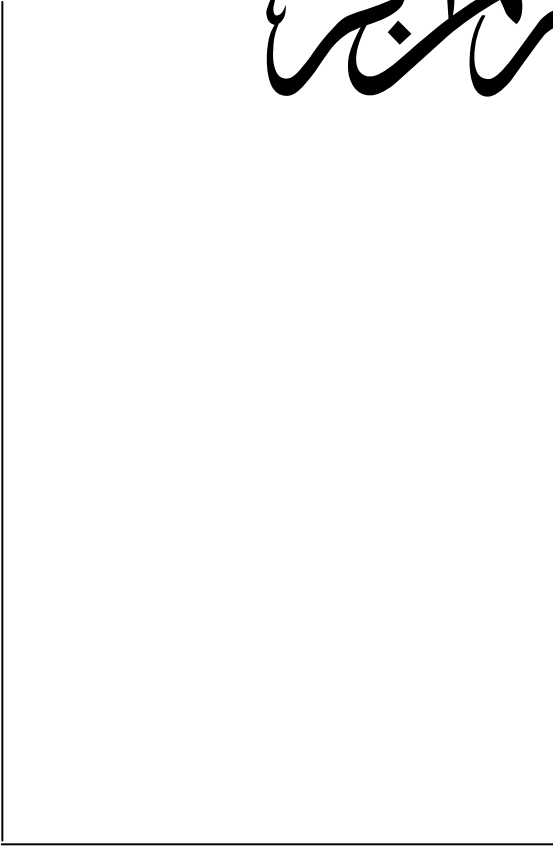


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ





مدلسازی و ساخت نانوکامپوزیت پلیمر / خاک رس

دانشجو:

سید احسان سنبلستان

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی

استاد راهنما:

دکتر محمود مهرداد شکریه

اسفندماه ۱۳۸۴

تقديم به:

خانواده دلسوزم

تشکر و قدردانی:

بدینوسیله از راهنمایی و یاری بی دریغ جناب آقای دکتر شکریه و کمکهای دائمی جناب آقای دکتر کفاشی کمال تشکر و قدردانی انجام می‌گیرد.

از خانم مهندس پورسنگ و آقای مهندس فخار به خاطر همراهیشان در راستای پروژه سپاسگذاری می‌شود. که نتیجه حاصله مدیون همکاری صمیمانه این دوستان می‌باشد.

همچنین، از آزمایشگاههای دانشگاه تهران، دانشگاه تربیت مدرس، دانشگاه اصفهان و مرکز زمین‌شناسی ایران به خاطر انجام آزمایشهای شناسایی ساختار تشکر به عمل می‌آید.

از مؤسسه کامپوزیت ایران به خاطر تقبل هزینه‌های مالی پروژه قدردانی می‌شود.

چکیده

حصول ویژگیهای خاص مواد نانوکامپوزیت، به عنوان یکی از کاربردی‌ترین زمینه‌ها در انقلاب فناوری نانو، ناشی از وجود مؤلفه‌هایی در حد نانو در سیستم آنها می‌باشد. نوع نانوذرات پرکننده کامپوزیت و نوع پلیمر مؤلفه زمینه آن از عوامل بسیار تأثیرگذار در خواص نهایی نانوکامپوزیت می‌باشند. در این تحقیق، با شناخت کافی و ارائه توجیحات مناسب، نوع ویژه‌ای نانوحاک رس و پلی‌یورتان به عنوان پرکننده و زمینه انتخاب شده‌اند. جهت شناسایی مواد مناسب از آزمایشات فراکنی اشعه ایکس و ویسکومتری استفاده شده است. با توجه به پیچیدگیها و هزینه‌های زیاد آزمایشات و نتایج تجربی، تکنیکهای مدلسازی برای محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پلیمری مسئله‌ای مناسب برای این مواد پیشرفته و نو می‌باشند. با وجود روشهای متنوع، در این تحقیق، روشهای تحلیلی و عددی برای پیش‌بینی خواص استفاده شده‌اند. روشهای مدل ویت، مدل ریوس، اشلیبی رقیق، موری تاناکا، هالپین تسای، مدل خودسازگاری به عنوان روشهای تحلیلی استفاده شده‌اند. در کنار مدل‌های به کارگرفته شده برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای مدل مرزی نیز در این تحقیق برای اولین بار برای نانوکامپوزیتهای استفاده شد. مطابقت خوب این مدل با مدل‌های دیگر مناسب بودن این روش را نشان می‌دهد. روابط مربوط به ساختار تشکیلی نانوذرات نیز ارائه شده‌اند. در این مدل‌ها اثرات پارامترهای درصد حجمی خاک رس، نسبت منظری ذرات و نسبت مدول الاستیسیته ذرات به زمینه بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت بررسی شده‌اند. مدل عددی ارائه شده در این تحقیق، مدل المان محدود می‌باشد. در این مدل اثرات رویهم رفتگی ذرات، فاصله افقی بین ذرات، طول ذرات و درصد حجمی خاک رس بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت بررسی شده‌اند. نتایج حاصل از هر دو مدل با هم مقایسه می‌شوند و صحت نتایج با قیاس بین داده‌های تجربی و محاسبه شده نشان داده می‌شود. چند عامل محدودکننده استفاده از این پارامترهای مؤثر نیز مورد بررسی قرار گرفتند.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل ۱ مقدمه
۲	۱-۱. مقدمه کلی.....
۴	۲-۱. مقدمه‌ای بر نانو فناوری.....
۴	۱-۲-۱. نانو فناوری.....
۵	۲-۲-۱. تاریخچه نانو فناوری.....
۸	۳-۲-۱. تعریف نانو فناوری.....
۹	۳-۱. نانوکامپوزیت.....
۹	۱-۳-۱. مقدمه ای بر نانوکامپوزیت.....
۹	۲-۳-۱. تعریف نانوکامپوزیت‌ها.....
۱۱	۳-۳-۱. تقسیم بندی مواد نانوکامپوزیت.....
۱۲	۴-۳-۱. کاربردهای نانوکامپوزیت‌های پلیمری.....
۱۶	۵-۳-۱. مزایا و معایب نانوکامپوزیت‌ها.....
۱۸	فصل ۲ ساخت نانوکامپوزیت و آزمایشات
۱۹	۱-۲. مقدمه.....
۲۰	۲-۲. سیلیکات لایه‌ای.....
۲۰	۱-۲-۲. ساختار و خواص سیلیکات لایه‌ای.....
۲۲	۲-۲-۲. ساختار و خواص سیلیکات لایه‌ای اصلاح شده.....
۲۴	۳-۲. پلی یورتان.....
۲۴	۱-۳-۲. مقدمه.....
۲۴	۲-۳-۲. معرفی پلی یورتانها.....

۲۵ شیمی الاستومرهای پلی یورتان	۳-۳-۲
۲۷ پلی یورتان ترموپلاستیک	۴-۳-۲
۲۸ نانوکامپوزیتهای سیلیکات لایه‌ای / پلیمر	۴-۲
۲۸ انواع نانوکامپوزیتهای سیلیکات لایه‌ای / پلیمر	۱-۴-۲
۳۰ روشهای ساخت نانوکامپوزیتهای پلیمر - خاک رس	۲-۴-۲
۳۴ نانوکامپوزیتهای بر پایه پلی یورتان	۵-۲
۳۵ روش ساخت پیشنهادی برای نانوکامپوزیت پلی یورتان / خاک رس	۶-۲
۳۵ مقدمه	۱-۶-۲
۳۶ مواد پیشنهادی و روش ساخت	۲-۶-۲
۳۸ انتخاب نانو خاک رس مناسب	۷-۲
۳۸ مقدمه	۱-۷-۲
۴۱ آزمایشات ویسکومتری	۲-۷-۲
۴۷ آزمایشات WXR	۳-۷-۲

فصل ۳ مدلسازی به روش تحلیلی

۴۹		
۵۰ مقدمه	۱-۳
۵۱ مروری بر مدلسازی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت پلیمری	۲-۳
۵۱ نگاهی بر روشهای مدلسازی	۱-۲-۳
۵۳ روشهای پیوستگی	۲-۲-۳
۵۷ مدلسازی ملکولی	۳-۲-۳
۵۷ آشنایی با مدلسازی نانو ذرات خاک رس	۳-۳
۵۷ انواع نحوه توزیع نانو خاک رسها در ماتریس	۱-۳-۳
۶۰ مدلسازی نانو خاک رس لایه لایه شده	۲-۳-۳
۶۳ مدلسازی نانو خاک رس به شکل توده ای	۳-۳-۳
۷۵ ایجاد ناحیه بین فازی در نانوکامپوزیتهای پلیمر / خاک رس	۴-۳-۳
۷۶ مدلسازی تحلیلی نانوکامپوزیتهای پلیمر / خاک رس	۴-۳
۷۶ تعاریف اولیه	۱-۴-۳
۸۳ مدل ویت	۲-۴-۳
۸۴ مدل ریوس	۳-۴-۳
۸۵ مدل اشلیبی رقیق	۴-۴-۳
۸۶ مدل موری-تاناکا	۵-۴-۳
۸۶ مدل خود سازگار	۶-۴-۳
۸۷ مدل‌های مرزی	۷-۴-۳
۸۸ مدل هالپین-تسای	۸-۴-۳

۸۹	۵-۳. بررسی اثرات پارامترهای مختلف.....
۸۹	۳-۵-۱. اثر نسبت حجمی.....
۹۰	۳-۵-۲. اثر نسبت منظری.....
۹۱	۳-۵-۳. اثر نسبت سفتی ذرات به ماتریس.....

۹۳ فصل ۴ مدل‌سازی به روش عددی

۹۴	۴-۱. مقدمه.....
۹۴	۴-۲. استراتژی طرح مسئله.....
۹۹	۴-۳. ویژگیهای کلی مدل‌های المان محدود.....
۱۰۰	۴-۴. انتخاب شرایط مرزی مناسب.....
۱۰۲	۴-۵. شرح مدل کلی جهت بررسی پارامترهای مؤثر روی رفتار نانوکامپوزیتها.....
۱۰۷	۴-۶. مطالعه موردی و بررسی اثرات پارامترهای مختلف بر روی خواص نانوکامپوزیت.....
۱۰۷	۴-۶-۱. مقدمه.....
۱۰۷	۴-۶-۲. اثر درصد نسبی حجم خاک رس.....
۱۱۰	۴-۶-۳. اثر نسبت منظری.....
۱۱۱	۴-۶-۴. اثر روی هم رفتگی ذرات.....
۱۱۲	۴-۶-۵. اثر فاصله افقی بین لایه های خاک رس.....

۱۱۵ فصل ۵ ارزیابی و مقایسه نتایج

۱۱۶	۵-۱. مقدمه.....
۱۱۶	۵-۲. مقایسه اثرات تغییر درصد حجمی خاک رس.....
۱۲۰	۵-۳. انتقال بار به ذرات خاک رس.....
۱۲۱	۵-۴. بررسی کماتش ذرات.....

۱۲۴ فصل ۶ نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۱۲۵	۶-۱. نتیجه گیری.....
۱۲۶	۶-۲. پیشنهادات.....

۱۲۸ مراجع

۱۳۲ پیوست

فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۵	شکل ۱-۱. یک نانومترچه اندازه ای میباشد؟
۱۰	شکل ۱-۲. تفاوت نوع توزیع و نظم قرار گیری سطوح در نانوکامپوزیتها
۱۴	شکل ۱-۳. نمونه از کاربرد نانوکامپوزیت پلیمر / خاک رس در خودرو
۱۵	شکل ۱-۴. مومهای نانوکامپوزیت جهت بسته بند]
۲۲	شکل ۲-۱. ساختار شبه سیلیکات ۲:۱
۲۴	شکل ۲-۲. آرایش یونهای آلکیل آمونیوم در سیلیکاتهای لایه ای از نوع میکا با شارژهای مختلف لایه ای
۲۵	شکل ۲-۳. فرمولاسیون منومر یورتان
۲۷	شکل ۲-۴. ساختار شیمیایی بوتان دی ال ۱،۴ و موکا
۲۷	شکل ۲-۵. نحوه عمل زنجیر گستراننده ها را روی پیش پلیمر
۲۹	شکل ۲-۶. شکل شماتیک سه نوع مختلف نانوکامپوزیتهای سیلیکات لایه ای / پلیمری
۳۰	شکل ۲-۷. (الف) مراحل مختلف فرآیند پلیمره شدن درجا(ب) نمایی از پلیمره شدن درجا
۳۲	شکل ۲-۸. (الف) مراحل مختلف فرآیند محلول (ب) نمایش فرآیند محلول
۳۳	شکل ۲-۹. نمایش مراحل مختلف تولید نانوکامپوزیت به روش مذاب
۳۷	شکل ۲-۱۰. نحوه آماده کردن قالب
۳۸	شکل ۲-۱۱. نحوه مخلوط کردن توسط همزن الکتریکی
۳۸	شکل ۲-۱۲. نحوه ریختن مواد در قالب
۴۰	شکل ۲-۱۳. میزان پایداری محلول PTMG و نانوخاک رس پس از یک مدت زمان معین
۴۱	شکل ۲-۱۴. منحنی انرژی ذخیره شده و انرژی بازیابی کشسان
۴۲	شکل ۲-۱۵. دستگاه تریومتری

- شکل ۲-۱۶. تغییرات مدول ذخیره ای در برابر افزایش کرنش ۴۳
- شکل ۲-۱۷. تغییرات مدول اتلافی در برابر افزایش کرنش ۴۳
- شکل ۲-۱۸. تغییرات مدول ذخیره ای در برابر افزایش کرنش با افزایش درصد جرمی نانوخاک رس ۴۴
- شکل ۲-۱۹. تغییرات مدول اتلافی در برابر افزایش کرنش با افزایش درصد جرمی نانوخاک رس ۴۴
- شکل ۲-۲۰. تغییرات مدول ذخیره ای تحت افزایش فرکانس برای نانوخاک رسهای مختلف ۴۵
- شکل ۲-۲۱. تغییرات مدول اتلافی تحت افزایش فرکانس برای نانوخاک رسهای مختلف ۴۵
- شکل ۲-۲۲. تغییرات ویسکوزیته تحت افزایش فرکانس برای نانوخاک رسهای مختلف ۴۶
- شکل ۲-۲۳. تغییرات ویسکوزیته در برابر نرخ برشی برای درصدهای وزنی مختلف نانوخاک رس ۴۶
- شکل ۲-۲۴. نتایج آزمایش WXR D برای ترکیب نانوخاک رسهای مختلف با PTMG ۴۸
-
- شکل ۳-۱. شماتیک پروسس توسعه تئوری و اصلاح تئوری ۵۱
- شکل ۳-۲. اندازه زمانی و طولی استفاده شده در محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیتهای پلیمری ۵۲
- شکل ۳-۳. دیاگرام تکنیکهای مدلسازی مواد ۵۳
- شکل ۳-۴. انواع کامپوزیت پلیمر / خاک رس ۵۸
- شکل ۳-۵. شکل شماتیک از نواحی ذره و ماتریس ۵۹
- شکل ۳-۶. شکل مدل‌های لایه نانو خاک رس (الف) دو بعدی ، (ب) سه بعدی ۶۰
- شکل ۳-۷. ساختار کریستالی مونتموریلونیت ۶۱
- شکل ۳-۸. شماتیک از (الف) سیستم جا داده شده و لایه لایه شده (ب) توده خاک رس جا داده شده ۶۴
- شکل ۳-۹. شماتیک از ساختار شناسی و پارامترهای رفتاری ۶۵
- شکل ۳-۱۰. تصویر TEM و آنالیز روی آن ۶۷
- شکل ۳-۱۱. ساختار بنیادی نانو خاک رس ۶۸
- شکل ۳-۱۲. وابستگی کسر حجمی سیلیکات ذره X به پارامترهای ساختاری N و $d_{(001)} / d_s$ ۷۰
- شکل ۳-۱۳. وابستگی f_p / W_c به پارامترهای ساختاری N و $d_{(001)} / d_s$ ۷۲
- شکل ۳-۱۴. المان بازتولید شده توده جاداده شده نانو لایه‌های خاک رس ۷۳
- شکل ۳-۱۵. نانو کامپوزیتهای کاملاً لایه لایه شده با ناحیه بین فازی ۷۵
- شکل ۳-۱۶. مسئله مقطع اشلیبی ۷۹
- شکل ۳-۱۷. مقطع بیضوی با شعاعهای a_1 ، a_2 و a_3 ۸۰
- شکل ۳-۱۸. مسئله مقطع معادل (الف) مقطع همجنس (ب) ناهمجنس ۸۳
- شکل ۳-۱۹. تغییرات مدول الاستیسیته (E_{11} / E_m) بر حسب کسر حجمی ذرات نانو خاک رس ۹۰
- شکل ۳-۲۰. تغییرات مدول الاستیسیته (E_{11} / E_m) بر حسب نسبت منظری ذرات ۹۱
- شکل ۳-۲۱. تغییرات مدول الاستیسیته (E_{11} / E_m) بر حسب نسبت سفتی ذرات به ماتریس ذرات ۹۲
-
- شکل ۴-۱. مدل و نحوه قرار گرفتن ذرات برای یافتن شرایط مرزی مناسب ۱۰۱

- شکل ۴-۲. کانتورهای تغییر مکان مربوط به شرایط مرزی انتخاب شده، ۱۰۳
- شکل ۴-۳. شکل‌های شماتیک از مدل تهیه شده و معرفی پارامترهای مختلف ۱۰۴
- شکل ۴-۴. شکل شماتیک مدلها برای درصد نسبی حجم خاک رس ۱۰۷
- شکل ۴-۵. تغییرات نسبی مدولهای الاستیسیته بر حسب درصد حجمی خاک رس در نانوکامپوزیت ۱۰۹
- شکل ۴-۶. شکل شماتیک مدلها برای نسبت منظری ۱۱۰
- شکل ۴-۷. تغییرات نسبی مدولهای الاستیسیته بر حسب نسبت منظری ذرات در نانوکامپوزیت ۱۱۱
- شکل ۴-۸. شکل شماتیک مدلها برای ضریب رویهم رفتگی ۱۱۲
- شکل ۴-۹. تغییرات نسبی مدولهای الاستیسیته E_{11} / E_m بر حسب ضریب رویهم رفتگی ۱۱۲
- شکل ۴-۱۰. شکل شماتیک مدلها برای فاصله افقی بین ذرات ۱۱۳
- شکل ۴-۱۱. تغییرات نسبی مدولهای الاستیسیته بر حسب فاصله افقی بین ذرات در نانوکامپوزیت ۱۱۴
- شکل ۵-۱. E_{11} برای نسبت‌های حجمی مختلف از روشهای تئوری، المان محدود و تجربی ۱۱۷
- شکل ۵-۲. E_{11} محاسبه شده از مدل‌های تئوری و عددی با فرض ذرات خاک رس ۴ لایه ای ۱۱۹
- شکل ۵-۳. اثر نسبت منظری توزیع کرنش ذره (ϵ_p) به ازای اعمال تنش محوری ۲۵۰kPa ۱۲۱

فهرست جداول

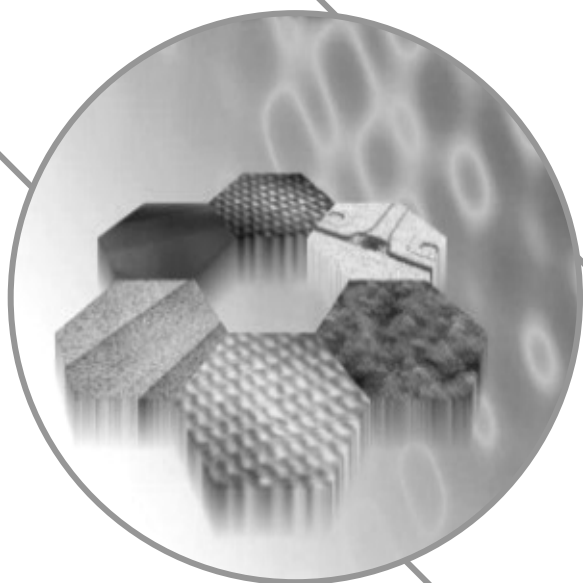
- جدول ۱-۱. لیست برخی از تأمین کنندگان مواد نانوکامپوزیت [۴۶]..... ۱۳
- جدول ۱-۲. فرمول شیمیایی و پارامتر خواص معمولی قابل استفاده شبه سیلیکات ۱:۲ [۱۵]..... ۲۲
- جدول ۲-۲. علامت اختصاری و فرمول شیمیایی مهمترین دی ایزو سیاناتها..... ۲۶
- جدول ۲-۳. انواع مختلف کلویزیت ها همراه با ساختار شیمیایی ۳۹
- جدول ۱-۳. خواص الاستیک محاسبه شده برای تک لایه سیلیکات..... ۶۳
- جدول ۲-۳. خواص مربوط به نمونه بررسی شده در مدل‌های مختلف تحلیلی..... ۸۴
- جدول ۳-۳. پارامترهای هالپین-تسای ۸۹
- جدول ۱-۴. استراتژی طرح مسئله..... ۹۷
- جدول ۲-۴. خواص مربوط به نمونه بررسی شده در مدل عددی برای کسب شرایط مرزی مناسب..... ۱۰۰
- جدول ۳-۴. انواع شرایط مرزی تحلیل شده برای یافتن شرایط مرزی مناسب..... ۱۰۱
- جدول ۴-۴. ماتریسهای سفتی و نرمی و خواص مکانیکی برای مدل همراه با انواع شرایط مرزی تحلیل شده..... ۱۰۲
- جدول ۵-۴. خواص مربوط به نمونه بررسی شده در مدل عددی برای کسب شرایط مرزی مناسب..... ۱۰۶
- جدول ۶-۴. نتایج مربوط به مدلسازی عددی برای بررسی تأثیر پارامترهای مناسب..... ۱۰۸
- جدول ۱-۵. خواص مربوط به نمونه جهت مقایسه نتایج روشهای مختلف..... ۱۱۷
- جدول ۲-۵. خواص ذرات خاک رس با ۴ لایه سیلیکات..... ۱۱۹
- جدول ۳-۵. کرنش بحرانی در آستانه کمانش لایه های خاک رس به ازای درصدهای حجمی مختلف..... ۱۲۲

فهرست علائم اختصاری

λ	طول موج اشعه X خارج شده در آزمایش WXR
G'	مدول ذخیره
G''	مدول اتلافی
E_i	مدول الاستیسیته در جهت i
G_{ij}	مدول برشی در صفحه i و j
ν_{ij}	نسبت پواسون
t	ضخامت ذره خاک رس
N	تعداد لایه های سیلیکات در ذره خاک رس
$d_{(001)}$	فاصله بین دو لایه سیلیکات در یک ذره
d_s	ضخامت یک لایه سیلیکات
X_N	تعداد ورقه های سیلیکات در واحد ضخامت ذره
$V_{silicate}$	حجم مربوط به ورقه های سیلیکات
V_P	حجم مربوط ذرات مؤثر
L	طول ذره خاک رس
f_P	کسر حجمی خاک رس
W_P	وزن ذرات خاک رس
ρ_P	دانسیتته ذرات خاک رس
$\rho_{silicate}$	دانسیتته لایه های سیلیکات
X	کسر حجمی لایه های سیلیکات
M_0	وزن ملکولی لایه های سیلیکات
A_0	سطح لایه های سیلیکات
σ_{ij}	مؤلفه تانسور تنش
ε_{ij}	مؤلفه تانسور کرنش
σ^P	تنش اعمال شده بر ذره خاک رس
C^P	ماتریس سفتی مربوط به ذره خاک رس

ε^P	کرنش اعمال شده بر ذره خاک رس
σ^m	تنش اعمال شده بر ماتریس
C^m	ماتریس سفتی مربوط به ماتریس
ε^m	کرنش اعمال شده بر ماتریس
$\bar{\sigma}$	تنش میانگین بر واحد حجم
$\bar{\varepsilon}$	کرنش میانگین بر واحد حجم
V_m	حجم ماتریس در ماده نانو کامپوزیت
f_m	کسر حجمی ماتریس
S	تانسور نرمی
A	تانسور ساختاری کرنش
B	تانسور ساختاری تنش
\hat{A}	تانسور ساختاری تغلیظ شده کرنش
ε^C	کرنش یکنواخت در یک مقطع
ε^T	کرنش انتقالی یا کرنش ویژه
E_{ijkl}	تانسور اشلبی
C^{Voigt}	ماتریس سفتی مربوط به ماده نانو کامپوزیت مطابق با مدل ویت
S^{Reuss}	ماتریس نرمی مربوط به ماده نانو کامپوزیت مطابق با مدل ریوس
$A^{Eshelby}$	تانسور ساختاری کرنش مطابق با مدل اشلبی رقیق
A^{MT}	تانسور ساختاری کرنش مطابق با مدل موری - تاناکا
A^{SC}	تانسور ساختاری کرنش مطابق با مدل خودسازگاری
\hat{A}^{lower}	تانسورهای ساختاری کرنش مربوط به مرز پایینی
\hat{A}^{upper}	تانسورهای ساختاری کرنش مربوط به مرز بالایی
f_s	ضریب رویهم رفتگی ذرات
Offset	فاصله بین دو ذره روی سر هم
B	پهنای یک سلول واحد
h	فاصله عمودی بین ذرات
h_{max}	حداکثر فاصله عمودی بین ذرات
f_X	ضریب لایه لایه شدگی
τ	ضخامت ناحیه بین فازی
ε_{crit}	کرنش بحرانی در کمانش ذرات

فصل اول



مقدمه

۱-۱. مقدمه کلی

دنیای امروز پس از طی کردن سالیان دراز و اندوختن تجربه‌های زیاد، توانسته فناوریهای زیادی را به بشر تقدیم کند. این تلاشها در کسب فناوریها در جهت خدمت به بشر و فراهم کردن زندگی مطلوب‌تر، هر روز مسیر جدیدی را می‌یابد. جهان امروز با مفهوم جدید «نانوفناوری» روبه‌رو می‌باشد. فناوری که دید خود را از سطوح ماکرو به حد ملکول و اتم ریز کرده است. آن از نیروهای بین ملکولی و چیدمان دلخواه اتمها صحبت به میان آورده است. هر روز که می‌گذرد، پدیده‌ای جدید به جهانیان معرفی می‌شود و پس از کمی کنکاش نانوفناوری در پشت آن دیده خواهد شد. بخش مواد و به دنبال آن تعاریف مکانیکی ماده از زمینه گسترانده شده توسط نانوفناوری در امان نبوده و حال در پیشرو مواد نام «نانوکامپوزیت» را می‌توان دید.

نانوکامپوزیتها، در دهه آخر قرن بیستم به عنوان زمینه جدیدی وارد عرصه علم و فناوری کامپوزیتها شدند. کامپوزیتها خود نیز سالیان زیادی از عمرشان نمی‌گذرد اما با سرعت رو به رشد علم و فناوری حال در کنار خود نانوکامپوزیتها را می‌بینند. تفاوت نانوکامپوزیتها با هم خانواده خود کامپوزیت، وجود مؤلفه‌هایی در حد نانو در سیستم نانوکامپوزیتها می‌باشد. این تفاوت که ساده به نظر می‌رسد موجب خواص فوق العاده از جمله مدول الاستیسیته بالا، استحکام کششی بالا، مقاومت گرمایی بالا، کاهش قابلیت نفوذ پذیری گاز، کاهش قابلیت اشتعال پذیری و افزایش تجزیه پذیری پلیمر جهت موارد زیست محیطی می‌شود. آنچه که واقعاً در سطح ملکولها می‌گذرد که باعث این خواص چشمگیر می‌شود، موضوعی است که علاقه‌مندیهای بسیاری از دانشمندان را به سمت خود جلب کرده است. ولی می‌توان گفت ایجاد یک سری پیوندهای شیمیایی بین دو فاز موجود در نانوکامپوزیتها به دلیل سطح فوق العاده زیاد یکی از مؤلفه‌ها غیر قابل تردید

می‌باشد. آن همان چیزی است که باعث خواص بهینه تر نسبت به کامپوزیتها همراه با اتصال فیزیکی بین دو فاز می‌شود.

تغییر در ترکیب و ساختار مواد در مقیاس نانومتری و ارائه خواص ویژه و بی نظیر نسبت به مواد کامپوزیتی موجب شده که در ده سال اخیر پیشرفت قابل توجهی در این زمینه صورت گرفته است و فناوریهای پیشرفته‌ای در ساخت ذرات نانومتری برای به کارگیری در نانوکامپوزیتها به عنوان مؤلفه دوم ارائه شده است که شاهراه بزرگی را برای تولید مواد کامپوزیت جدید با خواص ویژه باز کرده است. در میان نانوپودرها، نانو ذرات با نسبت منظری بالا عاملهای تقویت کننده خوبی برای مواد پلیمری می باشند. در میان همه این کامپوزیت‌های تقویت شده با نانوذرات، سیستم‌های حاوی ذرات خاک رس به طور وسیعی استفاده شده اند. در این مدت، نه چندان طولانی که از کشف خواص ذرات نانوخاک رس به عنوان تقویت کننده می‌گذرد، تحقیقات زیادی در مورد آنها انجام شده است. بیشتر تحقیقات صورت گرفته به خاطر جدید بودن، به صورت تجربی بوده و سعی بر جمع آوری داده های تجربی در این زمینه شده است.

در میان پلیمرها، پلیمر پلی‌یورتان محصولاتی نرم تا فوق العاده سخت را شامل می‌شود. پلی‌یورتانها می‌توانند موادی مستحکم و مقاوم در برابر سایش باشند. به همین جهت در این تحقیق از پلی‌یورتان به عنوان فاز زمینه استفاده شده است. ترکیب نانوذرات و پلیمر برای داشتن یک نانوکامپوزیت به عنوان هدف روشهای خاصی دارد. هر کدام از این روشها مشکلات و فواید خود را دارند. در این تحقیق سعی بر بهبود روش ساخت نیز گردیده است.

هر چند که تحقیقات مبتنی بر آزمایشات می‌تواند به طور مناسب برای محاسبه روابط خواص - ساختار کامپوزیت‌های نانوساختاری استفاده شوند، ولی انجام آزمایشات و گرفتن خواص کامپوزیت‌های نانوساختاری از آن، روشهای پروسس و تجهیزات آزمایش پیشرفته را مطالبه می‌کند. این موضوع هزینه های زیادی را در پی دارد. بنابراین تکنیکهای مدلسازی برای محاسبه خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری مسئله‌ای دوری ناگزیر می باشد.

در این تحقیق، در ادامه همین فصل به عنوان مباحث اولیه برای ورود به این موضوع به معرفی

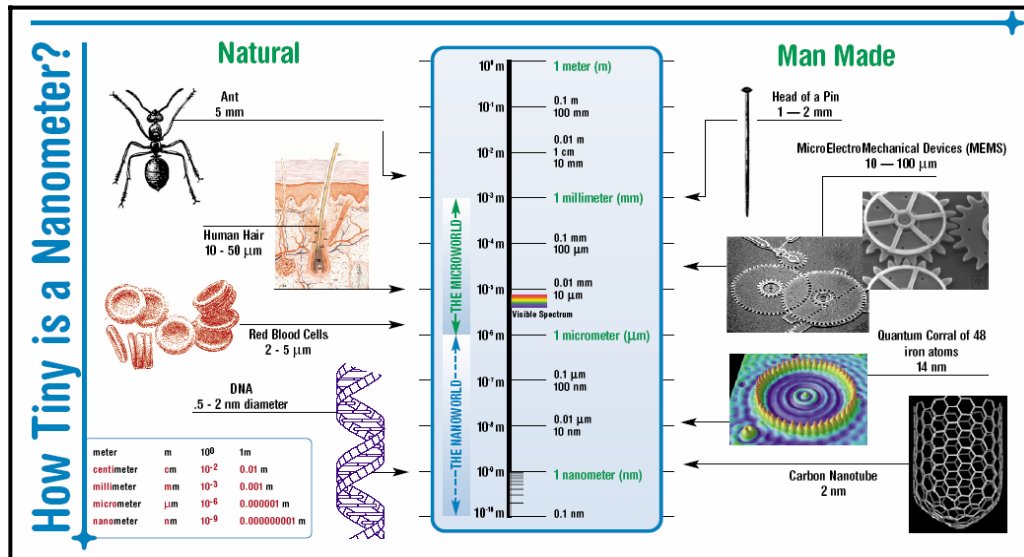
مختصری از نانوفناوری و نانوکامپوزیتها به عنوان یکی از شاخه های نانوفناوری پرداخته می شود. در این فصل تعریف، انواع، کاربرد، فواید و معایب این مواد نیز بیان شده است. در فصل دوم به شناسایی مواد تشکیل دهنده نانوکامپوزیت پلیمر(پلی یورتان) / خاک رس پرداخته شده است. در این قسمت دوره ای بر روشهای ساخت نانوکامپوزیتها آورده شده و سپس روش ساخت مطلوب تری ارائه شده است. در پایان فصل با انجام آزمایشات پیش ساخت، نوع نانوخاک رس مناسب برای استفاده در این روش تعیین شده است. در فصل سوم پس از آشنایی با روشهای مدلسازی نانوکامپوزیتها، روشهای میکرومکانیک تحلیلی مناسب برای مدلسازی نانوکامپوزیتها ارائه شده است. در انتهای فصل، با استفاده از معادلات حاصل از تئوریه اثرات چند پارامتر بر روی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت ارزیابی و مقایسه شده است. در فصل چهارم این تحقیق، سعی بر ارائه یک مدل المان محدود از نانوکامپوزیت مورد نظر شده است. در پایان فصل اثرات پارامترهای هندسی را بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آورده شده است. در فصل ارزیابی و مقایسه نتایج، داده های حاصل از فصلهای سوم و چهارم به همراه یک سری از داده های تجربی مقایسه و ارزیابی می شوند. در انتهای این فصل نیز دو تئوری جدید برای بیان محدودیتهای موجود بر افزایش خواص توسط نانوکامپوزیتها بررسی شده اند.

۲-۱. مقدمه ای بر نانوفناوری

۱-۲-۱. نانوفناوری

تاکنون تنها نیروی حاکم در بین اتمها و مولکولها از طریق طبیعت مادری آنها کنترل می شده است. ولی بعد از سه دهه تحقیق، در حال حاضر دانشمندان توانایی کار با مولکولها و اتمها در اندازه نانو را کسب کرده اند و در فهم ساختارهای بنیادی این مواد نیز که شبیه به هیچ ماده ای در قبل نمی باشند توانا شده اند. می توان نانوفناوری را به عنوان جایگذاری، اندازه گیری و مدل کردن دقیق مواد با ابعاد زیر ۱۰۰ نانومتر یا موادی که حدوداً شامل ۴ تا ۴۰۰ اتم می شوند بیان نمود. برای داشتن یک دید مناسب نسبت به کوچکی این اندازه، توضیح همراه مفید می باشد: «یک نانومتر(یک بیلیونیم متر) برابر با $\frac{1}{750000}$ ضخامت یک تار مو

می‌باشد». شکل (۱-۱) نیز برای آشنایی با این اندازه‌ها مناسب می‌باشد.



شکل ۱-۱. یک نانومتر چه اندازه ای میباشد؟ [۱]

بازه مقادیر زیر ۱۰۰ نانومتر از آن لحاظ مهم می‌باشد که هنگام سر و کار داشتن با این اندازه کوچک، قوانین کلاسیک فیزیک تغییر کرده و از مواد ساخته شده با استفاده از این تکنولوژی خواص آرمانی دیده می‌شود.

۲-۲-۱. تاریخچه نانوفناوری

تاریخچه معاصر نانوفناوری از سال ۱۹۵۹ شروع می‌شود. ریچارد فینمن^۱ یک فیزیکدان برنده جایزه نوبل طی یک سخنرانی عنوان کرد: «تعداد زیادی اتاق در کف وجود دارد». فینمن به حضار گفت که او قانون علمی سراغ ندارد که پیشنهاد دهد تا رفتار اتم با اتم را بیان کند. او در طی این سخنرانی به دانشمندان پیشنهاد داد که در اندازه نانو جهت جابجایی و کنترل کردن اتمهای خاص شروع به تحقیق کنند.

محققین در سطح پایین تر، این نوع تحقیقات را رها کردند و به دنبال تحقیقات خود رفتند ولی در حین کار کردن مرتب به این موضوع برخورد می‌کردند و مشکلاتشان بیشتر می‌شد. تا اینکه در سال ۱۹۸۱

^۱ Richard Feynman

این مرز محدودیت توسط محققین IBM شکسته شد. آنها یک وسیله به نام STM¹ اختراع کردند که توسط آن می‌توانستند از نمونه‌ها در حد اتم نمونه برداری کنند. برای تلاششان این محققین جایزه نوبل ۱۹۸۶ را در فیزیک دریافت کردند. محققین در IBM دوباره یک جهش عمده تر در این جهت داشتند، آنها نوع دیگری از میکروسنجه‌ها به نام AFM² اختراع کردند که می‌توانست برای تحلیل و عکسبرداری از اتمهای مخصوص استفاده شود.

با این وسایل جدید، محققین از نظر دید و رفتار بین اتمی توانا شدند ولی این ابزار به طور وسیع قابل دسترسی نبود و نیز خیلی گران بودند. در همین زمان، یک گروه از محققین در دانشگاه رایس³ به سر گروهی ریچارد اسمالی⁴ توجه عمومی را با کشف یک مولکول به شکل توپ فوتبال از کربن به خود جلب کردند که رفتار آن با هر چیزی که قبلاً دیده شده بود فرق داشت. آن یک فولرین⁵ یا باکی بال⁶ نامیده شد. آن شامل ۶۰ اتم کربن می‌باشد که با یک وضعیت متقارن به هم متصل شده‌اند. هر نمونه به سختی دارای پهنای یک نانومتر می‌باشد. فولرین‌ها می‌توانستند به راحتی الکتریسیته و گرما را انتقال دهند. آنها قویتر از فولاد و سبکتر از پلاستیک بودند. این کشف، سیلی از آزمایشات را در زمینه کاربرد این مولکول از پزشکی تا ساخت و تولید در برداشت. برای کشف فولرین، محققین آن موفق به کسب جایزه نوبل شیمی در سال ۱۹۹۶ شدند.

به طور آهسته‌تر، ولی در جایگاه و موقعیتی پایدار و مداومتر پیشرفتهای نانوفناوری از سال ۱۹۸۰ ادامه یافت. در سال ۱۹۸۹ محققین IBM دنبال کنندگان این موضوع را با استفاده از STM وسیله ای که IBM چند سال زودتر ساخته بود، با سازماندهی ۳۵ اتم تکی از زنون⁷ متحیر ساختند که به صورت I- B- M تلفظ

¹ Scanning Tunneling Microscope

² Atomic Force Microscope

³ Rice University

⁴ Richard Smalley

⁵ Fullerene

⁶ Buckyball

⁷ Xenon