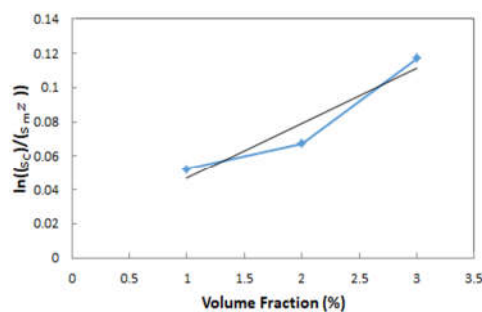
آزمایشگاهی					کسر حجمی %
روش آزمایشگاهی	هالپین - سای	کرنر	هالپین - سای	کرنر	
۱	۰/۶۱	۰/۶۰۷۴	۰/۶۰۲۵	۰/۴	۱/۳۲
۲	۰/۶۱۴	۰/۶۲۴۶	۰/۶۱۵۲	۱/۶۹	۰/۱۹
۳	۰/۶۴۲	۰/۶۴۲۵	۰/۶۲۸۳	۰/۰۷۷	۲/۱۳
RMS		RMS		۰/۰۰۹	
				۰/۰۰۶	

با توجه به نتایج ارائه شده در جدول ۱ مشخص است که مقدار خطای مدل میکرومکانیک برای هالپین - سای بین ۰/۰۷ تا ۰/۴ درصد و برای کرنر بین ۰/۱۹ تا ۲/۱۸ درصد است. همچنین مقدار ریشه میانگین مربعات^۱ برای روش هالپین - سای ۰/۰۰۶ و برای روش کرنر ۰/۰۰۹ است. لذا هر دو روش با دقت بسیار خوبی مدول یانگ نانوکامپوزیت PLA بذرات سیلیکا را پیش‌بینی کرده‌اند، که البته دقت روش هالپین - سای بهتر بوده است.

برای استفاده از نظریه پوکانسکی برای پیش‌بینی استحکام کششی نانوکامپوزیت، لازم است مقدار ثابت B مشخص شود که این مقدار با توجه به نتایج آزمایشگاهی مشخص می‌شود. ضریب B به میزان چسبندگی بین ماتریس و تقویت‌کننده یا خواص مکانیکی فاز میانی وابسته است و بر اساس نتایج نمونه‌های آزمایشگاهی پیشنهاد می‌شود. طبق روشی که در مرجع [۱۴] برای استخراج این ضریب بر اساس رابطه پوکانسکی ارائه شده است اگر در رابطه پوکانسکی ضریب Z به صورت رابطه (۱۷) تعریف شود:

$$z = \left[\frac{1 - V_f}{(1 + 2.5V_f)} \right] \quad (17)$$

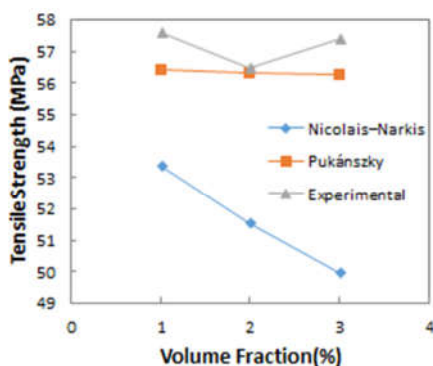
با لگاریتم گرفتن از دو طرف رابطه پوکانسکی، یک رابطه خطی حال می‌شود که در این رابطه، ضریب B شیب خط نمودار $\ln\left(\frac{S_c}{S_{mZ}}\right)$ بر حسب کسر حجمی V_f است. طبق شکل ۶، نمودار تغییرات $\ln\left(\frac{S_c}{S_{mZ}}\right)$ بر حسب مقادیر کسر حجمی V_f بر اساس نتایج آزمایشگاهی نانوکامپوزیت رسم شده و برازش خط ترسیم شده است. با توجه به مقدار شیب خط به دست آمده، برای این نانوکامپوزیت، بهترین مقدار پارامتر B برابر با ۳/۲۵ می‌باشد.



شکل ۶- نمودار تغییرات $\ln\left(\frac{S_c}{S_{mZ}}\right)$ بر حسب کسر حجمی تقویت‌کننده

^۱ Root Mean Square (RMS)

شکل ۷ نمودار تغییرات مقادیر استحکام کششی برای نمونه‌های مختلف نانوکامپوزیت با کسر حجمی مختلف ذرات سیلیکا را نشان می‌دهد. در این نمودار، نتایج پیش‌بینی دو نظریه نیکولایس - ناریکس و پوکانسکی نیز نشان داده شده است. طبق نتایج آزمایشگاهی، مقدار استحکام کششی نمونه‌های نانوکامپوزیت، تغییرات چندانی نسبت به ماده خالص نداشته است و در اکثر موارد اندکی افزایش یافته است. با توجه به دو نظریه به کاررفته برای پیش‌بینی استحکام کششی، نظریه پوکانسکی نتایج نزدیک‌تری را نسبت به نتایج آزمایشگاهی اعلام می‌کند که این امر دلیل استفاده از ثابت B بوده است. مقدار این ثابت تجربی برای این نوع نانوکامپوزیت از طریق برازش خط بر نتایج آزمایشگاه استخراج گردید. این مقایسه دقت روش پوکانسکی را در محاسبه استحکام کششی نانوکامپوزیت ذره‌ای نشان می‌دهد. جدول ۲ مقایسه مقدار خطای پیش‌بینی دو روش را نشان می‌دهد. با توجه به نتایج، مشخص می‌شود که مقدار ریشه میانگین مربعات در روش پوکانسکی، کمتر از روش نیکولایس - ناریکس بوده است.

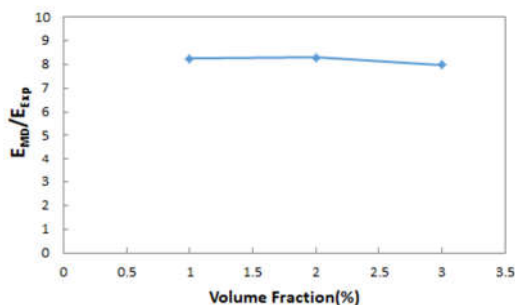


شکل ۷- نتایج نظریه‌های نیکولایس-ناریکس و پوکانسکی و نتایج تجربی در مورد استحکام کششی

جدول ۲- نتایج استحکام کششی دو نظریه نیکولایس - ناریکس و پوکانسکی و نتایج آزمایشگاهی

کسر حجمی %	استحکام کششی نهایی (مگاپاسکال)		خطا (%)	
	روش	نیکولایس	پوکانسکی	نیکولایس
	آزمایشگاهی	-نارکیس		-تارکیس
۱	۵۷/۵۸	۵۳/۴۰	۵۶/۴۴	۷/۲
۲	۵۶/۵	۵۱/۵۳	۵۶/۳۴	۹/۶
۳	۵۷/۴	۴۹/۹۷	۵۶/۲۶	۱۲/۹۴

یکی از روش‌های پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها، استفاده از روش دینامیک مولکولی است. در این مطالعه، نتایج مدول یانگ مدل دینامیک مولکولی مربوط به نانوکامپوزیت پلیمری با زمینه PLA یعنی نتایج مربوط به مرجع [۲۶] با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۱۱] مقایسه شده‌اند. در شکل ۸ نموداری برای مقایسه روند نتایج مدول یانگ آزمایشگاهی با روند نتایج مدول یانگ استخراج شده از روش دینامیک مولکولی ارائه شده است. در این نمودار سه نقطه بر



شکل ۹- تغییرات نسبت مدول یانگ شبیه‌سازی به آزمایشگاهی بر حسب کسر حجمی

۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه از روش‌های بهبودیافته مبتنی بر نظریه میکرومکانیک برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری استفاده شد. دو خاصیت مکانیکی اصلی نانوکامپوزیت شامل مدول یانگ و استحکام نهایی مورد مطالعه قرار گرفتند. در این مطالعه از روش‌های هالپین - سای و کرنر برای پیش‌بینی خواص مکانیکی الاستیک استفاده شد و نتایج به دست آمده با نتایج عملی مقایسه شد. این مقایسه نشان داد که مقدار خطای دو روش هالپین - سای و کرنر به ترتیب بین ۰/۰۷۷ تا ۰/۴ درصد و ۰/۱۹ تا ۲/۱۳ درصد است که نشانگر دقت هر دو مدل در پیش‌بینی خواص الاستیک است. همچنین از دو رابطه نیمه تجربی نظریه نیکولایس-نارکس و پوکانسکی که برای پیش‌بینی خواص نانوکامپوزیت ذره‌ای استفاده می‌شوند، استفاده شد که نظریه پوکانسکی نتایج دقیق‌تری را ارائه نمود. سپس نتایج مدل‌های مولکولی که برای پیش‌بینی مدول یانگ نانوکامپوزیت استفاده شده بودند، با نتایج عملی مقایسه شدند. این مقایسه نشان داد که به دلیل اختلاف شرایط ایده‌آل مدل با شرایط عملی آزمایشگاه، نیاز به استفاده از روابط تصحیح‌کننده برای مرتبط کردن نتایج آزمایشگاهی با نتایج حاصل از مدل دینامیک مولکولی وجود دارد.

۵- سپاسگزاری

این پژوهش با حمایت مالی دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی طبق ابلاغ گزنت شماره ۱۴۰۴/۳۷۶۰۰۳ مورخ ۱۴۰۴/۰۳/۱۷ انجام گردیده است.

۶- نمادها

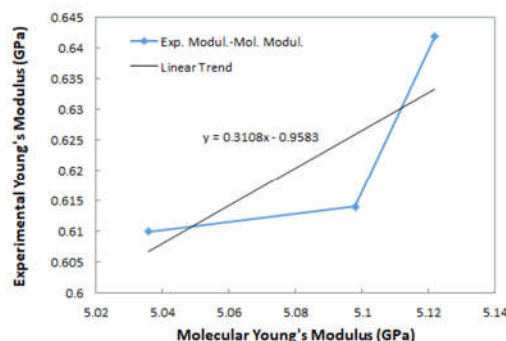
F_i	نیروی اعمال شده بر اتم i
m_i	جرم اتم
r_i	مکان اتم
E_C	مدول یانگ کامپوزیت
E_M	مدول یانگ ماتریس
V_f	کسر حجمی تقویت‌کننده
S_c	استحکام نهایی (کششی) کامپوزیت
S_m	استحکام نهایی (کششی) ماتریس
K	میزان چسبندگی ماتریس و تقویت‌کننده
r	کشش پیوند

اساس سه کسر حجمی نمونه‌ها وجود دارد که مختصات طول و عرض هر نقطه به ترتیب مدول یانگ آزمایشگاهی و مدول یانگ دینامیک مولکولی متناظر با کسر حجمی مربوطه است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مدول یانگ استخراج شده از روش دینامیک مولکولی به طور مستقیم قابل مقایسه با نتایج آزمایشگاهی نیست و نیاز به رابطه کمکی یا ضرایب تصحیح‌کننده وجود دارد. این امر را می‌توان به تفاوت شرایط مدل مولکولی در ابعاد نانو و شرایط آزمایشگاهی در ابعاد ماکرو مربوط دانست. در مدل مولکولی شرایط ساختار ماده معمولاً ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود و مواردی مانند تجمع ذرات و اثرات پدیده‌هایی مانند وجود حفره یا عیوب در ساختار مواد تشکیل‌دهنده نانوکامپوزیت لحاظ نشده‌اند. همچنین در شرایط آزمایشگاهی ابعاد ذرات تقویت‌کننده نانوکامپوزیت تنوع زیادی دارد که در مدل‌های مولکولی این امر لحاظ نمی‌شود. لذا در این مطالعه مدل مولکولی مقادیر بیشتری را نسبت به نتایج آزمایشگاهی پیش‌بینی کرده است.

البته با توجه به نتایج فوق می‌توان از روش‌های عددی مبتنی بر مقایسه نتایج عملی و مولکولی برای ارائه روابط دارای ضریب تصحیح برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها استفاده نمود. شکل ۹ نسبت مدول یانگ روش دینامیک مولکولی به مدول یانگ روش آزمایشگاهی برای سه نمونه نانوکامپوزیت پلیمری را بر حسب کسر حجمی نشان می‌دهد. با توجه به این شکل می‌توان نتایج گرفت که نسبت مدول یانگ پیش‌بینی‌شده از مدل دینامیک مولکولی به مدول اندازه‌گیری شده آزمایشگاهی مستقل از کسر حجمی نمونه‌ها بوده است. لذا پیشنهاد یک رابطه خطی برای مرتبط کردن نتایج آزمایشگاهی و نتایج مدل دینامیک مولکولی منطقی به نظر می‌رسد. با توجه به نتایج ارائه شده در شکل ۸ رابطه استخراج شده زیر که از برازش خطی به دست آمده است، برای ارتباط نتایج مدل مولکولی و نتایج آزمایشگاهی ارائه شده است:

$$E_{EXP} = 0.3108E_{MD} - 0.9583 \quad (18)$$

در رابطه (۱۸) مقدار ضریب این رابطه می‌تواند نماینده پارامترهای عملی مانند تجمع ذرات و اثر اندازه ذرات و اثر عیوب یا حفره مواد تشکیل‌دهنده نانوکامپوزیت باشد که در شرایط عملی و آزمایشگاهی نسبت به مدل مولکولی ایجاد می‌شود.



شکل ۸- نتایج مدول یانگ تجربی و شبیه‌سازی

Carbon Nanotube Using Molecular Dynamics. Amirkabir Journal of Mechanical Engineering. 2021 Oct 23;53(8):4691-700.

[11] Nikzad MK, Ashenai Ghasemi F, Aghadavoudi F. Experimental analysis of the effect of the atomic radius of silica nanoparticles on the mechanical and thermal properties of poly lactic acid nanocomposites. Journal of Elastomers & Plastics. 2024 Oct;56(6):774-85.

[12] Nikfar N, Zare Y, & Rhee KY. Dependence of mechanical performances of polymer/carbon nanotubes nanocomposites on percolation threshold. Physica B: condensed matter. 2018; 533, 69-75.

[13] Alfonso I, Figueroa IA, Rodriguez-Iglesias V, Patino-Carachure C, Medina-Flores A, Bejar L, & Pérez L. Estimation of elastic moduli of particulate-reinforced composites using finite element and modified Halpin-Tsai models. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering. 2016; 38(4), 1317-1324.

[14] Abraham R, Thomas S.P, Kuryan S, Isac J, Varughese K.T & Thomas S. Mechanical properties of ceramic-polymer nanocomposites. Express Polym Lett. 2009; 3(3), 177-89.

[15] Nicolais L, Narkis M. Stress-strain behavior of styrene-acrylonitrile/glass bead composites in the glassy region. Polymer Engineering & Science. 1971 May;11(3):194-9.

[16] Hollingsworth SA, Dror RO. Molecular dynamics simulation for all. Neuron. 2018 Sep 19;99(6):1129-43.

[17] Khosrowshahi MS, Abdol MA, Mashhadimoslem H, Khakpour E, Emrooz HB, Sadeghzadeh S, Ghaemi A. The role of surface chemistry on CO2 adsorption in biomass-derived porous carbons by experimental results and molecular dynamics simulations. Scientific Reports. 2022 May 26;12(1):8917.

[18] Binder K, Horbach J, Kob W, Paul W, Varnik F. Molecular dynamics simulations. Journal of Physics: Condensed Matter. 2004 Jan 23;16(5):S429.

[19] Haile JM, Johnston I, Mallinckrodt AJ, McKay S. Molecular dynamics simulation: elementary methods. Computers in Physics. 1993 Nov 1;7(6):625-.

[20] Frenkel D, Smit B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. Elsevier. 2023 Jul 13.

[21] Shankar U, Sethi SK, Verma A. Forcefields and modeling of polymer coatings and nanocomposites. InForcefields for atomistic-scale simulations: materials and applications. 2022 Aug 20 (pp. 81-98). Singapore: Springer Nature Singapore.

[22] Farhadi B, Zabihi F, Tebyetekerwa M, Lugoloobi I, Omidi M, Liu A. Simulations of lead-free organic-inorganic perovskites under tensile/compressive loads and different force fields. Molecular Physics. 2023 Jan 2;121(1):e2150704.

[23] Arab B, Vaziri SA., Khodarahmi H. Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotube-Reinforced Polymer Nanocomposites. Aerospace Mechanics Journal. 2018;14(1):55-64.

[24] Ghajar MH, Mashhadi MM, Kashani HG. Dynamic mechanical analysis of bucky gel actuator electrolyte by molecular dynamics simulation. Computational Materials Science. 2018 Jun 15;149:379-85.

[25] Mayo SL, Olafson BD, & Goddard WA. DREIDING: a generic force field for molecular simulations. Journal of Physical chemistry. 1990; 94(26), 8897-8909.

[26] Nikzad MK, Aghadavoudi F, Ashenai Ghasemi F. Thermo-mechanical properties of silica-reinforced PLA nanocomposites using molecular dynamics: The effect of nanofiller radius. Journal of Polymer Research. 2024 Feb;31(2):44.

[۲۷] ذوالفقاری م، کلهری یگانه ج، حیدری ح، طهماسبی و، صفری م، بررسی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت منیزیمی تقویت شده به وسیله ی نانولوله بور نیتريد به روش دینامیک مولکولی. نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر. ۱۴۰۱، د. ۵۴، ش. ۲، ص ۴۵۱ - ۴۶۴

θ خمش زاویه پیوند

φ پیچش زاویه دووجهی

K_0 سختی پتانسیل زاویه پیوند

K_b سختی پتانسیل طول پیوند

θ_0 زاویه پیوند

r_0 طول پیوند تعادلی

C_i ضرایب چندگانه هارمونیک دووجهی

r_{ij} فاصله بین اتم های i و j

Φ انرژی بین اتمی بین دو ذره

$F(\rho_i)$ تابعی از پتانسیل محاطی برای اتم i

ε_{ij} اختلاف انرژی بین پیوند و جابجایی

σ_{ij} فاصله بین دو ذره با پتانسیل بین ذره ای صفر

r_{ij} فاصله بین مراکز دو ذره

V_i سرعت ذره i

F_{ij} نیروی بین اتم های i و j

α مؤلفه مختصات دکارتی

β مؤلفه مختصات دکارتی

z ضریب تصحیح کننده استفاده شده در رابطه پوکانسیکی

η_L ضریب مربوط به خاصیت طولی کامپوزیت

η_T ضریب مربوط به خاصیت عرضی کامپوزیت

ξ نسبت منطری

۷- مراجع

[1] Toozandehjani M, Kamarudin N, Dashtizadeh Z, Lim EY, Gomes A, Gomes C. Conventional and advanced composites in aerospace industry: Technologies revisited. Am. J. Aerosp. Eng. 2018 Feb;5(9):9-15.

[2] Yaragatti N, Patnaik A. A review on additive manufacturing of polymers composites. Materials Today: Proceedings. 2021 Jan 1;44:4150-7.

[3] Daneshpayeh S, Ghasemi FA, Ghasemi I. The effect of nanoparticles shape on the mechanical properties of poly lactic acid matrix. Journal of Elastomers & Plastics. 2021 Oct;53(6):684-97.

[4] Trybula ME, Barnett CB, Morbiducci U, Kober EM, Muratore M. Advances in molecular dynamics. Advances in Molecular Dynamics. 2021; 246.

[5] Shokrieh MM, Rafiee R. On the tensile behavior of an embedded carbon nanotube in polymer matrix with non-bonded interphase region. Composite Structures. 2010 Feb 1;92(3):647-52.

[6] Horta Muñoz S, Serna Moreno MD, González-Domínguez JM, Morales-Rodríguez PA, Vázquez E. Experimental, numerical, and analytical study on the effect of graphene oxide in the mechanical properties of a solvent-free reinforced epoxy resin. Polymers. 2019 Dec 16;11(12):2115.

[7] Manta A, Gresil M, Soutis C. Tensile and flexural behaviour of a graphene/epoxy composite: experiments and simulation. Journal of Physics: Materials. 2019 Dec 3;3(1):014006.

[8] Farazin A, Aghadavoudi F, Motififard M, Saber-Samandari S, Khandan A. Nanostructure, molecular dynamics simulation and mechanical performance of PCL membranes reinforced with antibacterial nanoparticles. Journal of Applied and Computational Mechanics. 2021 Oct 1;7(4):1907-15.

[9] Rahmanian S. Novel HDPE/ZnO nanocomposites for medical applications: preparation, impact strength and antibacterial activity characterization. Modares Mechanical Engineering. 2021 Feb 10;21(3):163-72.

[10] Zaminpayma E, Shamshirsaz M, Nayeibi P. Investigation on Mechanical Properties of Polyoxymethylene Reinforced by