



مدلسازی چندمقیاسی الکتروشیمی-مکانیکی پاسخ سریع عملگر کامپوزیت فلز پلیمریونی

محمدجواد محمودی^{۱*}، امیرحسین تقوی گنجی^۲^۱ دانشیار، دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی عمران، آب و محیط زیست تهران، ایران^۲ دانشجوی کارشناسی، دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی عمران، آب و محیط زیست تهران، ایران

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۶/۰۸؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۸/۱۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۱۰/۰۵

چکیده

نوارهای کامپوزیت فلز پلیمریونی (آی‌پی‌ام‌سی) عملگرهای بسیار نازکی به شکل یک کامپوزیت ساندویچی با یک پلیمر الکترواکتیو در وسط و دو الکتروود فلزی در طرفین آن هستند. در این مقاله، تحلیل چندمقیاسی الکتروشیمی مکانیکی پاسخ زمانی عملگری یک نوار کامپوزیت آی‌پی‌ام‌سی انجام می‌گیرد. ابتدا پاسخ الکتروشیمیایی حرکت اولیه آی‌پی‌ام‌سی ناشی از نیروی الکترواستاتیکی، نیروی ویسکوز حرکت توده یونی در حلال زمینه پلیمر و نیروی نفوذ ناشی از پتانسیل غلظت توسط یک مدل هیدرولیکی استخراج می‌شود. روش‌های حل در حوزه مکان شامل تحلیل عددی اجزای محدود بر اساس فرمول بندی گلرکین و در حوزه زمان، شامل روش انتگرال گیری اویلر است. سپس، معادله انتقال حلال نوشته شده و نرخ کرنش ویژه و نرخ تغییرات لنگر خمشی عملگر آی‌پی‌ام‌سی بدست می‌آید. با استخراج میزان آپیوشی در لایه مرزی کاتد و آند، پاسخ جابجایی انتهای تیر تعیین می‌شود. نتایج حاصل از مدل با مطالعات پیشین در دسترس مورد مقایسه و اعتبار سنجی قرار می‌گیرد. نتایج، تناسب بین پاسخ عملگر آی‌پی‌ام‌سی و تحریک الکتریکی را بطور معقول نشان می‌دهد و تایید می‌کند که مدل ارائه شده پیش‌بینی پاسخ سریع نوار آی‌پی‌ام‌سی را فراهم می‌کند.

کلمات کلیدی: کامپوزیت فلز پلیمریونی؛ پاسخ عملگری؛ مدل الکتروشیمی مکانیکی؛ روش اجزای محدود.

Multi-scale Electrochemical-mechanical Modeling of Fast Response of Ionic Polymer-Metal Composite Actuator

M.J. Mahmoudi^{1,*}, A.H. Taghavi-Ganji²¹Assoc. Prof., Civil, Water and Environmental Eng., Shahid Beheshti Univ., Tehran, Iran²BSc Student, Civil, Water and Environmental Eng., Shahid Beheshti Univ., Tehran, Iran

Abstract

Ionic Polymer-Metal Composite (IPMC) strips are very thin actuators in the form of a sandwich composite with an electroactive polymer in the core and two metal electrodes on its sides. In this paper, a multi-scale electrochemical-mechanical analysis of actuation time response of an IPMC composite strip is performed. First, the electrochemical response of IPMC primary motion stemming from electrostatic force, viscous force of ionic cluster motion in the polymer matrix solvent, and diffusive force caused by the concentration potential are obtained by a hydraulic model. The solution methods in the space domain include finite element numerical analysis based on Glerkin's formulation, and Euler's integration method in the time domain. Then, the solvent transport equation is written, and the rate of eigenstrain and bending moment of the IPMC actuator is obtained. By extracting the amount of cluster concentration in the boundary layer of cathode and anode, the displacement response of the end of the beam is determined. The results of the model are validated with previous available studies. The results show a reasonable fit between the response of the IPMC actuator and the electrical excitation, and confirm that the presented model provides the prediction of the fast response of IPMC strip.

Keywords: Ionic polymer-metal composite; Actuation response; Electrochemical-mechanical model; Finite element method.

۱- مقدمه

کامپوزیت‌های فلز پلیمریونی^۱ (آی‌پی‌ام‌سی) از دسته مواد پلیمری الکترواکتیو محسوب می‌شوند که در کاربردهای پزشکی، روباتیک، ماشین‌های میکروالکترونیک سبک، و وسایل سرگرمی استفاده شده‌اند [۱-۶]. مواد پلیمری الکترواکتیو خود در دسته ژل‌های پلیمری الکترواکتیو قرار می‌گیرند. نافیون به کار رفته در پلیمر آی‌پی‌ام‌سی به عنوان ژلی با ظرفیت حلال کم در نظر گرفته می‌شود [۲]. این ژل با نام ژل پلیمری یونی شناخته می‌شود و به همین دلیل، مبانی تحلیل آی‌پی‌ام‌سی کارهای انجام شده روی این ژل‌ها است [۳]. آی‌پی‌ام‌سی تنها مبدل پلیمری است که تحت تنش ناشی از خمش، در الکترودهای خود به عنوان یک پلیمر الکترواکتیو بار الکتریکی قابل اندازه‌گیری تولید می‌کند [۴]. بررسی محققین در زمینه سازوکار حسگرها و عملگرهایی که از جنس آی‌پی‌ام‌سی ساخته شده‌اند، نشان داده است که در این حالت، با یک عملگر که می‌تواند جابجایی‌ها و نیروهای بزرگتر تولید کند و یک حسگر که حساسیت بیشتری نسبت به اعمال تغییر شکل دارد، سر و کار دارند [۵]. بهبود در خصوصیات حسگری و عملگری مواد آی‌پی‌ام‌سی در گرو چگونگی اندازه‌گیری ویژگی‌های حسگری و عملگری این ماده و نیز وابسته به چگونگی مدل‌کردن این ماده است، چرا که چگونگی مدل‌سازی به فهمی از مکانیزم‌های حسگری و عملگری این ماده منجر می‌شود [۷-۹]. تعریف و تعیین خیز سازه آی‌پی‌ام‌سی مهم است، زیرا امکان تعیین مشخصات و درک رفتار مواد در شرایط مختلف را فراهم می‌کند. پاسخ عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی می‌تواند تحت تأثیر عواملی مانند ولتاژ تحریک، فرکانس، و خواص مواد تغییر کند [۱۰-۱۴]. با مطالعه پارامترهای خیز آی‌پی‌ام‌سی، محققان می‌توانند رابطه بین ولتاژ اعمال شده و دامنه انحراف حاصل و همچنین جهت و مرکز ارتعاش را تعیین کنند. این اطلاعات برای طراحی و بهینه‌سازی عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی برای کاربردهای مختلف، مانند عضله‌های مصنوعی در میکروساختارهای الهام گرفته از طبیعت بسیار ضروری است [۱۱-۱۳]. علاوه بر این، مدل‌های ریاضی را می‌توان برای پیش‌بینی تغییر شکل عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی توسعه داد که امکان شبیه‌سازی قبل از ساخت را فراهم می‌کند. به طور کلی، تعیین تغییر شکل آی‌پی‌ام‌سی بینش ارزشمندی در مورد رفتار

مکانیکی آن فراهم می‌کند و در جهت استفاده کارآمدتر و قابل اعتمادتر از آن است.

عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی به دلیل ویژگی‌های الکتروشیمیایی-مکانیکی تغییر شکل آنها مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. مدل‌های مختلفی برای درک و پیش‌بینی رفتار عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی پیشنهاد شده است. لیو و همکاران [۱۰] برنامه‌ای برای تجزیه و تحلیل همبستگی تصویر دیجیتال^۲ برای مطالعه پاسخ نوارهای یک سر گیردار آی‌پی‌ام‌سی تحت تحریک‌های جریان متناوب ایجاد کردند. همچنین، تراور و همکاران [۱۵] دینامیک و کنترل یک ربات شناگر یوکاریوتی تاژک مصنوعی که قسمت‌هایی از آن از آی‌پی‌ام‌سی ساخته شده، را بررسی کرده و یک مدل دینامیکی بر اساس تجزیه و تحلیل پاسخ فرکانسی ارائه کردند. سامپور و همکاران [۱۴] یک مدل ویسکوالاستیک دینامیکی غیرخطی برای عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی بر اساس معادله ساختاری ویسکوالاستیک و رویکرد متغیر مبتنی بر انرژی ارائه دادند. راتو و همکاران [۱۶] تأثیر فصل مشترک الکترو/بستر را بر عملکرد عملگرهای آی‌پی‌ام‌سی مطالعه کردند، و یک استراتژی طراحی مینیمالیستی را بر اساس یک ریخت‌شناسی فصل مشترک دنداندار ماکروسکوپی پیشنهاد کردند. گوپتا و مترجی [۱۷] نیز یک مدل دینامیکی الکترومکانیکی را برای یک فن چند تیغه بیومیمتیک بر اساس پره موج‌دار فعال شده توسط ماده آی‌پی‌ام‌سی پیشنهاد کردند.

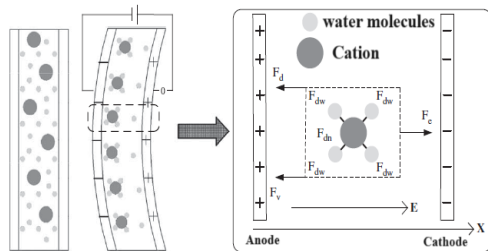
در مدل‌های هیدرولیکی ارائه شده برای آی‌پی‌ام‌سی، مهاجرت آب بین توده‌های یونی در پلیمر علت تورم ماده و در نتیجه خمش آن است. اعمال ولتاژ باعث مهاجرت اجزای یونی می‌شود. اولین پدیده هیدرولیکی، حرکت مولکول‌های آب به همراه یون‌هایی است که سخت در کنار خود گرفته‌اند (اثر الکترواسمزی). اثر هیدرولیکی دیگر، اثرات پتانسیل غلظتی است که ناشی از مهاجرت اولیه یون‌ها است [۴]. در این حوزه، مرجع [۱۸] مدلی را معرفی کرد که گرادیان فشار آب را با میدان الکتریکی کلی به عنوان نیروهای الکتروترمودینامیکی به هم مربوط می‌گرداند. این نیروها تولید شاری از یون و آب می‌کنند. در این مدل‌سازی، معادلات جفت‌شده بر پایه روابط برگشت‌پذیر ترمودینامیکی برای تبیین رفتار آی‌پی‌ام‌سی ارائه شد. این مدل توصیفی از مبانی و اصول مبدلی و عملگری

² Digital Image Correlation¹ Ionic polymer-metal composite

قبولی را جهت پیش‌بینی تغییر شکل سریع نوار آی‌پی‌ام‌سی در اختیار قرار می‌دهد.

۲- مدلسازی

در اینجا، مطابق شکل ۱، آی‌پی‌ام‌سی یک نوار فرض می‌شود که خمش بواسطه اعمال ولتاژ کوچک به علت توزیع مجدد آب درون نوار است. این توزیع مجدد به دو دلیل انجام می‌شود؛ یک پدیده الکترواسمزی یون‌های هیدراته به سمت کاتد و همچنین دلیل دیگر خود نفوذی مولکول‌های آب به سمت آند است. این دو فرآیند را جداگانه در نظر می‌گیرند، به این صورت که فرآیند سریع الکترواسمزی اولیه را حرکت اولیه، و حرکت کند پس از آن را فرآیند کند خودنفوذی یا حرکت رهاشی می‌نامند [۲۱]؛ بنابراین توزیع کرنش ویژه (تورم و چروک‌شدگی) در ضخامت نوار به علت اختلاف حجمی میزان آب در ضخامت به وجود می‌آید.



شکل ۱- نیروهای وارد بر توده‌های یونی پس از اعمال پتانسیل الکتریکی به نوار آی‌پی‌ام‌سی [۲۱]

در این نوشتار، تنها حرکت سریع اولیه به عنوان پاسخ اولیه آی‌پی‌ام‌سی به اعمال پتانسیل الکتریکی در مدلی یک بعدی به دلیل یکسان بودن پاسخ الکتروشیمیایی در اعمال ولتاژ در طول نوار بحث می‌شود. برای استخراج معادلات حاکم و توضیح پاسخ مواد آی‌پی‌ام‌سی ابتدا فرض می‌شود، کاتیون‌های متحرک متصل به مولکول‌های آب، یک ذره واحد به نام توده یونی را تشکیل می‌دهند؛ همچنین فرض می‌شود ساختار بلند زنجیر، تحت تاثیر میدان الکتریکی خارجی ثابت باقی می‌ماند و مقدار آبپوشی نافون نیز بدون تغییر باقی می‌ماند. بخشی از کاتیون‌های داخل نافون هیدراته تحت میدان الکتریکی

موجود در ذات آی‌پی‌ام‌سی با تعریف آن در رژیم خطی و شرایطی استاتیکی بود که بر اساس روابط آنسجر پایه گذاری شده بود. آساکا و اگورو [۱۹] مدلی را ارائه کردند که در آن جریان آب ایجاد شده توسط گرادیان فشار و جریان الکترواسمزی باعث ایجاد تنش و تورم عملگر می‌شود؛ همچنین، نعمت ناصر و لی [۶] مدلی را ارائه کردند که میدان الکتریکی و تغییر شکل الاستیک به همراه انتقال یون و آب، عامل خمش در آی‌پی‌ام‌سی بود. کیم و تاداگورا [۲۰] مدلی برای رفتار عملگری این ماده بر اساس نظریه‌های شیمی-فیزیک ارائه کرد. علاوه بر این مدل‌های هیدرولیکی، نعمت ناصر مدلی هیبریدی را برای این ماده بررسی کرد که شامل اثرات الکترواستاتیکی، اسمزی و الاستیک بود، و نتایج مدل را با نتایج حاصل از کار آزمایشگاهی خودش مورد مقایسه قرار داد [۹].

در این مقاله، تحلیل چندمقیاسی الکتروشیمی مکانیکی پاسخ زمانی یک نوار کامپوزیت آی‌پی‌ام‌سی صورت می‌گیرد. این مدل شامل نیروهای ویسکوز، الکتریکی و نفوذ است که منجر به معادله‌ای برای تعیین توزیع غلظت یون و آب پس از اعمال ولتاژ الکتریکی می‌شود. ابتدا نیروها شناخته شده و تمامی آن‌ها بر حسب بار الکتریکی فرمول‌بندی می‌شوند، تا معادله‌ی کوپل الکترواستاتیکی، شیمیایی و مکانیکی بدست آید، و از این معادله خواص عملگری ماده شناسایی می‌شود. از این رو، توزیع غلظت بر حسب میزان اختلاف پتانسیل بین الکترودها نوشته می‌شود که منجر به کرنش ویژه این ماده می‌شود. یک مدل مدار RC به منظور واردسازی اختلاف پتانسیل الکترودها به معادله معرفی خواهد شد. در ادامه، معادله زمان‌مند توسط روش اجزاء محدود با المان‌های خطی و به صورت یک بعدی گسسته می‌شود. تحلیل براساس فرمول-بندی گلرکین انجام می‌شود و انتگرال‌های زمانی معادله توسط روش اویلر حل می‌شود. سپس، با استفاده از روابط تحلیلی بین نرخ کرنش ویژه و لنگر خمشی بر حسب زمان، پاسخ سریع نوار یک سرگردار آی‌پی‌ام‌سی بدست می‌آید. نتایج با تحقیقات پیشین در دسترس مورد راستی‌آزمایی قرار می‌گیرد. این مقاله با ابزار تدوین منسجم و بهره‌گیری مناسب از مدل‌های متناظر مطالعات پیشین در مقیاس‌های مختلف و حل عددی معادلات دیفرانسیل مربوطه در حوزه‌های مکان و زمان، رویکرد قابل

که در آن، N_a ثابت آووگادرو و e بار الکتریکی یک الکترون است. κ_e گذردهی الکتریکی معادل نافینون هیدراته است. E_x^a و E_x^b میدان های داخلی ایجاد شده به سمت کاتد و آند در یک مکان و زمان خاص هستند که مقدار آنها بسته به میزان کاتیون و آنیون آن نقطه طبق قانون گوس بصورت رابطه (۴) است.

$$\oint_S E_x^a \cdot d\vec{S}_x = \frac{q_1(x, t)}{\kappa_e} = \frac{N_a \cdot e}{\kappa_e} \cdot S_x \cdot \left(\int_0^x (C_{mov}(\lambda, t) - C_{mov,0}) d\lambda \right) \quad (4)$$

$$\oint_S E_x^b \cdot d\vec{S}_x = \frac{q_2(x, t)}{\kappa_e} = \frac{N_a \cdot e}{\kappa_e} \cdot S_x \cdot \left(\int_0^d (C_{mov}(\lambda, t) - C_{mov,0}) d\lambda - \int_0^x (C_{mov}(\lambda, t) - C_{mov,0}) d\lambda \right)$$

S_x مساحت سطح مقطع ماده در جهت x (عمود بر سطح الکترون) است. q_1 بار الکتریکی ایجاد شده در حجم ماده آبی پی امسی بر اثر حرکت کاتیون ها از صفحه با معادله $x=0$ تا صفحه ای با موقعیت x است و q_2 همین پارامتر از صفحه ای با موقعیت x تا صفحه با $x=d$ است و هر دو صفحات مساحتی برابر S_x دارند. همانطور که در شکل ۲ مشخص شده است، مبدا محور x روی آند گذاشته شده است.

F_{vis} ، نیروی ویسکوزی است که وقتی توده یونی در سیال ویسکوز داخل زمینه پلیمری حرکت می کند، به وجود می آید. در اینجا حرکت توده یونی با رینولدز بسیار پایین ($Re \ll 1$) فرض شده است. بنابراین، قانون استوکس برای نیروی ویسکوز روی ذرات به صورت معادله (۵) بیان می شود:

$$F_{vis} = \eta v(x, t) \quad (5)$$

که در آن η ویسکوزیته برای نافینون هیدراته و $v(x, t)$ سرعت یون ها است.

تحت تاثیر میدان الکتریکی خارجی توده های یونی حرکت می کنند و تعادل غلظت را بر هم می زنند و باعث ایجاد اختلاف

خارجی کافی، از موقعیت تعادل الکترواستاتیکی خود خارج می شوند تا بر نیروی پیوندی آنیون های SO_3^- غلبه کنند و سامانه را مجدداً به تعادل الکتریکی برسانند. $C_{ion}(x, t)$ به عنوان غلظت تعادلی کاتیون در نافینون هیدراته و پس از فرآیند ساخت معرفی می شود. برای آن دسته از کاتیون هایی که نمی توانند از پیوند SO_3^- رها شوند، غلظت با $C_{fix}(x, t)$ نمایش داده می شود و به عنوان فرض ساده کننده، در ضخامت و زمان، ثابت و به صورت C_{fix} در نظر گرفته می شود [۷]؛ بنابراین $C_{mov}(x, t)$ به عنوان غلظت کاتیون های متحرک در موقعیت x و زمان t است و با معادله (۱) بیان می شود:

$$C_{mov}(x, t) = C_{ion}(x, t) - C_{fix}(x, t) \quad (1)$$

و $C_{mov}(x, 0) = C_{mov,0}$ به عنوان غلظت اولیه این کاتیون های متحرک شناخته می شود. به هر توده یونی متحرک سه نوع نیرو وارد می شود که شامل نیروی الکترواستاتیکی، F_{es} ، نیروی ویسکوز، F_{vis} ، و نیروی نفوذ، F_{dif} است [۲۲]. با توجه به قانون دوم نیوتن، نیروهای حاصل به صورت رابطه (۲) در تعادل دینامیکی هستند:

$$F_{es}(x, t) - F_{vis}(x, t) - F_{dif}(x, t) = m_p \frac{dv(x, t)}{dt} \quad (2)$$

که m_p و $v(x, t)$ بترتیب جرم و سرعت توده های یونی هستند. میدان الکتریکی شامل دو توزیع است، یکی ولتاژ خارجی القا شده $E_{ext}(x, t) = V(t)/d$ که ولتاژ اعمال شده است و d ضخامت نافینون هیدراته (فاصله بین دو الکترون) است. توزیع دیگر میدان الکتریکی به وجود آمده، $E_{ind}(x, t)$ است که منتج از حرکت کاتیون ها در نافینون هیدراته است و با توجه به قانون گاوس به صورت رابطه (۳) محاسبه می شود [۱۹]:

$$E_{ind}(x, t) = E_x^a - E_x^b = \frac{2 \cdot N_a \cdot e}{\kappa_e} \left[\int_0^x (C_{mov}(\lambda, t) - C_{mov,0}) d\lambda \right] \quad (3)$$

$$\left\{ \frac{V(t)}{d} + \frac{2N_a e}{\kappa_e} \left[\int_0^x (C_{mov}(\lambda, t) - C_{mov,0}) d\lambda \right] - \eta v(x, t) - \frac{KT(1+n)}{C_{mov}(x, t)} \cdot \frac{\partial C_{mov}(x, t)}{\partial x} \right\} = 0 \quad (8)$$

برای حل معادله (۸)، $C_{mov}(x, t)$ و $v(x, t)$ در رابطه (۸) به صورت تابعی از بار الکتریکی $q(x, t)$ نوشته می‌شود:

$$C_{mov}(x, t) = \frac{1}{N_a \cdot e \cdot S_x} \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \quad (9)$$

اگر جریان کاتیون به صورت $J(x, t) = C_{mov}(x, t)v(x, t)$ در نظر گرفته شود، با توجه به قانون پایستگی جرم معادله (۱۰) به دست می‌آید:

$$\frac{\partial C_{mov}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

بنابراین:

$$v(x, t) = - \frac{\partial q(x, t)}{\partial t} \cdot \left[\frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \right]^{-1} \quad (11)$$

و با جایگذاری در معادله (۸) بدست می‌آید:

$$\left\{ \eta \frac{\partial q(x, t)}{\partial t} - KT \left(\frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2} \right) (1+n) - e \left\{ \frac{V(t)}{d} + \frac{2}{\kappa_e \cdot S_x} [q(x, t) - q_0(x)] \right\} \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \right\} = 0 \quad (12)$$

با توجه به فیزیک بحث شده شرایط اولیه و مرزی معادله فوق بصورت زیر هستند:

$$\begin{aligned} q(x, 0) &= N_a e S_x C_0 x \\ q(x, 0) &= 0 \\ q(d, t) &= N_a e S_x C_0 d \end{aligned} \quad (13)$$

غلظت بین نقاط مختلف ماده می‌شوند. رابطه (۶) برای جمله نفوذ معادله حاکم بر روی یک توده یونی حاصل می‌شود [۲۳]:

$$\begin{aligned} F_{dif} &= KT \left(\frac{\partial \ln(C_{mov}(x, t))}{\partial x} + n \cdot \frac{\partial \ln(w_{mov}(x, t))}{\partial x} \right) \\ &= KT \left(\frac{1}{C_{mov}(x, t)} \cdot \frac{\partial C_{mov}(x, t)}{\partial x} + n \cdot \frac{1}{w_{mov}(x, t)} \cdot \frac{\partial w_{mov}(x, t)}{\partial x} \right) \\ &= KT(1+n) \frac{1}{C_{mov}(x, t)} \cdot \frac{\partial C_{mov}(x, t)}{\partial x} \end{aligned} \quad (6)$$

که در آن K ثابت بولتزمن است. تعداد مولکول‌های آب متصل به کاتیون، با n نمایش داده می‌شود. عدد n برای کاتیون‌های مختلف توسط هندبوک‌های شیمی مشخص شده است، پس تعداد مولکول‌های آب با رابطه $w_{mov}(x, t) = n C_{mov}(x, t)$ به غلظت یون‌ها مربوط می‌شود. از معادلات (۲)، (۳)، (۵) و (۶) و لحاظ کردن میدان پتانسیل خارجی $(V(t)/d)$ معادله (۷) حاکم بر مدل به دست می‌آید:

$$\left\{ e \left\{ \frac{V(t)}{d} + \frac{2N_a e}{\kappa_e} \left[\int_0^x (C_{mov}(\lambda, t) - C_{mov,0}) d\lambda \right] - \eta v(x, t) - \frac{KT(1+n)}{C_{mov}(x, t)} \cdot \frac{\partial C_{mov}(x, t)}{\partial x} \right\} \right\} = m_p \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} \quad (7)$$

در مرجع [۲۱] جمله اینرسی معادله از مرتبه‌ای کوچکتر از جملات نیرویی در نظر گرفته شده و از آن صرف نظر شده است. با صرف نظر از اثر اینرسی، معادله قبل به صورت معادله (۸) در می‌آید:

$$\eta \frac{\partial q(x, t)}{\partial t} - KT(1 + n) \frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2} - \frac{2e}{\kappa_e \cdot S_x} \left\{ \int_0^t i(\tau) d\tau + [q(x, t) - q_0(x)] \right\} \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (16)$$

برای حل این معادله از روش اجزای محدود با فرمول بندی گلرکین استفاده می شود، و معادله (۱۶) به فرم اجزای محدود در می آید. المان ها لاگرانژی خطی و یک بعدی هستند و از تابع شکل N به فرم معادله (۱۷) برای نمایش تغییرات q در هر المان استفاده می شود:

$$q = \sum_{i=1}^n N_i q_i = [N]^T \{q_e\} = \left[1 - \frac{x}{h} \quad \frac{x}{h} \right] \{q_e\} \quad (17)$$

با ترکیب معادلات (۱۶) و (۱۷) و انتگرال گیری از آن روی q نتیجه می شود:

$$\eta \int_{\Omega} [N][N]^T dx \frac{\partial \{q\}}{\partial t} + KT(n + 1) \int_{\Omega} \frac{\partial [N]}{\partial x} \frac{\partial [N]^T}{\partial x} dx \{q\} + \frac{2e}{\kappa_e S_x} \int_{\Omega} [N] \frac{\partial [N]^T}{\partial x} \left\{ \int_0^t i(\tau) d\tau + q - q_0 \right\} dx \{q\} = 0 \quad (18)$$

و از این معادله، رابطه ماتریسی (۱۹) به دست می آید:

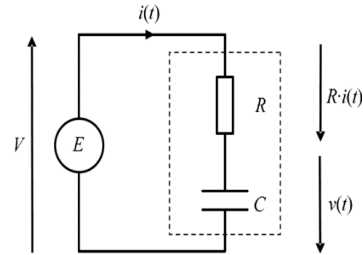
$$[A]\{\dot{q}\} + [B]\{q\} = 0 \quad (19)$$

که:

$$[A] = \eta \int_{\Omega} [N][N]^T dx \quad (20)$$

که در آن C_0 غلظت در زمان و مکان اولیه می باشد.

برای حل معادله (۱۲) نیاز است تغییرات ولتاژ با زمان دانسته شود. مدل ساده RC فشرده برای نوار آی پی ام سی با پلیمر نافیبون و الکترودهای پلاتینی از نوع عملگری در شکل ۲ نشان داده شده است [۷].



شکل ۲- مدل RC برای آی پی ام سی [۲۳]

با استفاده از قانون ولتاژ کیرشهف برای ولتاژ ورودی پله ای

V بدست می آید:

$$i(t) = \frac{V}{R} e^{-\frac{t}{CR}} \quad (14)$$

که در آن $i(t)$ جریان عبوری از مدار، R و C بترتیب ظرفیت خازنی و مقاومت الکتریکی معادل آی پی ام سی هستند. طبق داده های آزمایشگاهی مقادیر R و C به ترتیب $4/19 \Omega$ و $3360 \mu F$ هستند [۷]. این مدل کمک می کند تا در معادله (۱۲) جمله ولتاژ با جریان تعویض شود تا تنها مجهول معادله (۱۲) بار الکتریکی باشد. به عنوان مثال، برای ولتاژ پله ای با مقدار ۱ ولت که هدف این مقاله نیز استخراج پاسخ این ماده به ازای یک ولت پتانسیل است، جریان الکتریکی به صورت معادله (۱۵) به دست می آید:

$$i(t) = 0.0515 e^{-15.23t} \quad (15)$$

۳- روش اجزاء محدود

ابتدا برای استفاده از معادله (۱۵)، معادله (۱۲) به صورت معادله (۱۶) بازنویسی می شود:

۴- انتقال حلال و پاسخ عملگر

فرم اصلی معادلات انتقال حلال در آی پی ام سی طی معادله پیوستگی (۲۳) بیان می شود:

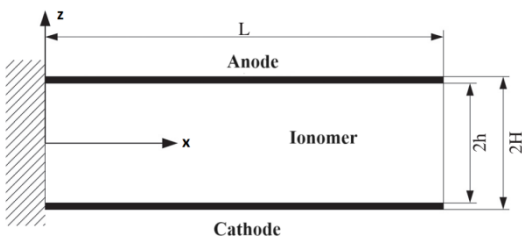
$$\frac{\dot{w}}{w+1} + w \nabla \cdot v = 0 \quad (23)$$

برای حل تقریبی معادله (۲۳) ابتدا گشتاور خمشی ایجاد شده بر اثر کرنش حجمی حاصل از انتقال حلال معرفی می شود، سپس با توجه به ملزومات ایجاد شده برای محاسبه گشتاور خمشی به معرفی روش تقریبی حل معادله (۲۳) پرداخته می شود. نواحی انتگرال گیری در شکل ۳ مشخص شده اند.

با توده های کاملاً هیدراته نرخ کرنش حجمی $\dot{\epsilon}_v$ ، به نرخ غلظت آب جذب شده مرتبط است [۹]:

$$\dot{\epsilon}_v = \frac{\dot{w}}{1+w} = \frac{\partial \ln(1+w)}{\partial t} \quad (24)$$

رابطه (۲۴) را در روند مدل سازی چندمقیاسی حاضر به این دلیل می توان نوشت که آب و زمینه پلیمری، غیرقابل تراکم فرض می شوند، یعنی هر تغییر حجم کلی حاصل از تغییر حجم توده ها (آب جذب شده) است. اگر z فاصله نقاط سطح مقطع از وسط نوار باشد، نرخ کرنش ویژه طولی (در جهت ضخامت نوار آی پی ام سی) با ϵ^* ، و به صورت معادله (۲۵) نمایش داده می شود [۹]:



شکل ۳- طرح شماتیک آی پی ام سی

$$\epsilon^* = \frac{1}{3} \dot{\epsilon}_v(z, t) = \frac{1}{3} \frac{\dot{w}(z, t)}{1+w(z, t)} \quad (25)$$

$$[B] = KT \int_{\Omega} \frac{\partial [N]}{\partial x} \frac{\partial [N]^T}{\partial x} dx + \frac{2e}{\kappa_e S_x} \int_{\Omega} [N] \frac{\partial [N]^T}{\partial x} \left\{ \int_0^t i(\tau) d\tau + q - q_0 \right\} dx = 0$$

که Ω حوزه المان است.

معادله (۱۹) برای حل نیاز به انتگرال گیری دارد. روش اوپلر یک روش عددی برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی مرتبه یک با شرایط اولیه معلوم است. شرایط اولیه این معادله در رابطه (۱۳) آورده شده است. روش اوپلر از بسط تیلور مرتبه یک در حوزه زمان برای جبری کردن معادلات به صورت صریح استفاده می کند. در روش انتگرال گیری اوپلر، فواصل زمانی به اندازه کافی کوچک متضمن پایداری روش است. اگر i نمایانگر شماره فواصل زمانی باشد، فرمول بندی اوپلر مسئله حاضر به همراه شرط پایداری به صورت معادله (۲۱) در می آید:

$$\{q\}_{i+1} = \{q\}_i - \Delta t [A]^{-1} [B] \{q\}_i \quad (21)$$

$$|1 + \Delta t \times C_{ki}| \leq 1, C = [A]^{-1} [B]$$

فرض بر این است که ماده طی دو مرحله مجزا تغییر شکل می دهد، به این صورت که ابتدا یک حرکت سریع به واسطه انتقال یون و آب با مکانیزمی که در بخش قبل توضیح داده شد، صورت می گیرد. طی این انتقال که برای یون نوشته شد، آب نیز به واسطه قطبی بودن و قرار گرفتن در توده های یونی با یون ها حرکت می کند و برای پی بردن به غلظت آن در نقاط مختلف ضخامت پس از انجام حرکت سریع، فرمول (۲۲) بررسی می شود:

$$w(x, t) = w_1 + w_2 + nC(x, t) \quad (22)$$

که در آن w غلظت محلول در نقاط مختلف ضخامت، w_1 غلظت آب هیدراته با SO_3^- بر حسب مول بر متر مکعب و w_2 غلظت آب آزاد در شبکه پلیمر است. معادله (۲۲) این امکان را فراهم می آورد تا در این مرحله از مدل سازی چندمقیاسی، از مقیاس یون ها به مقیاس محیط پیوسته انتقال حلال منتقل شویم.

که در آن $\beta = L_C/L_A$ است.

کرنش خمشی در این نوار، کوچک است و لذا تغییر در میزان آبیوشی نیز در توده های یونی کوچک است؛ بنابراین با تقریب زدن سمت راست معادله (۲۹) به وسیله سری تیلور حول w_0 و حذف جملات مرتبه بالاتر معادله (۳۰) حاصل می شود:

$$M^e = -\frac{Y_b b h L_A}{6(1+w_0)} [(w_A(t) - \beta w_C(t)) - (1-\beta)w_0] \quad (30)$$

برای بدست آوردن مقدار میزان غلظت آبیوشی در لایه مرزی آند $w_A(t)$ و لایه مرزی کاتد $w_C(t)$ از مراجع در دسترس از جمله [۴ و ۹] بترتیب در بخش ۴-۱ و ۴-۲ استفاده می شود.

۴-۱- آبیوشی در لایه مرزی آند

فشار اسمزی در توده های واقع در لایه مرزی آند به صورت زیر بیان می شود [۲۴]:

$$\Pi_A(t) = \frac{\phi Q_B^- K_0}{w_A(t)} \left(1 + \frac{C^+}{C^-} \right) \quad (31)$$

که $K_0 = RT/F$ و $Q_B^- = \rho F / EW_{Na}$ که ρ چگالی غشای خشک است، F ثابت فارادی، R ثابت گاز، EW_{Na} وزن معادل یون سدیم است و ϕ نیز ضریب اسمزی است که برای محلول رقیق ایده آل برابر ۱ می شود [۸].

همچنان که کاتیون ها از لایه مرزی آند خالی می شوند، نیروهای برهم کنشی که بین آنیون های ثابت تولید می شود، یک فشار افزوده نیز که با p_{AA} نمایش می دهند، ایجاد می شود، در حالی که در همان زمان نیروی برهم کنش دوقطبی- دوقطبی، p_{ADD} کاهش می یابد. این دو اثر کوپل می شوند و بنابراین توزیع کاتیون داخل توده یونی بستگی به غلظت آن دارد. در اینجا، برای راحتی تحلیل مورد نیاز، دو اثر جدا از هم در نظر گرفته می شوند.

p_{AA} به عنوان تابعی از زمان، با در نظر گرفتن سطح اولیه یک توده کروی با توزیع یکنواخت بار الکتریکی سطحی q ، که در ادامه مشخص می شود، محاسبه نیروهای برهم کنش

که تابعی از فاصله در جهت ضخامت z و زمان t است. ε^* را کرنش ویژه می نامند. نرخ گشتاور خمشی با فرض نبود نیروی مکانیکی خارجی و تنها برای یونومر (بدون در نظر گرفتن الکترودها) به صورت معادله (۲۶) تعریف می شود:

$$\dot{M}^e(t) = \int_{-h/2}^{h/2} \sigma^* z dz = \int_{-h/2}^{h/2} Y_b \varepsilon^* z dz \quad (26)$$

که Y_b مدول یانگ موثر پلیمر هیدراته (یونومر) است. حال با جایگذاری معادله (۲۵) در معادله (۲۶)، از مقیاس مصالح پیوسته به مقیاس بارگذاری داخل مقطع منتقل شده، و رابطه (۲۷) حاصل می شود:

$$\dot{M}^e(t) = \int_{-h/2}^{h/2} Y_b \frac{1}{3} \frac{\dot{w}(z,t)}{1+w(z,t)} z dz \quad (27)$$

با گرفتن انتگرال سمت راست معادله (۲۷) و در نظر گرفتن ضخامت لایه مرزی آند (ABL) و لایه مرزی کاتد (CBL)، گشتاور خمشی به صورت معادله (۲۸) نوشته می شود:

$$\dot{M}^e(t) = -\frac{Y_b h}{6} \left[\frac{\dot{w}_A(z,t)}{1+w_A(z,t)} L_A - \frac{\dot{w}_C(z,t)}{1+w_C(z,t)} L_C \right] \quad (28)$$

که در آن w_A و w_C نشان دهنده میزان آبیوشی در ABL و CBL هستند و L_A و L_C طول لایه مرزی آند و کاتد است. با انتگرال گیری از دو طرف معادله (۲۸) در زمان و در نظر گرفتن شرط اولیه $M^e(0)=0$ زمانی که $w_A(z,0)=w_C(z,0)=w_0$ است w_0 آبیوشی اولیه قبل از ایجاد پتانسیل الکتریکی در الکترودها است، گشتاور خمشی در مقطع نوار آبی پی ام سی با ضخامت b به صورت معادله (۲۹) بدست می آید:

$$M^e = -\frac{Y_b b h L_A}{6} \{ \ln[1+w_A(z,t)] - \beta \ln[1+w_C(z,t)] + (1-\beta)(\ln(1+w_0)) \} \quad (29)$$

بر اساس غلظت یون در توده‌های یونی لایه مرزی آند، ثابت دی‌الکتریک موثر κ_A به حالت زیر درمی‌آید، برای m_{wA} -
 $CN \geq 0$ رابطه زیر نوشته می‌شود [۴]:

$$\begin{aligned} \kappa_A &= \frac{7 + 6f_A}{7 - 6f_A} 6\kappa_0, & f_A &= \frac{m_{wA} - CN}{m_{wA}} \\ m_{wA}(t) &= \frac{EW_{ion}w_A(t)}{18 \left[\frac{C^+}{C^-} \right] \rho_B} \\ \pm [\alpha(t)]^2 & \\ &= \begin{cases} a_1 w + a_2 & m_w \leq CN \\ \left(\frac{7 + 6f}{7 - 6f} \right) (a_1 w + a_2) & m_w > CN \end{cases} \end{aligned} \quad (۳۶)$$

که CN عدد کنوردیناسیون و a_1 و a_2 ضرایب تجربی هستند. $m_{wA}(t)$ نسبت تمام مول آب بر مول یون است؛ همچنین $f_A(t)$ میزان مولکول‌های آزاد آب داخل یک توده و در لایه مرزی آند را بیان می‌کند. اگر $m_{wA} - CN < 0$ باشد، $\kappa_A = 6\kappa_0$ را قرار می‌دهند. در مقابل فشار $p_A(t)$ تنش الاستیک، $\sigma_r(a_0, t)$ در زمینه پلیمری مقاومت می‌کند و زمانی که تعادل برقرار شود این دو به توازن با هم می‌رسند. سفتی $K(t)$ و فشار $p_0(t)$ برای پلیمر بدون روکش و در یک آبیوشی به مقدار $p_{cluster}(t)$ توسط معادلات زیر در آی‌پی‌ام‌سی با تخلخل تقریبی n_0 نوشته می‌شود [۴]:

$$\begin{aligned} \sigma_r(a_0, t) &= -p_0(t) \\ &\quad + K(t) [w_A(t) / w_0]^{-4/3} \\ p_0 &= K \left(\frac{w}{w_i} \right)^{-4/3} + p_c, K \\ &= p_c \frac{1 + w}{w_i I_n - \left(\frac{w}{w_i} \right)^{4/3}} \\ p_c &= \frac{2\phi Q_B^- K_0}{w} + \frac{\pm [\alpha_A(t)]^2 (Q_B^-)^2}{3\kappa_e w^2}, w_i \\ &= \frac{n_0}{1 - n_0} \\ I_n &= \frac{1 + 2An_0}{n_0} - \frac{1 + 2A}{(1 + A)^{3/2}}, A = \frac{w}{w_i} - 1 \end{aligned} \quad (۳۷)$$

پس فشار موثر بر آب در لایه مرزی آند از معادله زیر نتیجه می‌شود:

$$t_A(t) = -\sigma_r(a_0, t) + p_{cluster}(t) \quad (۳۸)$$

الکترواستاتیکی، و سپس ضرب کردن نتیجه در C^+/C^- به عنوان تاثیر توزیع مجدد یون کاتیون بدست می‌آید [۴]:

$$\begin{aligned} p_{AA}(t) &= \frac{q^2}{2\kappa_A(t)} \left(1 - \frac{C^+}{C^-} \right) \\ &= \frac{1}{18\kappa_A(t)} Q_B^{-2} \frac{a_A^2}{[w_A(t)]^2} \left(1 - \frac{C^+}{C^-} \right) \\ &\approx \frac{1}{18\kappa_A(t)} Q_B^{-2} \frac{R_0^2}{[w_A(t)]^{4/3}} \left(1 - \frac{C^+}{C^-} \right) \end{aligned} \quad (۳۲)$$

که $\kappa_A = \kappa_A(t)$ ثابت دی‌الکتریک موثر توده است، a_A شعاع توده در آب جذب شده، $w_A = w_A(t)$ است، R_0 شعاع اولیه (خشک) توده است و زیرنویس A اشاره به لایه مرزی آند دارد. از آنجا که آنیون‌ها تنها ساکنین داخل توده‌ها هستند، چگالی بار سطحی، q ، به صورت زیر حساب می‌شود [۴]:

$$\begin{aligned} q &= Q_B^- \frac{4\pi}{3} (R_0^3 - a_0^3) \frac{1}{4\pi a^2} \\ &= Q_B^- \frac{4\pi}{3} (R^3 - a^3) \frac{1}{4\pi a^2} \\ &= \frac{Q_B^- a_0}{3w_0 \lambda_\theta^2(a_0)} \\ &\approx \frac{Q_B^- R_0}{3 w^{2/3}} \end{aligned} \quad (۳۳)$$

که Q_B^- چگالی بار آنیون (در واحد C/cm^2) در غشا خشک است. فشار p_{ADD} متناظر با استفاده از غلظت کاتیون در هر توده بصورت زیر است [۴]:

$$p_{ADD}(t) = \frac{1}{3\kappa_A(t)} (Q_B^-)^2 \frac{\pm [\alpha_A(t)]^2 C^+}{[w_A(t)] C^-} \quad (۳۴)$$

بنابراین فشار کل در یک توده یونی نمونه در لایه مرزی آند به صورت زیر است:

$$p_{cluster} = \Pi_A(M^+, t) + p_{AA}(t) + p_{AAD}(t) \quad (۳۵)$$

$$\bar{\Pi}_C(x, t) = \frac{v_C(z, t)\phi Q_B^- K_0}{w_C(z, t)} \quad (42)$$

$$\approx \frac{\phi Q_B^- K_0}{w_C(t)} \left(1 + \frac{\bar{C}^+}{\bar{C}^-}\right)$$

که $w_C(x, t)$ جز حجمی آب در لایه مرزی کاتد است و علامت بار بیانگر متوسط توزیع یون بدست آمده از معادله نرنست-پلانک است [۴].

در لایه مرزی کاتد دو گونه از نیروی برهم کنش الکترواستاتیکی وجود دارد. یکی نیروی دافع بین دوقطبی های صوری آنیون - کاتیون که در توده های یونی وجود دارد، و دیگری بر اثر وجود کاتیون اضافی در توده ها است که باعث فعل و انفعال داخلی با دوقطبی های مجازی موجود می شود. تنش های اضافه شده بواسطه همین فرآیندها، میل به ایجاد انبساط یا انقباض در توده ها را، بسته به توزیع کاتیون ها، دارد. مجددا در اینجا نیز این اثرات جداگانه مدل می شوند، هرچند، در واقع با هم کوپل هستند. مانند لایه مرزی آند فشار ناشی از دوقطبی های صوری آنیون - کاتیون در توده ها با معادله زیر تخمین زده می شود:

$$\bar{p}_{CDD}(x, t) = \frac{Q_B^{-2}}{3\kappa_C(t)} \frac{\pm [\alpha_C(t)]^2}{[w_C(t)]^2} \left(\frac{C^-}{C^+}\right) \quad (43)$$

که زیرنویس C پارامترها را در لایه مرزی کاتد تمیز می دهد. $\alpha_C(t)$ بازوی دوقطبی است که در زمان و در حین اینکه کاتیون ها دوباره تحت عمل سولفونات ها (نه لزوماً تحت تاثیر کربوکسیلیت های ضعیف) آرایش می گیرند، تکامل می یابد. برهم کنش بین دوقطبی از قبل مانده در توده و کاتیون های تازه اضافه شده در توده های یونی (بر اثر اعمال ولتاژ) را با تنش متقابل دوقطبی - کاتیون نام گذاری و به صورت زیر تعریف می شود [۴]:

$$\bar{p}_{DC}(x, t) = \frac{2Q_B^{-2}}{9\kappa_C(t)} \frac{\alpha_C(t)\alpha_C(t)}{[w_C(t)]^2} \left(\frac{C^+}{C^-} - 1\right) g(t) \quad (44)$$

$$\approx \frac{2Q_B^{-2}}{9\kappa_C(t)} \frac{R_0\alpha_C(t)}{[w_C(t)]^{5/3}} \left(\frac{C^+}{C^-} - 1\right) g(t)$$

این معادله با قرار دادن کاتیون های اضافی در مرکز کره ای به شعاع (کنونی) $\alpha_C(x, t)$ بدست می آید که شامل توزیع ثابت

تنش در حین توزیع مجدد کاتیون ها صفر نیست. این تنش ناشی از نفوذ آب به داخل یا خارج لایه مرزی آند است و بستگی به این دارد که $t_A(t)$ کمتر یا بیشتر از فشار موثر آب آزاد اطراف، p_R باشد. تبادل آب توسط معادلات نفوذ و شرایط اولیه و مرزی محاسبه می شود. در هر صورت به این علت که لایه مرزی بسیار نازک است، می توان برای ساده سازی، محاسبات را با فرض ثابت بودن t_A و w_A در لایه مرزی انجام داد. با این کار معادله نفوذ (۲۳) با معادله دیفرانسیل زیر جایگزین می شود:

$$\frac{\dot{w}_A}{1 + w_A} + \frac{v_A - v_R}{\left(\frac{L_A}{2}\right)} = 0 \quad (39)$$

زمانی که آی پی ام سی در آب خالص غوطه ور است و در این حال خواص عملگری خود را نمایش می دهد، سرعت $v_R=0$ است و سرعت v_A را تابعی خطی از فشار فرض می کنند:

$$v_A = D_{H_2O} \frac{t_A - p_R}{\left(\frac{L_A}{2}\right)} \quad (40)$$

که D_{H_2O} ضریب نفوذپذیری هیدرولیکی است. با این فرض، و با قرار دادن فشار مرجع p_R برابر با صفر، معادله زیر به دست می آید:

$$\frac{\dot{w}_A}{1 + w_A} = D_{H_2O} \frac{t_A}{\left(\frac{L_A}{2}\right)^2} = D_A t_A \quad (41)$$

ضریب D_A در اینجا دربرگیرنده اثر ضخامت لایه مرزی می باشد. فرض می شود D_A ثابت است [۹].

۴-۲-آبپوشی در لایه مرزی کاتد

در اینجا توده ها در لایه مرزی کاتد مورد بررسی قرار می گیرند. بر خلاف لایه مرزی آند، غلظت یونی در این لایه مرزی بسیار تغییرپذیر است. مانند لایه مرزی آند در اینجا نیز فشار اسمزی طبق معادله (۳۱) به دست می آید، با این تفاوت که به علت تغییرات زیاد در توزیع یون این لایه مرزی، پارامتر توزیع یون v به صورت متوسط در معادله قرار می گیرد تا از تغییرات در جهت z جلوگیری کرده و معادلات تنها با متغیر t به دست آیند، لذا از معادله (۳۱) بدست می آید [۴]:

$$w_C(x, 0) = w_0, \quad 0 < x < h$$

که میزان جذب آب ثابت دقیقاً پیش از توزیع مجدد کاتیون است.

میزان آبپوشی با معادلات (۵۰) و (۵۱) تعریف می‌گردند که در آنها C_1 و C_2 ثابت‌های انتگرال گیری هستند [۱۳]:

$$w_A(z, t) = \left[C_1 h_A(t) - \frac{f_A}{f_{A1}} - \frac{f_A f_{A2}}{f_{A1}} h_A(t) \int \frac{1}{h_A(t)} dt \right] + w_0 \quad (50)$$

$$w_C(z, t) = \left[C_2 h_C(t) - \frac{f_C}{f_{C1}} - \frac{f_C f_{C2}}{f_{C1}} h_C(t) \int \frac{1}{h_C(t)} dt \right] + w_0 \quad (51)$$

$$f_A = D_A(1 + w_0) \left[\frac{-\phi Q_B^- K_0}{w_0} + \frac{Q_B^{-2} R_0}{18\kappa_A w_0^{4/3}} - \frac{Q_B^{-2} \pm (\alpha_A(w_0)^2)}{3\kappa_A w_0^2} \right] \quad (52)$$

$$f_{A1} = D_A \left\{ (1 + w_0) \left[\frac{\phi Q_B^- K_0}{w_0^2} - \frac{2Q_B^{-2} R_0^2}{27\kappa_A w_0^3} + \frac{2Q_B^{-2} \pm [\alpha_A(w_0)]^2}{3\kappa_A w_0^3} - \frac{Q_B^{-2} d \pm [\alpha_A(w_0)]^2}{3\kappa_A w_0^2} \frac{d}{dw_A} \right]_{w_A = w_0} + t_A(w_0, t) \right\} \quad (53)$$

$$f_{A2} = D_A(1 + w_0) \left[-K \frac{4}{3w_i} \left(\frac{w_0}{w_i} \right)^{-7/3} \right] \quad (54)$$

و این پارامترها برای لایه مرزی کاتد به صورت زیر هستند:

$$f_C = D_C(1 + w_0) \left[\frac{-\phi Q_B^- K_0}{\beta w_0} + \frac{2Q_B^{-2} R_0}{9\kappa_A w_0^{5/3}} - \frac{Q_B^{-2} \pm (\alpha_C(w_0)^2)}{3\kappa_C w_0^2} \right] \quad (55)$$

دوقطبی‌های شعاعی با بازوی گشتاور دو قطبی $\alpha_C(t)$ روی سطح کره است و R_0 نیز شعاع اولیه کره توده یونی می‌باشد. در انتها با ضرب در $g(t)$ کامل می‌شود. $g(t)$ تابع تاخیر است و وابستگی به زمان معادله (۴۴) را نشان می‌دهد. این تابع را با ضریب تعادلی نیروهای برهم‌کنش دوقطبی - کاتیون r_0 و τ به عنوان زمان رهایش به صورت زیر تعریف می‌کنند [۴]:

$$g(t) = r_0 + (1 - r_0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (45)$$

برای سولفونات‌ها در آی‌پی‌ام‌سی با پلیمر از نوع نافینون پیش‌بینی می‌شود که فرآیندهای تشکیل ساختار مجدد و توزیع مجدد کاتیون‌های اضافی بسیار گسترده باشد. این مشاهده تأکیدی بر حرکت برعکس رهایشی در نوار آی‌پی‌ام‌سی با زمینه نافینون دارد. این توزیع مجدد کاتیون در لایه مرزی کاتد باعث کاهش سریع pDC تا صفر و یا حتی مقداری منفی برای آن می‌شود. برای اعمال این اثر در فشار توده‌ای، رابطه (۴۴) را با عامل حرکت رهایشی $g(t)$ بهبود داده‌اند.

تنش کل در توده‌ها داخل لایه مرزی کاتد توسط رابطه زیر بیان می‌شود [۱۳]:

$$\bar{t}_c = -\sigma_r(a_0, t) + \bar{P}_c(x, t) + \bar{p}_{CDD}(t) + \bar{p}_{DC}(t) \quad (46)$$

از یک مدل نفوذ خطی برای ارتباط دادن شار آب (سرعت نفوذ آب) v_C به گرادیان فشار محرک $\partial C/\partial x$ استفاده می‌شود [۱۳]:

$$v_C = -D_{H_2O} \frac{\partial t_C}{\partial x} \quad (47)$$

بنابراین، با توجه به شرایط پیوستگی معادله (۴۱)، نرخ تغییر آب جذب شده در لایه مرزی کاتد توسط معادله نفوذ بدست می‌آید:

$$\frac{\dot{w}_C}{1 + w_C} = D_{H_2O} \frac{\partial^2 t_C}{\partial x^2} \quad (48)$$

و شرایط مرزی و اولیه مانند لایه مرزی آند مطابق زیر برقرارند:

$$t_C(h, t) = p_R = 0 \quad (49)$$

که در آن Y سفتی معادل کل نوار، L طول نوار، I ممان اینرسی و u_3 نیز خیز انتهایی نوار است.

۵- نتایج و بحث

برنامه کامپیوتری معادله دیفرانسیل (۱۹) توسط نرم افزار متلب برای نوار آی پی ام سی با ضخامت ۲۰۰ میکرومتر و تعداد المان ۳۲ در ضخامت نوار نوشته و اجرا شده است. همچنین روش اویلر برای انتگرال گیری روی زمان استفاده شده است. لازم به ذکر است که به منظور مقایسه با مرجع [۲۵] پارامترهای مسئله منطبق بر این مرجع انتخاب شده اند. شرط مرزی نیز طبق معادله (۱۳) تعریف شده است. ضمن اینکه $C_0 = 1147 \text{ mol/m}^3$ در نظر گرفته شده است. کاتیون استفاده شده Na^+ و حلال آب است. با فرض پلیمری از نوع نافینون پارامترهای مطالعه در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱- مشخصات آی پی ام سی مورد شبیه سازی [۲۵]

پارامتر	علامت	مقدار (واحد)
ضریب ویسکوز برای Na^+ هیدراته	η	$1/18 \times 10^{-11} \text{ (Ns/m}^2\text{)}$
دما	T	۲۹۳ (K)
گذردهی الکتریکی نافینون هیدراته	κ_e	$2/8 \times 10^{-3} \text{ (C}^2/\text{Nm}^2\text{)}$
مساحت سطح مقطع	S_x	$34/2 \times 10^{-6} \text{ (m}^2\text{)}$

گام زمانی حل اویلر $\Delta t = 0.0005$ ثانیه در نظر گرفته شده است، و حل تا زمان 0.11 ثانیه ادامه پیدا می کند تا تنها بیانگر فرآیند سریع الکترواسمزی اولیه باشد.

با حل معادله (۱۹) برای نمونه عملگر مورد نظر بالا، توزیع بار الکتریکی کاتیون از آند تا کاتد بدست آمده و در شکل ۴ ارائه شده است. این نمودار توزیع بار الکتریکی را در ضخامت نوار آی پی ام سی قبل از ایجاد اختلاف پتانسیل بین الکترودها و پس از اعمال ولتاژ ۱ ولت، (پس از 0.11 ثانیه) نمایش می دهد.

$$f_{C1} = D_C \left\{ (1 + w_0) \left[\frac{\phi Q_B^- K_0}{w_0^2} - \frac{10 Q_B^{-2} R_0^2 \alpha_C(w_0)}{27 \kappa_A w_0^{\frac{7}{3}}} + \frac{2 Q_B^{-2} R_0 d \alpha_C(w_C)}{9 \kappa_C w_0^{\frac{5}{3}} dw_C} \right]_{w_C = w_0} + \frac{2 Q_B^{-2} \pm [\alpha_A(w_0)]^2}{3 \kappa_C w_0^3} - \frac{Q_B^{-2} d \pm [\alpha_C(w_C)]^2}{3 \kappa_C w_0^2 dw_C} \right\}_{w_C = w_0} + t_C(w_0, t) \quad (56)$$

$$f_{C2} = D_C (1 + w_0) \left[-K \frac{4}{3 w_i} \left(\frac{w_0}{w_i} \right)^{-7/3} \right] \quad (57)$$

$$h_A(t) = \exp \left\{ \int \left[f_{A1}(t) \left(1 + \frac{C^+}{C^-} \right) + f_{A1} \right] dt \right\} \quad (58)$$

$$h_C(t) = \exp \left\{ \int \left[f_{C1}(t) \left(1 + \frac{C^+}{C^-} \right) + f_{C1} \right] dt \right\} \quad (59)$$

با شرایط اولیه $w_A(z,0) = w_0$ و $w_A(z,t) = w_0$ و جای گذاری پارامترهای بالا و ثوابت انتگرال گیری حاصل از شرایط اولیه، معادله (۳۰) به شکل معادله (۶۰) حل خواهد شد:

$$M^e = - \frac{Y_b b h L_A}{6(1 + w_0)} \left[\frac{f_A}{f_{A1} + f_{A2}} (e^{(f_{A1} + f_{A2})t}) - 1 \right] - \frac{\beta f_C}{f_{C1} + f_{C2}} (e^{(f_{C1} + f_{C2})t} - 1) \quad (60)$$

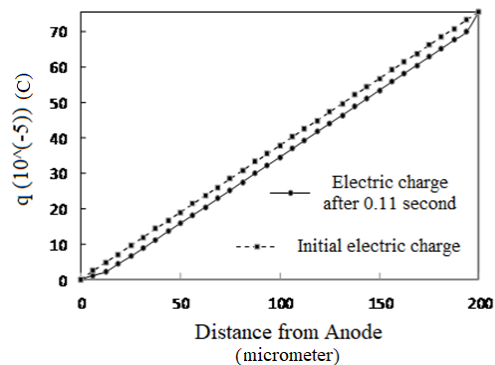
این معادله گشتاور خمشی آی پی ام سی بر حسب میزان آپوشی را به دست می دهد.

با در نظر گرفتن یک نوار یک سر گیردار آی پی ام سی، جایجایی نوک نوار به صورت معادله (۶۱) بیان می شود.

$$\frac{u_3}{L} = \frac{M^e L}{2(YI)_{eff}} \quad (61)$$

همانطور که از شکل ۵ مشاهده می‌شود، در هر دو نمودار در ناحیه بزرگی وسط ضخامت نوار آی‌پی‌ام‌سی، غلظت ثابت و برابر غلظت اولیه ($C_0=1147 \text{ mol/m}^3$) است و اعمال بار هیچ تاثیری بر این ناحیه ندارد. حل بدست آمده در مرجع [۲۵] با نتایج تاداگورا [۲۲] که برای اولین بار این مدل را در سال ۲۰۰۰ معرفی کرد و با نتایج مدل هیبریدی و آزمایشات نعمت ناصر [۹] که تمامی اثرات غیرخطی بر خواص آی‌پی‌ام‌سی را نیز در بر دارد، اختلاف دارد. رفتار کلی به دست آمده در مرجع [۹] با نتایج مطالعه حاضر مطابقت دارند. همانطور که دیده می‌شود، میزان مهاجرت یون‌ها در نزدیکی آند و کاتد در نمودار مربوط به مرجع [۲۵] به صورت یکسان تغییر می‌کند در حالی که این امر خلاف نتایج مرجع [۹] است و در واقع، مطابق نمودار مربوط به مقاله حاضر، لایه مرزی کاتد کوچکتر از لایه مرزی آند است. اختلاف توزیع یون در نزدیکی کاتد و آند را نعمت ناصر [۹] با اثبات کوچکتر بودن لایه مرزی کاتد نسبت به لایه مرزی آند نشان داد. از نتایج مطالعه حاضر در شکل ۵ نیز دیده می‌شود که غلظت در نزدیکی کاتد با شیب زیادی افزایش می‌یابد و در نزدیکی آند این شیب کمتر است. این رفتار مشابه رفتار پیش‌بینی شده در مرجع [۹] است.

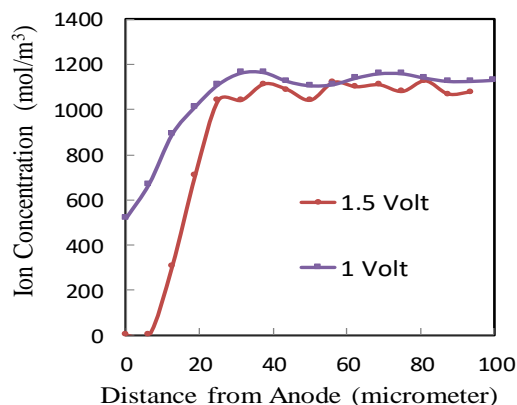
یک مطالعه پارامتریک روی تاثیر تغییر اختلاف پتانسیل الکتریکی بین دو الکترود بر توزیع غلظت یون‌ها در ضخامت نوار آی‌پی‌ام‌سی در نزدیکی آند انجام شده و نتایج در شکل ۶ نمایش داده شده است. در این شکل، غلظت یون‌ها در زمان 0.05 ثانیه تحت اثر دو پتانسیل الکتریکی اعمالی ۱ و 1.5 ولت ارائه شده است.



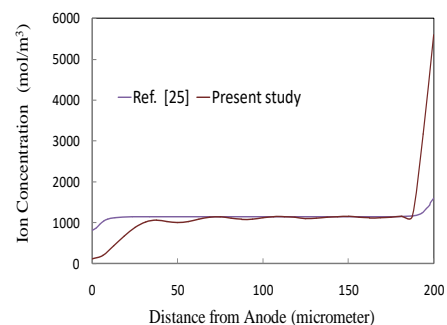
شکل ۴- بار الکتریکی در ضخامت عملگر تحت ولتاژ ۱ ولت

با حل معادله (۱۹) و با استفاده از معادله (۹)، توزیع غلظت یون در ماده به دست می‌آید. با توجه به معادله (۹)، غلظت یون در هر مکان، در ارتباط با مشتق مکانی بار الکتریکی به دست آمده در نمودار شکل ۴ است. با توجه به این نمودار، بار الکتریکی در نزدیکی کاتد و آند گرادیان زیاد دارد و در نواحی وسط گرادیان زیاد وجود ندارد. به این معنی که نواحی نزدیک آند و کاتد نواحی تعیین‌کننده غلظت و به تبع آن کرنش حجمی هستند. به همین دلیل، این نواحی را لایه مرزی کاتد و آند می‌نامند.

در شکل ۵، توزیع غلظت یون در زمان 0.11 ثانیه و در کنار حل حاضر، توزیع غلظت یون در مرجع [۲۵] رسم شده است. در مرجع [۲۵]، یک مدل دو بعدی از نوار آی‌پی‌ام‌سی بر پایه مدل هیدرولیکی مرجع [۲۲] تحلیل شده است. توزیع غلظت در مرجع [۲۵] در یک بعد ارائه شده است که در نمودار شکل ۵ آورده شده است.

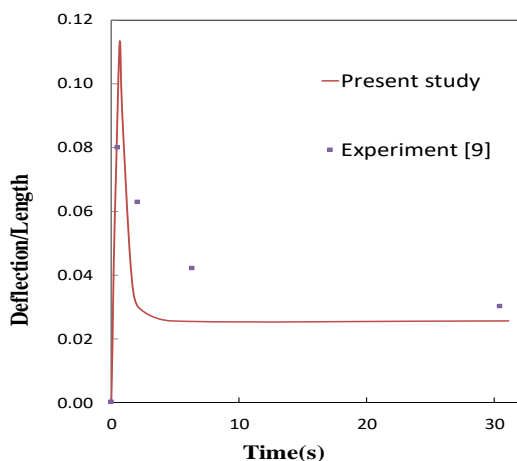


شکل ۶- اثر مقدار پتانسیل الکتریکی اعمالی بر توزیع غلظت یون در نزدیکی آند نوار آی‌پی‌ام‌سی



شکل ۵- غلظت یون در ضخامت عملگر تحت تحریک ۱ ولت

$5/31 \times 10^{-11}$ (F/m)	κ_C	گذردهی الکتریکی در CBL
10^{-10} (F/m)	κ_A	گذردهی الکتریکی در ABL
$2/1462 \times 10^{-10}$	n_0	تخلخل اولیه
$0/1$	Φ	ضریب اسمزی



شکل ۷- پاسخ عملگری انتهای نوار آی پی ام‌سی

شایان ذکر است که نتایج مرجع [۹] از ارزیابی آزمایشگاهی پاسخ مکانیکی عملگر آی پی ام‌سی با کاتیون‌های مختلف و در غلظت‌های مختلف آب بدست آمده است. این آی پی ام‌سی با پلاتینیوم به ضخامت ۶ میکرومتر در دو سوی نوار الکترودهی شده است. میزان آبیوشی اولیه $w_0 = 0/533$ فرض شده و پتانسیل الکتریکی اعمال شده ۱ ولت می‌باشد. دمپینگ ویسکوز مصالح صفر فرض شده است. نتایج نشان داده شده در شکل ۷ برای جابجایی انتهای نوار با تقسیم آن بر طول آی پی ام‌سی بی‌بعد شده است.

رفتار عملگری نوار آی پی ام‌سی نشان داده شده در نمودار شکل ۷ مشخص می‌کند که حرکت اولیه آی پی ام‌سی بسیار سریع است. این حرکت به سمت کاتد است و علت آن گشتاور خمشی حاصل از پتانسیل الکتریکی است و جابجایی بیشینه ۲ میلی‌متر را پیش‌بینی می‌کند. پس از این حرکت سریع، نوار به سمت آند بازمی‌گردد و نهایتاً خیز انتهایی ۰/۵ میلی‌متر در نوار باقی می‌ماند. علت اختلاف حل ارائه شده با مرجع [۹]،

همانطور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، با افزایش ولتاژ اعمالی از ۱ ولت به ۱/۵ ولت در فاصله کمتر از ۱۰ میکرومتر از الکتروود آند، تمام کاتیون موجود مهاجرت کرده و غلظت کاتیون صفر می‌شود، و در نتیجه باعث تورم و کرنش ویژه بیشتر آی پی ام‌سی می‌شود. با توجه به اینکه در مرجع [۹] به طور آزمایشگاهی اثبات شده که کرنش ویژه این ماده رابطه مستقیم با غلظت یون دارد، با افزایش ولتاژ انتظار می‌رود به واسطه افزایش میزان مهاجرت‌های یونی، کرنش بزرگتری دیده شود. البته برای افزایش ولتاژ و حصول کرنش بزرگ باید محدودیت ذاتی مواد سازنده آی پی ام‌سی (پلیمر ویسکوالاستیک و پلاریزه و الکتروود الاستیک) در نظر شود. در معادله (۶۱)، معادله تغییر شکل عرضی انتهای نوار آی پی ام‌سی بعنوان پاسخ عملگری آن بدست آمده است. مقادیر عددی پارامترهای دخیل در معادله (۶۱) مطابق جدول ۲ بر اساس مرجع [۹] اتخاذ شده‌اند. این حل بر روی آی پی ام‌سی با یون Na^+ و پلیمری از نوع نافینون انجام شده است.

در شکل ۷، نحوه تغییرات خیز انتهای نوار آی پی ام‌سی با طول ۱۸ میلی‌متر، عرض ۲ میلی‌متر و ضخامت ۲۲۴ میکرومتر در طول زمان با استفاده از مدل حاضر رسم شده، و با نتایج مرجع [۹] مقایسه شده است.

جدول ۲- مقادیر به کار رفته در حل معادله (۶۱) [۹]

پارامتر	علامت	مقدار (واحد)
عدد کنوردیناسیون	CN	۴/۵
وزن مولی Na^+	EW_{Na^+}	۲۳ (g/mol)
ضریب در رابطه طول موثر دوقطبی	a_2 و a_1	$1/5234 \times 10^{-20}$
ضریب D_A	D_A	$1/000 \times 10^{-8}$
وزن مولی معادل یونومر دارای پرتون	EW_{H^+}	۱۱۰۰ (g/mol)
دما	T	۲۹۳ (K)
شعاع اولیه توده یونی	a	$1/65 \times 10^{-9}$ (m)
چگالی آی پی ام‌سی	ρ	۳۳۸۵ (kg/m ³)
ثابت گاز	R	$8/3143 \times 10^{-9}$ (J/mol.K)
ثابت فارادی	F	۹۶۴۸۵ (C/mol)
چگالی یونومر	ρ_b	۲۰۲۰ (kg/m ³)

- [2] Shahinpoor M (1995) Micro-electro-mechanics of ionic polymeric gels as electrically controllable artificial muscles. *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 6(3): 307–314.
- [3] Grimshaw PE, Nussbaum JH, Grodzinsky AJ, Yarmush ML (1990) Kinetics of electrically and chemically induced swelling in polyelectrolyte gels. *J. Chem. Phys.* 93(6): 62–72.
- [4] Bar-Cohen Y (2004) *Electroactive polymer (EAP) actuators as artificial muscles: reality, potential, and challenges*. Second edn. SPIE Press, Washington.
- [5] Jung W, Kang SS, Toi Y (2010) Computational modeling of electrochemical-mechanical behaviors of Flemion-based actuators considering the effects of electro-osmosis and electrolysis. *Comput. Struct.* 88(15–16): 38–48.
- [6] Nemat-Nasser S, Li JY (2000) Electromechanical response of ionic polymer-metal composites. *J. Appl. Phys.* 87(7): 21–31.
- [7] Nemat-Nasser S, Wu Y (2003) Comparative experimental study of ionic polymer metal composites with different backbone ionomers and in various cation forms. *J. Appl. Phys.* 93(9): 55–67.
- [8] Nemat-Nasser S, Zamani S, Tor Y (2006) Effect of solvents on the chemical and physical properties of ionic polymer-metal composites. *J. Appl. Phys.* 99(10): 1–17.
- [9] Nemat-Nasser S (2002) Micromechanics of actuation of ionic polymer-metal composites. *J. Appl. Phys.* 92(5): 2899–2915.
- [10] Liu H, Han S, Li Y, Zhang M, Zhu J (2023) Deflection analysis of IPMC actuators under AC voltages using DIC method. *Proc. SPIE.* 12550.
- [11] UI Haq M, Gang Z, Muhammad, Waqas H, Ur Rehman A, S.M A (2015) Deflection analysis of IPMC actuated fin of a fish like micro device. *J. Biomimetics, Biomater. Biomed. Eng.* 24: 97-104.
- [12] Farid M, Gang Z, Linh Khuong T, Zhi Sun Z, Rizwan M (2014) Deflection analysis of Ionic Polymer Metal Composites (IPMC) actuators for bionic joints. *Appl. Mech. Mater.* 627: 251-253.
- [13] Farid M, Gang Z, Linh Khuong T, Ur Rehman N, Adnan S (2015) Deflection simulation of Ionic Polymer Metal Composites (IPMC) actuators for bionic knee joints. *Adv. Mater. Res.* 1101: 459-462.
- [14] SamPour S, Moeinkhah H, Rahmani H (2019) Electrochemical viscoelastic modelling to predict quasi-static and dynamic response of IPMC actuators. *Mech. Mater.* 138: 103172.
- [15] Traver JE, Nuevo-Gallardo C, Rodríguez P, Tejado I, Vinagre BM (2022) Modeling and control of IPMC-based artificial eukaryotic flagellum swimming robot: Distributed actuation. *Algorithms.* 15(6): 181.

تقریبی است که در سری تیلور برای بدست آوردن میزان آپیوشی آند و کاند در نظر گرفته شده است، و باعث از بین رفتن برخی اثرات حرکت رهایشی گردیده است. به همین دلیل این حل توانایی مدل کردن حرکت رهایشی را به صورت کامل ندارد. با این حال، برای بررسی پاسخ سریع ماده مانند پاسخ به پتانسیل متناوب مناسب است. چرا که با انتخاب فرکانس مناسب، ماده فرصت بروز حرکت رهایشی را ندارد. همچنین مدل حاضر با وجود بار محاسباتی کم، نتایج قابل قبولی را ارائه می‌دهد.

۶- نتیجه گیری

در این مقاله، رفتار عملگری نوار آی‌پی‌ام‌سی توسط یک مدل چند مقیاسی الکتروشیمی-مکانیکی با تعریف نیروهای ویسکوز، الکتریکی و نفوذ ارائه شد. پس از اعمال ولتاژ الکتریکی معادله توزیع غلظت یون و آب برحسب بار الکتریکی فرمول‌بندی شد. از این معادله، خواص عملگری ماده شناسایی شد. به این صورت که توزیع غلظت منجر به کرنش ویژه برحسب میزان اختلاف پتانسیل الکترودها شد، و معادله زمان‌مند توسط روش اجزاء محدود گسسته شد. انتگرال‌های زمانی معادله توسط روش اویلر حل شد. سپس با استفاده از رابطه بین نرخ تغییر لنگر خمشی بر حسب زمان و کرنش ویژه، لنگر خمشی و خیز انتهای نوار بدست آمد. نتایج بدست آمده از مدل با نتایج تجربی و مدل‌سازی در دسترس مورد مقایسه و اعتبار سنجی قرار گرفت. نتایج نشان داد که مدل ارائه شده علیرغم سادگی و بار محاسباتی و هزینه کم، پاسخ سریع نوار آی‌پی‌ام‌سی را به‌نحو قابل قبولی پیش‌بینی می‌کند. با توجه به نتایج بدست آمده از مدل‌سازی عددی، نقش مهم لایه‌های مرزی آند و کاند به عنوان ناحیه تعیین کننده کرنش حجمی تایید شد. در این شبیه‌سازی مشاهده شد که با افزایش ولتاژ، میزان یون و آب جابجا شده بیشتر است و در نتیجه خمش بیشتری در ماده دیده می‌شود.

مراجع

- [1] Biddiss E, Chau T (2006) Electroactive polymeric sensors in hand prostheses: Bending response of an ionic polymer metal composite. *Med. Eng. Phys.* 28: 568–578.

- finite element method. *Int. J. Mech. Sci.* 51(11-12): 741-751.
- [22] Tadokoro S, Yamagami S, Takamori T, Oguro K (2000) An actuator model of ICPF for robotic applications on the basis of physicochemical hypotheses. In: *IEEE International conference on robotics and automation*.
- [23] Feng GH (2010) Numerical study on dynamic characteristics of micromachined ionic polymer metal composite devices based on molecular-scale modeling. *Comput. Mater. Sci.* 50(1): 158-166.
- [24] Zhang L, Yang Y (2007) Modeling of an ionic polymer-metal composite beam on human tissue. *SMS* 16(2): 197-207.
- [25] Toi Y, Kang SS (2005) Finite element analysis of two-dimensional electrochemical-mechanical response of ionic conducting polymer-metal composite beams. *Comput. Struct.* 83(31-32): 73-83.
- [16] Rao M, Tang F, Li Y, Chang LF, Zhu Z, Aabloo A (2022) Multi-physical modeling and fabrication of high-performance IPMC actuators with serrated interface. *Smart Mater. Struct.* 31(9): 095023.
- [17] Gupta A, Mukherjee S (2021) Dynamic modeling of biomimetic undulatory ribbon fin underwater propulsor actuated by IPMC. *Mater. Today: Proc.* 44(1): 1086-1089.
- [18] De Gennes PG, Okumura K, Shahinpoor M, Kim KJ (2000) Mechanoelectric effects in ionic gels. *EPL* 50(4): 513-518.
- [19] Asaka K, Oguro K (2000) Bending of polyelectrolyte membrane platinum composites by electric stimuli: Part II. Response kinetics. *J. Electroanal. Chem.* 480(1-2): 186-198.
- [20] Kim KJ, Tadokoro S (2007) *Electroactive polymers for robotics applications: artificial muscles and sensors*. First edn. Springer, London.
- [21] Gong Y, Tang C, Tsui C, Fan J (2009) Modelling of ionic polymer-metal composites by a multi-field