



تحلیل عددی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های متخلخل مزوپروس سیلیکا و هیدروکسی آپاتیت - پلی پروپیلن

علیرضا آلبویه*

استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۴/۰۴/۲۸؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۴/۱۰/۱۳؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۰۴/۱۲

چکیده

این مقاله به بررسی عددی خواص مکانیکی پلی پروپیلن تقویت شده با یک درصد وزنی از نانوذرات مزوپروس سیلیکا، هیدروکسی آپاتیت، ترکیب مزوپروس سیلیکا و هیدروکسی آپاتیت می‌پردازد. شبیه سازی عددی بر مبنای روش ماکرو مکانیک (روش محیط پیوسته) و برای توابع مختلف چگالی انرژی کرنشی شامل: مارلو، اگدن و وان دروالس، با استفاده از نرم افزار تجاری آباکوس انجام شده است. برای این منظور، رفتار هایپرالاستیک نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری شامل: نانوکامپوزیت‌های مزوپروس سیلیکا/ پلی پروپیلن، هیدروکسی آپاتیت/ پلی پروپیلن و نانو هیبرید مزوپروس سیلیکا- هیدروکسی آپاتیت/ پلی پروپیلن تحت بارگذاری‌های کشش تک محوری، خمش سه نقطه‌ای و ضربه سرعت پایین بررسی شده است. به منظور تصدیق نتایج عددی، مقادیر بدست آمده از شبیه سازی خواص مکانیکی، با نتایج آزمون‌های عملی مشابه، مقایسه شده‌اند. نتایج شبیه سازی انجام شده، تطابق بسیار خوبی را با نتایج تجربی نشان می‌دهد و مدل مارلو، نزدیکترین پاسخ را نسبت به داده‌های آزمایشگاهی دارد.

کلمات کلیدی: شبیه سازی عددی؛ نانوکامپوزیت پلیمری؛ خواص مکانیکی؛ آزمایش کشش تک محوری؛ مواد هایپرالاستیک.

Numerical Analysis of Mechanical Properties of Mesoporous Silica and Hydroxyapatite-Polypropylenenanocomposites

A.R. Albooyeh*

Assist. Prof., Mech. Eng., Damghan Univ., Damghan, Iran.

Abstract

This paper presents the numerical study on the mechanical properties of polypropylene (PP) reinforced with 1 wt.% (weight percentage) mesoporous silica (MCM-41), Hydroxy Apatite(HA) and the composite of MCM-41 and HA (MCM41-HA or MH) nanoparticles. Numerical simulation according to macromechanical method(continuum method) was performed for different form of StrainEnergy Density Function containing: Marlow, Ogden and Van der Waals using the commercial software ABAQUS/CAE. In this research the hyperelastic behavior of porous polymeric nanocomposites containing: mesoporous silica/ polypropylene (PMCM), hydroxyapatite/polypropylene (PHA) nanocomposites and mesoporous silica- hydroxyapatite /polypropylene (PMH) nanohybrid in the uniaxial tensile test, three point bending test and Izod impact test were studied. In order to verify the numerical results, values obtained from the simulation of mechanical properties were compared With similar functional tests. The performed simulation results are in good accordance with the experimental data and the Marlow model has the best agreement with results of experiment.

Keywords: Numerical Simulation; Polymeric Nanocomposite; Mechanical Properties; Uniaxial Tensile Test; Hyperelastic Materials.

* نویسنده مسئول؛ تلفن: ۰۲۳۳۳۲۲۰۴۱۴

آدرس پست الکترونیک: a.albooyeh@du.ac.ir

۱- مقدمه

تعیین خواص مکانیکی مواد، یک گام ضروری در طراحی محصولات جدید به شمار می‌رود. گسترش خواص مواد پایه به مواد واقعی به دلیل جنبه‌های غیرخطی مواد واقعی، امری مشکل و حتی در بعضی از مواقع غیرممکن است. از این رو شبیه سازی عددی به یک امر ضروری مهندسی در طراحی محصولات، به منظور کاهش هزینه و زمان تولید نمونه‌ها، تبدیل شده است.

یکی از جنبه‌های چالش برانگیز برای شبیه سازی مواد پیشرفته مانند، نانوکامپوزیت‌های پلیمری، نشان دادن غیرهمگنی، غیرخطی، نامنظم بودن و خواص وابسته به زمان این مواد است. توزیع تصادفی و اشکال متنوع تخلخل‌ها، سبب مشکل‌تر شدن شبیه‌سازی نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری می‌شود.

اولین گام در دستیابی به یک شبیه‌سازی معتبر از رفتار محصول، ایجاد بهترین تطابق بین جنس ماده شبیه سازی شده با نمونه واقعی است؛ بنابراین مدلی از مواد که نتایج آن تا حد قابل قبولی (با مقدار خطای مجاز) با نتایج حاصل از آزمایش‌ها مطابقت داشته باشد، مورد توجه قرار می‌گیرد [۱].

تحقیقاتی که تاکنون برای شبیه‌سازی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها از روش ماکرو مکانیکی^۱ انجام شده است، نشان می‌دهد که محققان، از روش‌ها و توابع انرژی کرنشی^۲ مختلفی برای شبیه‌سازی جنس مواد استفاده کرده‌اند. به عنوان نمونه آندری و همکاران، به بررسی رفتار مکانیکی پلیمر شبه کریستالی پلی آمید در بارگذاری کشش تک محوری^۳ با در نظر گرفتن توابع چگالی انرژی کرنشی مختلف در نرم افزار آباکوس پرداخته‌اند [۱]. ساسو و دیگران، با استفاده از آزمایش‌های تک محوری و شبه دو محوری^۴، شبیه سازی را برای مواد هایپرالاستیک^۵ شبه لاستیک انجام داده‌اند [۲]. در مطالعه انجام شده در [۳] مدل‌های مختلف توابع چگالی انرژی کرنشی برای شبیه‌سازی آزمون‌های کشش تک محوری، کشش دو محوری و برشی صفحه‌ای^۶

برای لاستیک کلروپرن، مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در تحقیقی دیگر [۴]، تحلیل مدل هایپرالاستیک برای پیش بینی رفتار تنش- کرنش کشش تک محوری نانوکامپوزیت‌های Polybutadiene/Ethylene-Propylene انجام شده است. اریگا، همگرایی نتایج حاصل از شبیه‌سازی را با آزمایش‌های خمش سه نقطه‌ای^۷ و نفوذ گلوله را در نانوکامپوزیت‌های پلی پروپیلن، مورد مطالعه قرار داده است [۵]. اول و همکارانش، به بررسی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های متخلخل الاستومری با استفاده از نتایج آزمایشگاهی پرداخته‌اند [۶]. فیلیپ [۷]، از آزمایش‌های تک محوری و حجمی جهت شبیه‌سازی فوم‌های پلیمری در بارگذاری ضربه‌ای استفاده کرده است. پالیکوسکی و دیگران، مدلسازی رفتار نانوکامپوزیت‌های پلی یورتان را با استفاده از نتایج حاصل از آزمایش‌های فشاری تک محوری و مدل مونی ریولین انجام داده‌اند [۸]. علیپور و همکاران، به بررسی رفتار تنش-کرنش نانوکامپوزیت‌های NR/EPDM با استفاده از توابع مختلف چگالی انرژی کرنشی پرداخته‌اند [۹]. مدل هایپرالاستیک غیرقابل تراکم برای نانولوله‌های کربنی تک جداره با استفاده از آزمایش‌های کششی، توسط فلورس و همکاران مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰]. محققان دیگر نیز، از مدل‌های هایپرالاستیک و توابع چگالی انرژی کرنشی مختلف جهت شبیه سازی پلیمرهای پلی پروپیلن، پلی یورتان و پلی اتیلن استفاده کرده‌اند [۱۱ و ۱۲].

در این مقاله، نانوکامپوزیت‌های مزوپروس سیلیکا^۸/ پلی پروپیلن (PMCM^۹)، هیدروکسی آپاتیت^{۱۰}/ پلی پروپیلن (PHA^{۱۱}) و نانوهیبرید مزوپروس سیلیکا- هیدروکسی آپاتیت/ پلی پروپیلن (PMH^{۱۲})، به کمک دستگاه‌کسترودر دو مارپیچه^{۱۳} تولید و آزمایش‌های خواص مکانیکی روی آن‌ها انجام شده است. سپس سه نوع بارگذاری کشش تک محوری، خمش سه نقطه‌ای و ضربه سرعت پایین^{۱۴} با استفاده از نرم

⁷ Three Point Bending Test

⁸ Mesoporous Silica (MCM-41)

⁹ Polypropylene/ MCM-41

¹⁰ Hydroxyapatite (HA)

¹¹ Polypropylene/ HA

¹² Polypropylene/ MCM-41-HA

¹³ Twin-Screw Extruder

¹⁴ Izod Impact Test

¹ Macromechanic Model

² Strain Energy Density Function (SEDF)

³ Uniaxial Tensile Test

⁴ Biaxial Tensile Test

⁵ Hyperelastic

⁶ Planar Shear Test

همانگونه مدلسازی شود که برای مواد الاستیک منظم در نظر گرفته می‌شود. در این مواد پاسخ الاستیک، از یک تابع پتانسیل الاستیک ذخیره شده مشتق می‌شود که تابع چگالی انرژی کرنشی نامیده می‌شود. این مواد که در آنها کار انجام شده در فرآیند تغییر شکل، مستقل از مسیر است و فقط به وضعیت اولیه و ترکیب بندی نهایی وابسته است، مواد هایپرااستیک نامیده می‌شوند [۱۴ و ۱۴].

توابع چگالی انرژی کرنشی مختلفی مانند: چندجمله‌ای^۴، چندجمله‌ای^۵، مارلو^۶، اگدن^۷، وان در والس^۸، مونی-ریولین^۹، ریولین^{۱۰}، آرودا-بویس^{۱۱} و نئو-هوکین^{۱۱}، در طول سال-های متمادی برای توصیف رفتار مواد هایپرااستیک ارائه شده‌اند. عموماً توابع مورد نظر در شکل چند جمله‌ای بیان شده‌اند که به منظور ارتباط با مقادیر آزمایشی اندازه گیری شده، ضرایب چندجمله‌ای بایستی محاسبه شوند [۱۵ و ۱۴].

مواد هایپرااستیک، براساس انرژی پتانسیل کرنشی توصیف می‌شوند که به صورت انرژی کرنشی ذخیره شده بر واحد حجم مرجع (حجم ترکیب یا شکل اولیه)، به عنوان تابعی از کرنش در آن نقطه از ماده تعریف می‌شود. انرژی پتانسیل کرنشی بر اساس سه ناوردای کرنش I_1, I_2, I_3 ، قابل تعریف است که طبق رابطه (۱) محاسبه می‌شوند [۱۵].

$$I_1 = \text{trace}(\varepsilon^{el})$$

$$I_2 = \frac{1}{2}(\varepsilon^{el} \cdot \varepsilon^{el} - I_1^2)$$

$$I_3 = \det(\varepsilon^{el}) \quad (1)$$

که ε^{el} کرنش الاستیک کل است؛ همچنین ناوردهای کرنش طبق رابطه (۲) بر اساس نسبت کشیدگی‌های اصلی $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ ، قابل تعریف می‌باشند [۱۵].

$$I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2$$

$$I_2 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 + \lambda_2^2 \lambda_3^2 + \lambda_1^2 \lambda_3^2$$

$$I_3 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3^2 \quad (2)$$

افزار تجاری آباکوس^۱ روی نمونه‌ها، شبیه سازی شده است. به این صورت که ابتدا با استفاده از داده‌های حاصل از آزمایش کشش تک محوری و توابع چگالی انرژی کرنشی مارلو، اگدن و وان در والس، جنس مواد هایپرااستیک برای نانوکامپوزیت‌های مختلف شبیه‌سازی شده، سپس نمونه‌ها تحت آزمایش‌های خواص مکانیکی ذکر شده با شرایط مشابه آزمایش‌های خواص مکانیکی قرار گرفته، نتایج مربوطه استخراج شده‌اند. به منظور اطمینان از صحت نتایج شبیه سازی، این نتایج در کلیه بارگذاری‌ها با نتایج آزمایش‌ها مقایسه شده‌اند. استفاده از مدل‌های هایپرااستیک، جهت شبیه‌سازی عددی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های ارائه شده، برای اولین بار در این مقاله انجام شده است.

۲- تئوری

مدل‌های مختلفی قادرند تا مکانیزم‌های بارگذاری و تغییر شکل نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری را شبیه‌سازی کنند. این مدل‌ها، در دو دسته کلی طبقه بندی می‌شوند. الف) مدل‌های میکرومکانیکی^۲ که بر پایه تحلیل مکانیزم تغییر شکل ساختار تخلخل‌های تحت بارگذاری بنا نهاده شده‌اند و با ایجاد ساختار هندسه سلول و ظاهری مشابه مواد سلول دار واقعی عمل می‌کنند.

عموماً این نوع مدل‌ها به دلیل منظم بودن ساختار بازسازی شده، اختلاف زیادی از نظر ظاهر سلول‌ها با نمونه واقعی دارند. ب) مدل‌های ماکرومکانیکی (محیط پیوسته) که در آن‌ها، هدف دستیابی به بهترین تطابق با رفتار مکانیکی آزمایشگاهی بدون رابطه مستقیم با فیزیک پدیده است. در این روش، مدل‌سازی بر اساس نتایج حاصل از آزمایش‌هایی مانند، داده‌های تنش-کرنش حاصل از آزمایش‌های تک محوری کششی یا فشاری یا داده‌های حاصل از آزمایش‌های شبه دو محوری و یا آزمایش‌های حجمی^۳ انجام می‌شود.

داده‌های بدست‌آمده از آزمایش‌های خواص مکانیکی نشان می‌دهند که پاسخ نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری نمی‌تواند به وسیله یک رابطه خطی بین تنش-کرنش،

⁴ Polynomial

⁵ Marlow

⁶ Ogden

⁷ Van der Waals

⁸ Mooney-Rivlin

⁹ Arruda-Boyce

¹⁰ Yeoh

¹¹ Neo-Hookean

¹ Abaqus

² Micromechanic Model

³ Volumetric Test Data

σ و ϵ به ترتیب، تنش و کرنش اسمی حاصل از آزمایش کشش تک محوری هستند که به طور مستقیم در رابطه (۷) جاگذاری می‌شوند.

۳-۲- مدل وان در والس

در این مدل، تابع چگالی انرژی کرنشی از رابطه (۸) محاسبه می‌شود [۱۵].

$$W = \mu \left\{ -(\lambda_m^2 - 3) [\ln(1 - \eta) + \eta] \right\} + \mu \left\{ -\frac{2}{3} a \left(\frac{I - 3}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \right\} \quad (8)$$

که مقادیر I و η از رابطه (۹) حاصل می‌شوند.

$$I = (1 - \beta)I_1 + \beta I_2, \quad \eta = \sqrt{\frac{I - 3}{\lambda_m^2 - 3}} \quad (9)$$

و μ و a و β ، ثابت‌های مواد می‌باشند که توسط داده‌های آزمایش کششی محاسبه می‌شوند.

۳- شبیه سازی عددی

با توجه به ماهیت غیرخطی و نامنظم نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری در این مقاله، از روش دوم (ماکرومکانیکی) جهت شبیه سازی خواص مربوط به جنس مواد استفاده شد، تا بهترین تطابق را با رفتار نمونه واقعی ایجاد کند. برای این منظور، داده‌های حاصل از آزمایش کشش تک محوری نمونه‌های مختلف، به عنوان ورودی برای شبیه سازی جنس نانوکامپوزیت‌ها به نرم افزار داده شد. در مرحله بعد، نرم افزار با استفاده از مقادیر ورودی و به کمک توابع انرژی کرنشی ذکر شده، جنس نمونه‌های مختلف را شبیه‌سازی کرده (محاسبه ثابت های مواد موجود در روابط فوق) و سپس آزمایش‌های کشش تک محوری، خمش سه نقطه‌ای و ضربه سرعت پایین به صورت عددی روی آن‌ها انجام شد. لازم به ذکر است که تاثیر نانوذرات مختلف در بخش مدل‌سازی، در مقادیر حاصل از آزمایش کشش تک محوری تجربی (مقادیر تنش - کرنش تجربی) خود را نشان می‌دهد.

قابل توجه است که برای استفاده از داده‌های آزمون کشش تک محوری در مدل‌سازی و از طرف دیگر، به منظور تصدیق نتایج شبیه سازی از طریق مقایسه با نتایج تجربی، نمونه‌های آزمون‌های کشش تک محوری، خمش سه نقطه‌ای و ضربه سرعت پایین تولید و مورد آزمایش قرار گرفتند. مواد مورد استفاده، روش آماده‌سازی نمونه‌ها و آزمایش‌های خواص

در این تحقیق، سه مدل مواد معرفی می‌شوند تا رفتار الاستیک غیر خطی نمونه‌های نانوکامپوزیتی را تشریح کنند.

۱-۲- مدل آگدن

در این مدل، تابع چگالی انرژی کرنشی به طور مستقیم، طبق رابطه (۳)، بر حسب نسبت‌های کشیدگی اصلی نوشته می‌شود [۱۶].

$$W = \sum_{i=1}^N \frac{2\mu_i}{\alpha_i} (\lambda_1^{\alpha_i} + \lambda_2^{\alpha_i} + \lambda_3^{\alpha_i} - 3) \quad (3)$$

μ_i و α_i ، ثابت‌های مواد می‌باشند که توسط داده‌های آزمایش کششی محاسبه می‌شوند.

۲-۲- مدل مارلو

در مدل مارلو، رابطه صریحی بین چگالی انرژی کرنشی و ناوردهای کرنش یا نسبت کشیدگی‌های اصلی وجود ندارد. در این مدل، فرض می‌شود که چگالی انرژی کرنشی تابعی از اولین نوردای تانسور کرنش طبق رابطه (۴) است [۱۵].

$$W = W(I_1) \quad (4)$$

از آنجایی که برای مواد غیرقابل تراکم $I_3 = 0$ است، بنابراین I_1 می‌تواند به صورت رابطه (۵) نوشته شود.

$$I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \frac{1}{\lambda_1^2 \lambda_2^2} \quad (5)$$

رابطه (۵) نشان می‌دهد که کمترین و بیشترین مقدار I_1 بین ۳ تا $+\infty$ است. شکل تک محوری I_1 از رابطه (۵) $(\lambda_1 = (\lambda_1)^{-0.5})$ به صورت رابطه (۶) نوشته می‌شود.

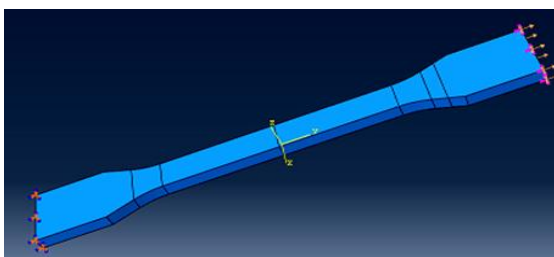
$$I_1 = \lambda^2 + \frac{2}{\lambda} \quad (6)$$

لازم به ذکر است که تغییر I_1 در رابطه (۶) نیز، بین ۳ و $+\infty$ است؛ بنابراین نتیجه می‌شود که داده‌های آزمایش کشش تک محوری می‌توانند برای محاسبه چگالی انرژی کرنشی مورد استفاده قرار گیرند. برای رسیدن به این هدف در یک مسئله عمومی، در ابتدا I_1 محاسبه و سپس مقدار λ از رابطه (۶) بدست می‌آید. با داشتن λ ، تنش از داده‌های آزمایش تک محوری نتیجه شده، چگالی انرژی کرنشی از رابطه (۷) محاسبه می‌شود.

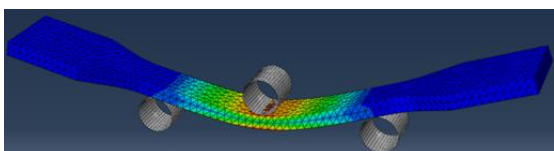
$$W(I) = \int_0^{\lambda(I)-1} \sigma(\epsilon) d\epsilon \quad (7)$$

دلیل، روش دینامیکی ضمنی برای حل مدل‌سازی در حالت خمش، مورد استفاده قرار می‌گیرد.

مطابق با روش استاندارد آزمون خمش، نمونه روی دو تکیه‌گاه غلتکی کاملاً مقید قرار داده شده، از طریق حرکت استوانه صلب وسطی با سرعت ثابت 10 mm/min تحت بارگذاری سه نقطه‌ای قرار می‌گیرد. تکیه‌گاه‌های غلتکی و عامل بارگذاری به صورت استوانه‌هایی با المان پوسته‌ای صلب (R3D4) مدل شده‌اند. شعاع غلتک‌ها طبق استاندارد آزمون خمش، ۵ میلی‌متر در نظر گرفته شده است. نیروی وارد شده از طرف غلتک صلب میانی به نمونه و جابجایی آن به عنوان خروجی مورد نظر استخراج شده‌اند. در مدل عددی از المان سه بعدی چهاروجهی با یک گره در هر راس و با هندسه مرتبه دوم^۵، با نام C3D10M استفاده شده است. این مدل، دارای ۱۶۷۲۹ گره و ۱۰۴۷۴ المان با اندازه ۲ میلی‌متر است. شکل ۲، مدل مورد نظر را در نرم افزار آباکوس نشان می‌دهد.



شکل ۱- مدل آزمایش کشش تک محوری در نرم افزار



شکل ۲- مدل آزمایش خمش سه نقطه ای در نرم افزار

۳-۳- شبیه سازی آزمایش ضربه سرعت پایین

برای شبیه سازی آزمایش ضربه از مدل مشابه آزمایش کشش استفاده شده با این تفاوت که شکل و شرایط تکیه گاهی و بارگذاری آن طبق استاندارد مربوط به آزمایش ضربه سرعت پایین است. لازم به ذکر است که المان پوسته‌ای صلب

مکانیکی، بر اساس [۱۷] انجام شده‌اند، با این تفاوت که از ۱٪ وزنی از نانوذرات مختلف در تهیه نمونه‌ها استفاده شده است و مقادیر بدست آمده از آزمایش‌های مختلف، در بخش ۴ ارائه شده‌اند.

۳-۱- شبیه سازی آزمایش کشش تک محوری

شبیه سازی آزمایش کشش روی نمونه‌های استاندارد که از نظر ابعاد و شرایط تکیه‌گاهی دقیقاً مشابه نمونه آزمایش واقعی می‌باشند، با بکارگیری توابع پتانسیل چگالی انرژی کرنشی مختلف ذکر و با استفاده از مدل‌سازی هایپرالاستیک، انجام شده است. لازم به ذکر است که روش دینامیکی صریح^۱ برای حل مدل‌سازی در حالت کشش، مورد استفاده قرار گرفته است. این روش، برای مدل موجود نسبت به سایر روش‌ها، دارای سرعت و دقت بیشتری است. به منظور اعمال شرایط مزری در مدل‌سازی، مطابق با استاندارد آزمون کشش، یک سمت نمونه از همه جهات مقید می‌شود^۲ و سمت دیگر آن با سرعت ثابت 50 mm/min تحت کشش قرار می‌گیرد (بارگذاری گسترده).

در مدل عددی از المان سه بعدی از نوع شش وجهی با یک گره در هر راس و با هندسه خطی^۳، از نوع C3D8R استفاده شده است. این مدل، دارای ۳۳۳۰ گره^۴ و ۱۹۸۰ المان با میانگین اندازه عناصر $1/5$ میلی‌متر است. نکته قابل توجه اینکه مش‌بندی‌های متفاوت در این مدل، مورد بررسی قرار گرفته‌اند که دارای جواب یکسانی می‌باشند. شکل ۱، مدل مورد نظر را در نرم افزار آباکوس نشان می‌دهد.

۳-۲- شبیه سازی آزمایش خمش سه نقطه ای

شبیه‌سازی آزمایش خمش روی نمونه استاندارد، مشابه نمونه آزمایش و با استفاده از مدل‌سازی هایپرالاستیک انجام شده است. نتایج حل مدل خمش، توسط روش‌های دینامیکی صریح و ضمنی بسیار به هم نزدیک است؛ اما روش دینامیکی ضمنی، دارای زمان حل بسیار کمتری نسبت به روش دینامیکی صریح در مدل‌سازی آزمون خمش است. به همین

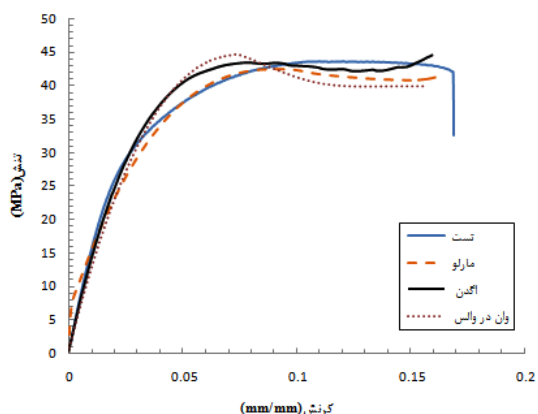
¹ Dynamic/Explicit

² Encastre

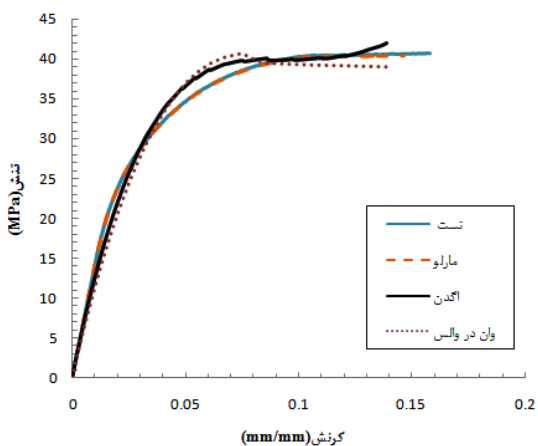
³ Linear

⁴ Node

⁵ Quadratic



شکل ۵- نمودار تنش- کرنش مهندسی نمونه PHA



شکل ۶- نمودار تنش- کرنش مهندسی نمونه PMCM

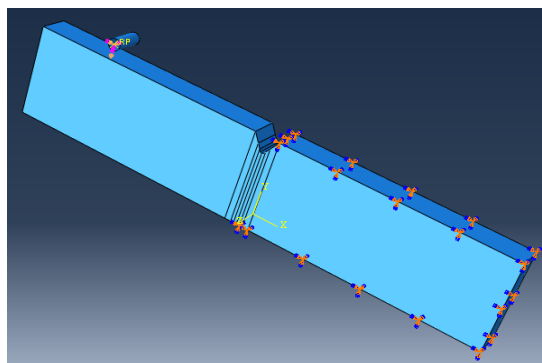
جدول ۱- مقادیر حاصل از آزمایش کشش تک محوری نمونه

PMH		
	مدول الاستیک (MPa)	استحکام کششی (MPa)
آزمایش	۱۴۷۶/۵۱	۴۲/۶۰
مارلو	۱۴۸۶/۷۰	۴۲/۳۵
آگدن	۶۶۰/۷۶	۴۸/۹۲
وان در والس	۵۵۵/۹۰	۵۱/۷۱

جدول ۲- مقادیر حاصل از آزمایش کشش تک محوری نمونه

PHA		
	مدول الاستیک (MPa)	استحکام کششی (MPa)
آزمایش	۱۵۲۰/۲۰	۴۲/۵۰
مارلو	۱۷۱۴/۰۸	۴۳/۵۴
آگدن	۱۲۳۹/۱۶	۴۴/۴۸
وان در والس	۱۱۲۳/۳۳	۴۵/۵۲

(R3D4) برای مدل کردن چکش، مورد استفاده قرار گرفت. این مدل، دارای ۲۹۱۶۰ گره و ۲۴۸۹۴ المان و با اندازه ۱/۵ میلی‌متر است (شکل ۳).



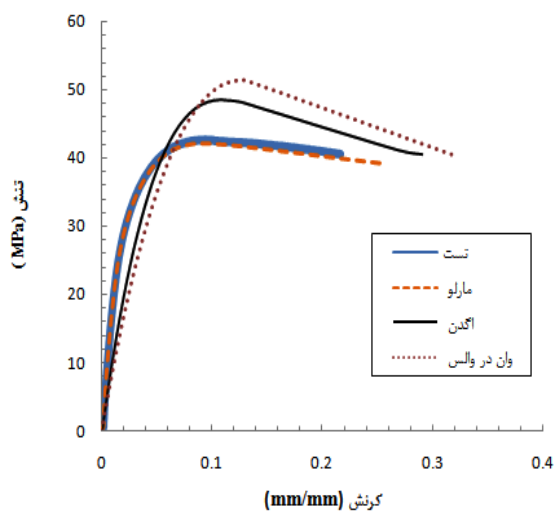
شکل ۳- مدل آزمایش ضربه سرعت پایین در نرم افزار

۴- نتایج و بحث

۴-۱- آزمایش کشش تک محوری

دیاگرام‌های تنش-کرنش مهندسی مربوط به نمونه‌های PHA، PMH و PMCM برای هر دو حالت آزمایش و شبیه‌سازی و برای توابع پتانسیل چگالی انرژی کرنشی ذکر شده، به ترتیب در اشکال ۴ تا ۶ نشان داده شده‌اند.

با استفاده از نمودارهای تنش-کرنش، مقادیر استحکام کششی و مدول الاستیک برای نمونه‌های مختلف محاسبه و در جداول ۱ تا ۳ ارائه شده‌اند.



شکل ۴- نمودار تنش- کرنش مهندسی نمونه PMH

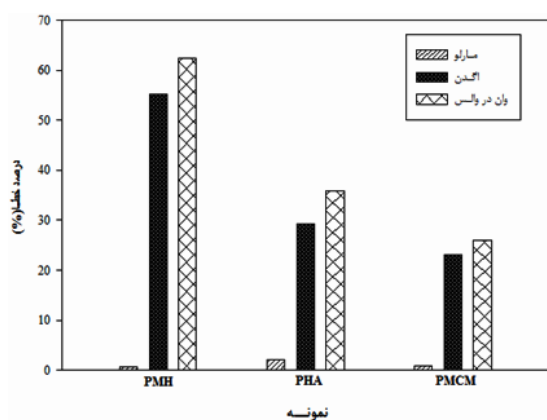
جدول ۳- مقادیر حاصل از آزمایش کشش تک محوری نمونه

	PMCM	
	مدول الاستیک (MPa)	استحکام کششی (MPa)
آزمایش	۱۳۵۵/۰۵	۳۹/۰۵
مارلو	۱۳۶۷/۸۱	۳۹/۷۳
اگدن	۱۰۴۲/۸۵	۴۱/۳۱
وان در والس	۱۰۰۳/۵۷	۴۱/۸۴

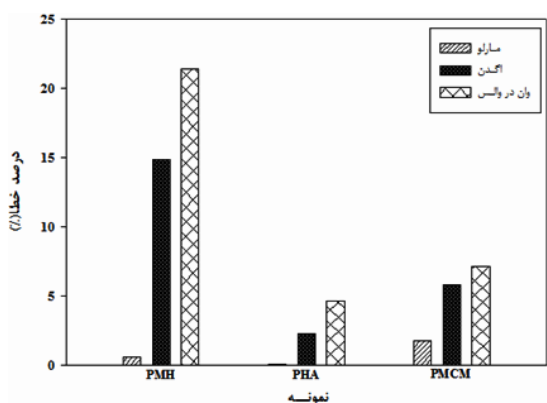
بنابراین برای انجام شبیه سازی سایر خواص مکانیکی، از این مدل استفاده می‌شود.

به منظور صحت سنجی نتایج بدست آمده، نتایج تعدادی از تحقیقات صورت گرفته توسط سایر محققان مورد بررسی قرار گرفته است.

شکل ۹، نمودار تنش- کرنش بدست آمده از شبیه‌سازی آزمون کشش تک محوری مربوط به نمونه‌ای از جنس پلی آمید، با استفاده از توابع چگالی انرژی کرنشی مارلو، یو، وان در والس، اگدن و آرودا-بویس را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۹ مشخص است، مدل مارلو بهترین تطابق را با نتایج آزمایشگاهی دارد و بعد از آن مدل‌های اگدن و وان در والس، از دقت بیشتری نسبت به سایر توابع انرژی کرنشی برخوردارند [۱].



شکل ۷- نمودار درصد خطای مدول الاستیک برای توابع چگالی انرژی کرنشی و نمونه‌های مختلف



شکل ۸- نمودار درصد خطای استحکام کششی برای توابع چگالی انرژی کرنشی و نمونه‌های مختلف

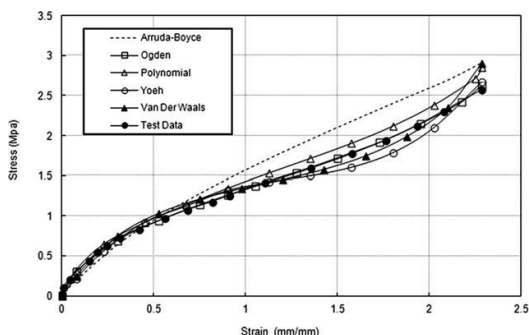
به منظور دستیابی به بهترین و کم خطاترین مدل تابع چگالی انرژی کرنشی برای نمونه‌های مختلف، میزان خطای پارامترهای مدول الاستیک و استحکام کششی شبیه‌سازی‌ها نسبت به نتایج آزمایشگاهی به ترتیب در اشکال ۷ و ۸ نشان داده شده‌اند. به عنوان نمونه، محاسبه میزان خطا برای مدول الاستیک به صورت رابطه (۱۰) است. برای محاسبه استحکام کششی نیز، از رابطه مشابه استفاده شده است.

$$\text{Error (\%)} = \frac{E_{\text{sim.}} - E_{\text{exp.}}}{E_{\text{exp.}}} * 100 \quad (10)$$

که در رابطه (۱۰)، $E_{\text{sim.}}$ مدول الاستیک کششی شبیه‌سازی و $E_{\text{exp.}}$ مدول الاستیک کششی تجربی می‌باشند.

نتایج فوق نشان می‌دهند که میزان خطا برای پارامترهای مختلف، به ترتیب برای مدل‌های وان در والس، اگدن و مارلو کاهش می‌یابد و بهترین تطابق بین شبیه‌سازی و داده‌های آزمایش، مربوط به مدل مارلو است. با توجه به روابط (۳) و (۸)، توابع چگالی انرژی کرنشی اگدن و وان در والس دارای پارامترهای مربوط به جنس مواد می‌باشند که با استفاده از الگوریتم‌های بر مبنای انطباق منحنی^۱ بر داده‌های تنش- کرنش حاصل از آزمایش، محاسبه می‌شوند. بر خلاف این مدل‌ها، در تابع چگالی انرژی کرنشی مارلو، نیازی به محاسبه ثابت‌های مواد به طور مستقیم نمی‌باشد و داده‌های تنش- کرنش حاصل از آزمایش‌های کششی تک محوری به طور مستقیم در رابطه (۷) جاگذاری می‌شوند؛ بنابراین خطاهای ناشی از انطباق منحنی در مدل مارلو کاهش می‌یابد و این مدل، دقیق‌ترین جنس مواد را در شرایط استفاده از داده‌های آزمایش کشش تک محوری، شبیه‌سازی می‌کند [۱۵]؛

^۱ Curve-Fitting



شکل ۱۱- نمودار تنش-کرنش شبیه سازی و آزمایش کشش تک محوری [۴]

۴-۲- آزمایش خمش سه نقطه ای

دیاگرام‌های تنش-کرنش خمشی حاصل از آزمایش خمش مربوط به نمونه‌های PMH، PHA و PMCM برای هر دو حالت آزمایشگاهی و شبیه‌سازی و برای تابع انرژی پتانسیل چگالی کرنشی مارلو، بهترین مدل بدست آمده از خواص کششی، به ترتیب در اشکال ۱۲ تا ۱۴ نشان داده شده‌اند.

مقادیر مدول و استحکام خمشی، از نمودارهای فوق استخراج شده، در جداول ۴ و ۵ ارائه شده‌اند. استحکام خمشی، بیشترین مقدار تنش حاصل از نمودار تنش-کرنش است و مدول خمشی، از رابطه (۱۱) محاسبه می‌شود.

$$E_B = \frac{L^3 m}{4bd^3} \quad (11)$$

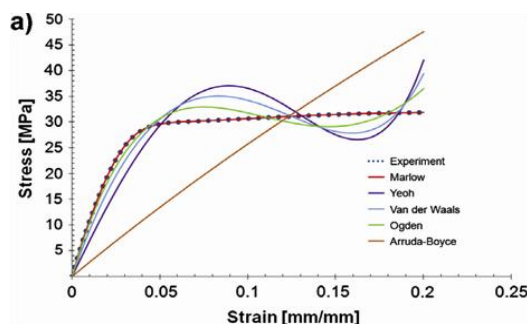
در رابطه (۱۱) E_B مدول خمشی، L فاصله بین دو تکیه گاه، b عرض تیر، d ضخامت تیر و m شیب خط مماس بر منحنی نیرو-تغییر شکل می‌باشند.

دیاگرام درصد خطای مدول و استحکام خمشی نتایج شبیه سازی نسبت به داده‌های آزمایش خمش سه نقطه‌ای برای نمونه‌های مختلف در شکل ۱۵ نشان داده شده است. با توجه به اینکه میزان خطا برای پارامترهای خمشی در مدل مارلو نسبت به نتایج آزمایش بین ۸٪ تا ۱۲٪ است، می‌توان نتیجه گرفت که این مدل، دارای دقت بالایی در توصیف آزمون خمش سه نقطه‌ای مشابه آزمایش کشش تک محوری است. همخوانی نتایج بدست آمده با مقادیری که توسط سایر محققان [۱ و ۲ و ۵] روی نانوکامپوزیت‌های دیگر ارائه شده‌اند، نشان از صحت نتایج عددی در آزمون خمش سه نقطه‌ای دارد.

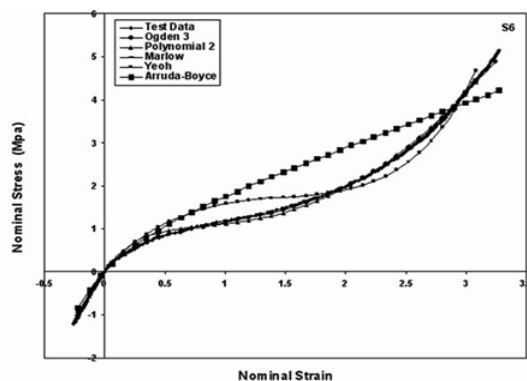
شکل ۱۰، رفتار تنش-کرنش نانوکامپوزیت‌های NR/EPDM در [۹] را نشان می‌دهد. در این مقاله، توابع چگالی انرژی کرنشی مارلو، یو، چندجمله‌ای، اگدن و آرودا-بویس، مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این تحقیق نیز توابع چگالی مارلو و اگدن را بر اساس نتایج بدست آمده، دقیق‌تر از سایر توابع چگالی معرفی می‌کند.

شکل ۱۱، نمودار تنش-کرنش شبیه‌سازی و آزمایش رفتار هایپیرلاستیک نمونه نانو کامپوزیتی Polybutadiene/Ethylene-Propylene را نشان می‌دهد [۴]. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که مدل اگدن، دقت بالاتری نسبت به مدل وان در والس در پیش بینی رفتار نمونه‌های مورد بحث دارد.

لازم به ذکر است که تطابق نتایج ارائه شده توسط سایر محققان، با نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی انجام شده در تحقیق حاضر، مقادیر عددی بدست آمده در شبیه‌سازی آزمون کشش تک محوری را تصدیق می‌کند.



شکل ۹- نمودار تنش-کرنش شبیه سازی آزمایش کشش تک محوری [۱]



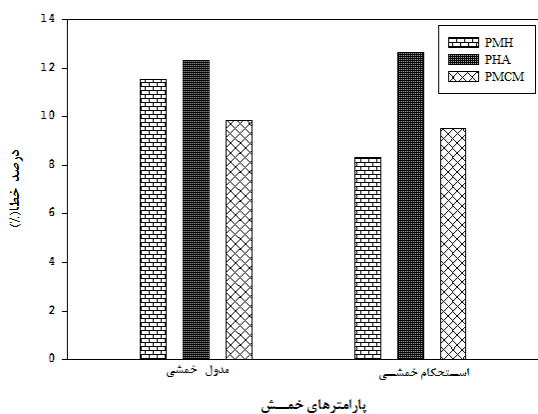
شکل ۱۰- نمودار تنش-کرنش شبیه سازی و آزمایش کشش تک محوری [۹]

جدول ۴- مقادیر استحکام خمشی نمونه‌های مختلف

	برحسب (MPa)		
	PMH	PHA	PMCM
آزمایش	۴۶/۷۰	۴۱/۸۰	۴۴/۶۰
شبیه سازی	۵۵/۷۳	۴۷/۰۸	۴۸/۸۴

جدول ۵- مقادیر مدول خمشی نمونه‌های مختلف

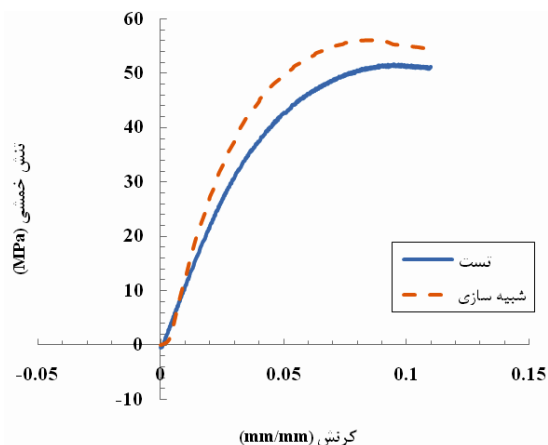
	برحسب (MPa)		
	PMH	PHA	PMCM
آزمایش	۱۳۷۰	۱۱۷۶/۰۳	۱۲۹۰
شبیه سازی	۱۵۲۸/۳۱	۱۳۲۰/۷۲	۱۴۱۶/۹۴



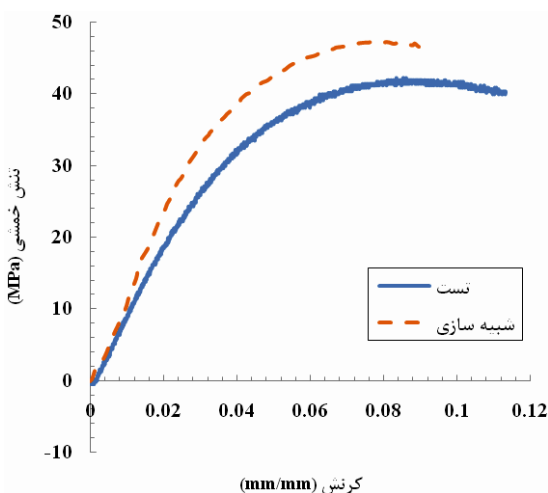
شکل ۱۵- نمودار درصد خطای مدول و استحکام خمشی نمونه‌های مختلف

۴-۳- آزمایش ضربه سرعت پایین

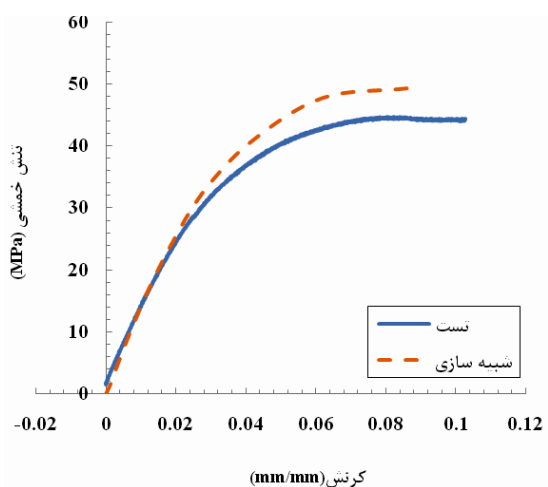
در جدول ۶، مقدار انرژی جذب شده حاصل از شبیه‌سازی مدل مارلو و آزمایش ضربه سرعت پایین ارائه شده است. برای محاسبه مقدار انرژی جذب شده، نمونه مطابق با شرایط آزمایش تحریک شده و نرم افزار پس از انجام محاسبات با استفاده از روش تئوری انتخاب شده، نمودارهای انرژی جذب شده برحسب زمان را ارائه می‌دهد که میزان انرژی جذب شده از روی این نمودارها استخراج می‌شود. در شکل ۱۶، اختلاف بین نتایج شبیه سازی و آزمایش برای نمونه‌های مختلف در آزمایش ضربه سرعت پایین ارائه شده است. خطای بسیار کمی که در مقایسه بین نتایج شبیه سازی و آزمایش برای مدل مارلو بدست آمده است، نشان از دقت



شکل ۱۲- نمودار تنش-کرنش خمشی نمونه PMH



شکل ۱۳- نمودار تنش-کرنش خمشی نمونه PHA



شکل ۱۴- نمودار تنش-کرنش خمشی نمونه PMCM

مارلو برای آزمایش‌های خمش سه نقطه‌ای و ضربه سرعت پایین، با توجه به مقادیر اندک خطاها، نشان از دقت بسیار بالای این مدل در آزمایش‌های ذکر شده دارد. انطباق بسیار خوب نتایج شبیه سازی با داده‌های آزمایشی، نشان می‌دهد که روش شبیه‌سازی مذکور، از دقت قابل قبولی برخوردار است و می‌تواند به عنوان یک روش منسجم جهت مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری، مورد استفاده قرار گیرد. از طرفی در صورت استفاده از این روش مدل سازی، می‌توان با انجام آزمایش ساده کشش تک محوری جنس مواد را با دقت بالایی شبیه‌سازی کرده، رفتار نانوکامپوزیت‌ها را در سایر آزمایش‌های خواص مکانیکی بدون نیاز به نمونه سازی و آزمایش تجربی، پیش بینی کرد که این موضوع، سبب صرفه‌جویی قابل توجهی در زمان و هزینه جهت دستیابی به خواص مکانیکی مطلوب نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری می‌شود.

۶- فهرست علائم

ناوردای کرنش	I
تابع چگالی انرژی کرنشی، J	W
ثابت وابسته به جنس ماده	a
مدول الاستیک کششی، MPa	E
مدول الاستیک خمشی، MPa	E _B
طول تیر، m	L
عرض تیر، m	b
ضخامت تیر، m	d
شیب خط مماس بر منحنی تنش-کرنش	m
کشیدگی اصلی	λ
ثابت وابسته به جنس ماده	μ
ثابت وابسته به جنس ماده	α
تنش، MPa	σ
کرنش	ε
ثابت وابسته به جنس ماده	β

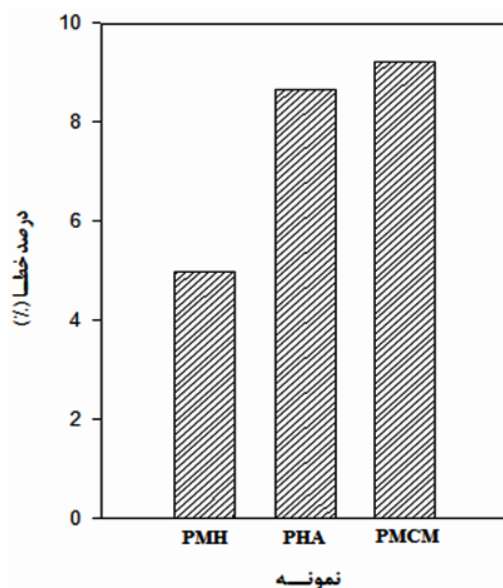
۷- مراجع

- [1] Andrei D, Mars L, Silberschmidt V (2012) Behaviour of semi-crystalline thermoplastic polymers: Experimental studies and simulations. *Comp Mater Sci* 52: 139-146.

بسیار بالای این مدل در شبیه سازی آزمایش ضربه سرعت پایین دارد.

جدول ۶- مقادیر انرژی جذب شده در آزمایش ضربه سرعت پایین بر حسب (J/m)

	PMH	PHA	PMCM
آزمایش	۳۰/۱۵	۲۷/۸۳	۲۵/۲۱
شبیه سازی	۳۱/۶۵	۳۰/۲۴	۲۷/۵۳



شکل ۱۶- نمودار درصد خطای میزان انرژی جذب شده در آزمایش ضربه برای نمونه‌های مختلف

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های متخلخل پلیمری PMH، PHA و PMCM به صورت عددی، مورد مطالعه قرار گرفته است. شبیه‌سازی عددی بارگذاری‌های کششی تک محوری، خمش سه نقطه‌ای و ضربه سرعت پایین برای مواد هایپرالاستیک با توابع چگالی انرژی کرنشی مختلف و برای نانوکامپوزیت‌های PHA، PMCM و نانوهیبرید PMH انجام شده است. نتایج بدست آمده از شبیه سازی آزمایش کشش تک محوری، حاکی از آن است که مدل مارلو نسبت به مدل‌های اگدن و وان در والس منطبق‌ترین نتایج شبیه سازی را نسبت به داده‌های آزمایش در آزمون کشش داراست. بعلاوه مقایسه بین نتایج شبیه سازی و آزمایش مدل

- properties and stress-strain behavior of NR/EPDM nanocomposites. *J Appl Polym Sci* 127(2): 1275-1284.
- [10] Saavedra Flores EI, Dhikari S, Friswell MI, Scarpa F (2011) Hyperelastic finite element model for single wall carbon nanotubes in tension. *Comp Mater Sci* 50(1): 1083-1087.
- [11] David C, David I, Shreiber Emilios K, Dimitriadis FH (2009) Spherical indentation of soft matter beyond the Hertzian regime: numerical and experimental validation of hyperelastic models. *Biomech Model Mechanobiol* 8: 345-358.
- [12] Danielsson M, Parks DM, Boyce MC (2004) Constitutive modeling of porous hyperelastic materials. *Mech Mater* 36(4): 347-358.
- [13] Bonet J, Wood RD (1997) *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. Melbourne: Cambridge University Press.
- [14] Shabana AA (2008) *Computational continuum mechanics*. Melbourne: Cambridge University Press.
- [15] British Standard BS 903-5 (2004) *Physical testing of rubber – Part 5: Guide to the application of rubber testing to finite element analysis*.
- [16] Ogden RW (1972) Large Deformation isotropic elasticity - on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. *Proceedings Royal Society*: 565-584.
- [17] Memarian S, Fereidoon A, Albooyeh AR, Tarahomi S (2014) Influence of mesoporous silica and hydroxyapatite nanoparticles on the mechanical and morphological properties of polypropylene. *Mater Design* 57: 201-210.
- [2] Sasso M, Palmieri G, Chiappini G, Amodio D (2008) Characterization of hyperelastic rubber-like materials by biaxial and uniaxial stretching tests based on optical methods. *Polym Test* 27(8): 995-1004.
- [3] Kim B, Lee S, Lee J, Cho S, Park H, Yeom S, Park S (2011) A comparison among neo-hookean model, mooney-rivlin model, and ogden model for chloroprene rubber. *IJPEM* 13(5): 759-764.
- [4] Shokoohi S, Naderi G, Kharazmkia M, Ghoreishy MH (2015) Hyperelastic model analysis of stress-strain behavior in polybutadiene/ethylene-propylene diene terpolymer nanocomposites. *J Vinyladdit Technol*.
- [5] Arriga A, Lazkano JM, Pagaldai R, Zaluda AM, Hernandez R, Atxurra R, Chrysostomou A (2007) Finite-element analysis of quasi-static characterization tests in thermoplastic materials: Experimental and numerical analysis results correlation with ANSYS. *Polym Test* 26: 854-869.
- [6] Avallè M, Belingardi G, Montanini R (2001) Characterization of polymeric structural foams under compressive impact loading by means of energy-absorption diagram. *Int J Impact Eng* 25: 455-472.
- [7] Viot P (2009) Hydrostatic compression on polypropylene foam. *Int J Impact Eng* 36(7): 975-989.
- [8] Pawlikowski M (2013) Non-linear approach in visco-hyperelastic constitutive modelling of polyurethane nanocomposite. *Mech Time-Depend Mater* 10: 1043-1056.
- [9] Alipour A, Naderi G, Ghoreishy H (2013) Effect of nanoclay content and matrix composition on