

چکیده

در این پروژه مدول نانو کامپوزیتهای پلیمری بر پایه پلی آمید و پلی الفین الاستومر با فرض عدم تجمع ذرات تقویت کننده، مدل سازی شده است. در مدل ارائه شده ساختارهای هندسی متفاوت نانو تقویت کننده (لایه ای ، کروی و استوانه ای) ، ناحیه سطح مشترک و جهت گیری تصادفی نانو تقویت کننده ها به عنوان عوامل مؤثر در خواص نهایی نانو کامپوزیت مورد بررسی قرار گرفته است. هدف از این مطالعه پیش بینی مدول نانو کامپوزیتهای با فرض واقع شدن ذرات نانو تقویت کننده در یکی از فازهای پلیمری (بر مبنای ضریب خیس شوندگی) می باشد. بر این اساس مدل نهایی در سه مرحله مورد بررسی قرار گرفت مرحله اول با فرض عدم حضور ذرات نانو تقویت کننده در محیط تعریف شده که متعاقباً سیستم را به یک آلیاژ ساده دو جزئی پلیمری تبدیل می نماید. در این مرحله سیستم مخلوط پلیمری بر مبنای آستانه اتصال اجزاء، به دو بخش قطره- ماتریس و هم پیوسته تقسیم می گردد. پیش از رسیدن کسر حجمی فاز پراکنده به آستانه اتصال، سیستم فقط شامل مورفولوژی قطره ماتریس بوده که رفته رفته با بیشتر شدن کسر حجمی و بهم پیوستن قطرات فاز مذکور جزء پیوسته نیز در سیستم نمایان می شود. در نقطه وارونگی فازی جابه جایی فازهای بدلیل افزایش کسر حجمی فاز پراکنده اتفاق می افتد، و سیستم در این نقطه به صورت کاملاً پیوسته خواهد بود. پس از نقطه جابه جایی فازی، فاز پیوسته جای خود را به فاز پراکنده داده و بنابراین تمام تغییرات مورفولوژیکی توصیف شده، با فرض جابه جایی فازها دوباره اتفاق می افتد. مدل ارائه شده در این بخش با اعمال ضریب سازگار کننده $F(D)$ بر مقادیر پیش بینی شده مدول (توسط مدلهای مربوط به هر کدام از اجزاء قطره- ماتریس و هم پیوسته) مدول نهایی مخلوط پلیمری محاسبه می شود. مرحله دوم، بر مبنای پیش بینی مدول نانو کامپوزیتهای پلیمری با فرض عدم تجمع این ذرات و همچنین تک جزئی بودن ماتریس پلیمری شکل گرفت. در این مرحله شکل هندسی نانو تقویت کننده ها ، جهت گیری تصادفی و همچنین حضور ناحیه بین سطحی (میان ذرات نانو تقویت کننده و ماتریس پلیمری) به عنوان پارامترهای بسیار مهم تعریف و به صورت مقادیر محاسباتی وارد مدل سازی شدند. غالباً از معادلات و قوانین حاکم بر کامپوزیت های الیاف پیوسته به عنوان مبنای محاسباتی، برای توصیف چارچوب مدل مذکور استفاده شد. این مدل از سه قسمت تشکیل می شود، که هر کدام بر شکل هندسی خاصی از ذرات نانو تقویت کننده دلالت می کند (صفحه ای، استوانه ای و کروی). اساس و روند محاسباتی هر سه مدل بر مبنای پیش فرض های یکسان بوده، با این تفاوت که افزایش پیچیدگی هندسی نانو تقویت کننده ها ، بالطبع پیچیدگی محاسباتی را نیز به دنبال دارد. مرحله سوم ، شامل ادغام مدل های تعیین شده مرحله اول و دوم می باشد. در این مرحله با توجه به فرض قرار گرفتن ذرات نانو تقویت کننده در یکی از فازها، می توان آن فاز را به عنوان یک نانو کامپوزیت (با ماتریس تک جزئی در نظر گرفت) و در نهایت کل سیستم را به صورت یک مخلوط پلیمری فرض کرد. چسبندگی کامل فازها، استحکام بالای سطح مشترک (بین نانو تقویت کننده ها و همچنین بین دو فاز پلیمری)، توزیع مناسب، امتزاج ناپذیری دو فاز پلیمری در یکدیگر و ... را می توان از فرض های حاکم بر این مدل نام برد. در هر کدام از مراحل آزمون های تنش- کرنش برای تعیین مدول به منظور بررسی دقت و کارایی مدل های انجام و همچنین از داده های گزارش شده در منابع علمی دیگر نیز برای افزایش سطح اطمینان از صحت فرضیات و کارایی مناسب مدل های استفاده شد.

فصل اول

۱- مقدمه

کامپوزیت در تعریف به ماده ای اطلاق می شود که اجزای تشکیل دهنده آن در مقیاس ماکرو، میکرو و حتی نانو قابل تشخیص از یکدیگر بوده و ویژگیهای ماده نهایی از هر یک از اجزای تشکیل دهنده بهتر باشد. کامپوزیتهای پلیمری از دیرباز بدلیل برتری های نسبی که از لحاظ خواص مکانیکی، پایداری ابعادی، مقاومت حرارتی، استحکام و ... نسبت به سایر گروه های پلیمری دارا می باشند، مورد توجه و استفاده بسیار قرار گرفته اند. این امر همواره به عنوان راه حلی برای بهبود سفتی و مقاومت مکانیکی اندک پلیمرها (در مقایسه با فلزات) بشمار رفته است.

کامپوزیت های پلیمری تشکیل شده از یک ماتریس پلیمری و یک فاز تقویت کننده می باشند. ماتریس پلیمری بر اساس شرایط سرویس دهی مطلوب، از پلیمرهای گرماسخت و یا گرمانرم انتخاب می شود. مواد مختلف آلی، معدنی و ... را می توان به عنوان فاز تقویت کننده استفاده کرد. شکل غالب این فاز به صورت کلاف پیوسته الیاف، پارچه بافته شده، الیاف خرد شده و ... می باشد. پارامتر سطح ویژه^۱ همواره یکی از مهمترین پارامترهای مربوط به فاز تقویت کننده بشمار می رود، چراکه بیشتر بودن این پارامتر به مفهوم سطح

¹ Specific area

تماس بیشتر ذرات با ماتریس و افزایش تقویت شوندگی است. در مورد الیاف می توان بیشترین مساحت سطح را به شکل لیف بسیار بلند^۱ و قرص^۲ نسبت داد.

کامپوزیتها در مقیاس ماکرو به دو دسته الیاف بلند^۳ و الیاف کوتاه^۴ تقسیم می شوند که دارای تفاوت‌هایی با هم هستند (تأثیرات انتهایی الیاف^۵، طول بحرانی و ... اشاره کرد) [۱].

پارامتر بسیار مهم که در زمینه کامپوزیتها مورد توجه بوده و هست، وزن محصول نهایی می باشد. بر همین اساس همواره سعی بر کاهش وزن قطعه نهایی با حفظ خواص مطلوب و حتی بهبود آنها بوده است. تحقیقات انجام شده نشان داد که فناوری نانو این امر را به سهولت ممکن می سازد. سطح ویژه بسیار زیاد ذرات تقویت کننده، حجم بسیار کمتر مورد نیاز از این مواد برای ایجاد خواص مشابه با کامپوزیت های متداول، شرایط فرایندی بهتر و ... از مواردی هستند که سمت و سوی پیشرفت تکنولوژی کامپوزیت ها را به استفاده از نانو تقویت کننده ها سوق داده اند. برای اولین بار این گروه از مواد پلیمری در قالب کامپوزیت پلیمر/خاک رس در سال ۱۹۷۰ معرفی شد [۲]. تفاوت نانو کامپوزیتها با کامپوزیتهای متداول در مفهوم تنها حضور یک جزء با مقیاس نانو در ساختار داخلی است، حال آنکه معادلات و قوانین حاکم بر شیوه عکس العمل آنها در مقابل تنش های (کششی، فشاری، خمشی، حرارتی و ...) کاملاً متفاوت است. دلیل این امر را می توان به سهم قابل توجه ناحیه سطح مشترک در تعیین خواص نهایی (در مقایسه با کامپوزیت های متداول) نسبت داد. قرار گرفتن حداقل یکی از ابعاد ذرات تقویت کننده در مقیاس نانو باعث می شود که ضخامت ناحیه سطح مشترک در محاسبات به هیچ وجه قابل چشم پوشی نباشد در صورتیکه در مکانیک کامپوزیتهای متداول (الیاف بلند و الیاف کوتاه) به راحتی از این پارامتر می توان صرف نظر کرد.

کاهش هزینه، اجتناب از انجام پی در پی آزمون ها (به ویژه در زمینه های تحقیقاتی)، صرفه جویی در زمان و ... همواره علوم مختلف را به استفاده از علم ریاضی (به عنوان ابزار شبیه سازی فرایندها) پیش برده است. بر همین اساس مدلسازی ریاضی یک سیستم، همواره یکی از مهمترین و راهگشاترین روش ها برای افزایش سطح درک افراد از چهارچوب کلی حاکم و پیش بینی نتایج مطلوب بشمار رفته است.

مدلسازی در زمینه نانو کامپوزیتها در سالهای اخیر توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده است، بطوریکه همواره سعی در ارائه مدلهایی با پیش فرض های صحیح و نتایج قابل اعتماد بوده است [۳-۶]. اشکال اساسی که در بسیار از تلاشهای اولیه برای مدلسازی نانو کامپوزیتها به چشم می خورد، عدم دخالت تأثیرات ناحیه سطح مشترک در محاسبات می باشد. این امر باعث ایجاد خطای بسیار زیاد در مقادیر پیش

¹ Continuous fiber

² Platelet

³ Long fiber

⁴ Short fiber

⁵ End effect

بینی شده ، نسبت به مقادیر واقعی می گردد. در تحقیقات اخیر [۷] تمهیداتی برای رفع این مشکل اندیشیده شده است که به بهبود نسبی نتایج منجر گشته، اما کماکان عوامل مؤثر دیگر مانند جهت گیری تصادفی ذرات نانوتقویت کننده (که در غالب موارد مشاهده می شود)، شکل هندسی این ذرات و ... در فرضیات اولیه و بنیانی این مدلها به چشم نمی خورند.

در این تحقیق سعی بر مدلسازی نانوکامپوزیتهای پلیمری بر پایه پلی آمید و پلی الفین الاستومر شده است. ویژگی بارز این دسته از نانوکامپوزیت ها ، حضور یک مخلوط پلیمری به عنوان ماتریس در ساختار نانوکامپوزیت می باشد. همین امر باعث ایجاد تفاوت هایی در مدل حاکم بر ساختار مذکور نسبت به مدل ها دیگر است. از پیش فرض های در نظر گرفته شده در این مدل می توان به قرار گرفتن ذرات نانوتقویت شونده در یکی از فازها (و نه در سطح مشترک)، همگن بودن سیستم نانوکامپوزیت در مقیاس ماکرو، جهت گیری تصادفی ذرات نانوتقویت کننده، حضور ناحیه سطح مشترک، پارامترها مربوط به شکل هندسی ذرات نانوتقویت کننده و ... اشاره کرد.

برای رسیدن به چهارچوب کلی مدل مذکور، یک روش سه مرحله ای محاسباتی در نظر گرفته شده است:

الف : مدلسازی مخلوط های پلیمری

ب : مدلسازی نانوکامپوزیتهای پلیمری با فرض تک جزئی بودن ماتریس پلیمری

ج : ادغام مدل های بدست آمده از مراحل ۱ و ۲

برای بررسی صحت فرضیات و دقت نتایج نهایی مدل های بدست آمده در مراحل ۱ ، ۲ و ۳، نمونه هایی از طریق اختلاط مذاب تهیه و تحت آزمون تنش - کرنش برای تعیین مدول کششی واقع شدند. علاوه بر این، اطلاعات منتشر شده در منابع علمی دیگر نیز برای اطمینان از عملکرد مناسب مدلها مورد استفاده قرار گرفتند.

فصل دوم

۲- تئوری و مروری بر کارهای انجام شده

در این بخش به تعریف نانوکامپوزیت ها و مخلوط های پلیمری و بررسی مدل های ارائه شده (به منظور پیش بینی مدول) برای هر یک خواهیم پرداخت.

۲-۱- مخلوط های پلیمری

تکنولوژی اختلاط پلیمرها یکی از عمده ترین زمینه های تحقیقاتی در سه دهه اخیر به شمار می رود. مخلوطهای پلیمری (که می توان از آنها در برخی موارد به عنوان آلیاژ پلیمری نیز یاد کرد) با آلیاژهای فلزی دارای شباهت های قابل توجهی هستند. استفاده تجاری از مخلوطهای پلیمری به صورت روزافزون، به دلیل افزایش سطح آگاهی و معلومات در مورد این مواد، در حال گسترش است.

مزایای مخلوطهای پلیمری در مقایسه با ساختارهای پلیمری سنتز شده جدید بسیار آشکار است. امکان اختلاط پلیمرهای موجود و تولید محصول نهایی با قابلیت تجاری سازی، باعث کاهش هزینه های لازم برای تحقیقات به منظور تولید پلیمرهایی با خواص مطلوب خواهد شد و همچنین سرمایه بسیار کمتری برای تولید

محصول در مقیاس صنعتی^۱ و تجاری سازی آن مورد نیاز است. از دیگر مزایای مخلوطهای پلیمری در مقایسه با پلیمرهای سنتز شده جدید، می توان به وجود ترکیبی از خواص منحصر به فرد در این محصولات اشاره داشت که به راحتی توسط ساختارهای پلیمری جدید حاصل نخواهند شد. بر همین اساس امروزه علم پلیمر سعی بر رفع نیازهای جدید بشر با استفاده از تکنولوژی اختلاط پلیمرها به جای صرف وقت و هزینه برای سنتز و تولید ساختارهای پلیمری جدید دارد.

امروزه نقش این تکنولوژی در زندگی روزمره ما بسیار پر رنگ شده است. تولید تایر به صورت مخلوطی از لاستیک و پلیمرهای مقاوم در برابر ضربه (پلی استایرن مقاوم در برابر ضربه، ABS، پلی پروپیلن و یا PVC مقاوم در برابر ضربه) ، استفاده از مخلوط پلیمرهای مهندسی در لوازم خانگی، صنایع الکترونیک، تولید قطعات اتومبیل و کاربرد مخلوطهای پلی الفینی در تولید فیلمها^۲ از انواع کاربرد این گروه از مواد می باشد.

مخلوطهای پلیمری در ویژگی هایی مانند رفتار فازی، ساختار، امتزاج پذیری و ... با یکدیگر تفاوت دارند. این تنوع به تفاوت در کسر حجمی، آنتالپی، آنتروپی اختلاط و ...نسبت داده می شود. امتزاج پذیری به حالتی اطلاق می شود که فرایند اختلاط در مقیاس مولکولی انجام شده باشد و ساختار مخلوط شبیه به یک ماده تک فاز به نظر برسد. باید به این نکته اشاره کرد که در اغلب فرایندهای اختلاط پلیمری به دلیل مثبت بودن آنتالپی و همچنین بسیار کوچک بودن (و یا حتی منفی بودن) آنتروپی، اختلاط به صورت امتزاج ناپذیر انجام می پذیرد. البته، علیرغم وجود یکسری از مخلوط ها که به صورت طبیعی با یکدیگر امتزاج پذیر هستند، روش هایی نیز برای امتزاج پذیر کردن اجزای یک مخلوط وجود دارد. برای مثال می توان از مواد مکمل (که مخلوط پلیمری را به یک کوپلیمر بلاک^۳ و یا پیوندی^۴ تبدیل می کند) استفاده کرد. یکی از مزایای مخلوط های امتزاج پذیر نسبت به مخلوط های امتزاج ناپذیر در خواص نهایی آنها است (برای مثال خواص مکانیکی) ، چرا که در یک ساختار امتزاج پذیر خواص نهایی مطلوب، میانگین خواص اجزای تشکیل دهنده می باشد. مخلوط های امتزاج ناپذیر به دلیل چسپندگی ضعیف در ناحیه سطح مشترک بین فازها اغلب ناسازگاری مکانیکی از خود نشان می دهند. البته این مشکل را می توان با استفاده از سازگار کننده ها حل کرد. مخلوط های مقاوم در برابر ضربه تشکیل شده از یک پلیمر سخت به عنوان ماتریس و یک الاستومر به عنوان فاز پراکنده هستند. مخلوط پلیمرهای شیشه ای و کریستالی را با اضافه کردن یکسری از افزودنی ها می توان در صنایع اتومبیل سازی مورد استفاده قرار داد[۸].

¹ Scale-up

² Film

³ Block copolymer

⁴ Grafted copolymer

علیرغم ویژگی‌هایی مانند مقاومت شیمیایی و سایشی، مدول و دمای ذوب بالا، فرایند پذیری آسان و ... در پلی آمید ۶، نقایصی چون شکننده بودن و جذب رطوبت بالا محققان را بر آن داشته که روشهایی برای اصلاح این پلیمر پیدا کنند. در چند دهه اخیر فرایند اختلاط پلی آمید ۶ با سایر پلیمرها یکی از بهترین روشها برای مهار ضعفهای آن بوده است. پلی الفین الاستومر ها همواره برای بهبود ویژگیهای نایلون ۶، در فرایند اختلاط نسبت به سایر پلیمرها ترجیح داده شده اند. از ویژگیهای این گروه از پلیمرها می توان فرایند پذیری آسان، مقاومت ازنی بالا، مقاومت ضربه بالا و ... را نام برد.

Elastomer blends	Engineering polymer blends
Emulsion blends	Crystalline-crystalline polymer blends
Impact modified polymers	Crystalline-amorphous polymer blends
Thermosetting polymer blends	Biodegradable polymer blends
Molecular composites	Reactive compatibilized blends
Liquid crystalline polymer blends	Polyolefin blends
Interpenetrating polymer networks	Isomorphous polymer blends
Polyelectrolyte complexes	Water soluble polymer blends
Recycled polymer blends	Core-shell polymers systems
Polymer blend composites	Electrically conducting polymer blends
Block copolymer-homopolymer blends	Blends comprising natural polymers

مخلوط PA/POE بدلیل ناسازگار بودن نیازمند تمهیداتی برای بهبود خواص نهایی محصول است، که می توان به استفاده از سازگار کننده، ایجاد توزیع مناسب فاز پراکنده و ... اشاره کرد. یکی از سازگار کننده های مورد استفاده پلی الفین مالئیکه می باشد [۹، ۱۰]. همانطور که قبلاً اشاره شد، یکی دیگر از راههای ایجاد سازگاری میان اجزای مخلوط پلیمری استفاده از مواد مکمل (مانند یک کومونومر) است، که سامانه را به یک کوپلیمر بلاک و یا پیوندی تبدیل می کند. بررسی این رویه بر روی مخلوط پلیمر PA/POE توسط وانگ^۱ و همکارانش [۱۱] صورت گرفت. آنها تحقیقاتی را بر روی تشکیل کوپلیمر PA6-g-POE در حضور مالئیک انیدرید و پراکسید در طی فرایند اختلاط مذاب این دو پلیمر انجام دادند، که نهایتاً منتج به تولید یک کوپلیمر پیوندی در زمان اختلاط مذاب و عملکرد امولسیفایر گونه آن شد.

¹ Wang

۲-۲- نانو کامپوزیت های پلیمری

در چند دهه اخیر نانو کامپوزیت های پلیمری در زمینه های صنعتی و تحقیقاتی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. نانو کامپوزیتها گونه جدیدی از مواد چند فازی به شمار می روند که حداقل در برگیرنده یک فاز بسیار کوچک (معمولاً در محدوده (nm) ۱-۱۰۰) می باشند. این مواد ترکیبی بسیار مناسب از مواد آلی - غیر آلی (یا آلی-آلی در بعضی موارد) را ارائه می دهند که دارای ویژگیهای بهتری نسبت به هر کدام از اجزا به تنهایی است [۱۲-۲۲]. در نانو کامپوزیت پلیمر/خاک رس^۱ اندازه ذرات تقویت کننده تقریباً برابر با اندازه مولکول های پلیمری می باشد، که این باعث سهولت در اختلاط و ایجاد پیوند شیمیایی میان آنها خواهد شد [۲۳]. بهبود خواص مکانیکی مانند استحکام کششی، مدول کششی، کاهش ضریب انبساط حرارتی، افزایش مقاومت در مقابل حلال [۲۳-۲۵] افزایش مقاومت در مقابل عبور پذیری [۲۱، ۱۹] و قابلیت به تأخیر انداختن شعله^۲ [۲۳] تنها تعدادی از ویژگیهای منحصر به فرد این مواد به شمار می روند. حضور ذرات نانو در اصل باعث بهبود مدول الاستیک می شود و تغییر محسوسی در رفتار رئولوژیکی و فرایندی یا خواص نوری ماده نسبت به ماتریس خالص ایجاد نمی کند. ساختار کلی^۳ و محلی^۴ زنجیره های پلیمری در فواصل میان ذرات نانو^۵ با چیزی که در توده پلیمری مشاهده می شود بسیار متفاوت است و این به خاطر محصور شدن زنجیره پلیمری و همچنین ایجاد سطح مشترک میان آنها و نانوذرات می باشد. دینامیک زنجیره های پلیمری تا حد زیادی تحت تأثیر سطح مشترک آنها با نانوذرات و محصور شدن در فضای مابین این ذرات می باشد. اصول تقویت در مقیاس نانو توسط اوسوکی^۶ و همکارانش ارائه شد. او امکان ساخت یک نانو کامپوزیت با استفاده از پلی آمید و خاک رس را کشف کرد [۲۶]. تنها با اضافه کردن مقدار ۲٪ حجمی از پرکننده غیر آلی مدول کششی نانو کامپوزیت به دو برابر (نسبت به ماتریس خالص) افزایش یافت. مهمتر از آن دمای تغییر فرم حرارتی آن تا حدود ۱۰۰ °C افزایش یافت که امکان استفاده از نانو کامپوزیت مذکور را در دماهای بالاتری فراهم می ساخت. این تأثیرات به مساحت سطح بسیار بالای نانو خاک رس و میزان توزیع آن در ماتریس پلیمری ربط داشت. پتانسیل تجاری سازی نانو کامپوزیت خاک رس باعث شده است که تحقیقات بسیار زیادی بر روی آن انجام بگیرد. در سالهای اخیر سعی به تولید نانو کامپوزیتها خاک رس با ماتریس اپوکسی [۲۷]، پلی استر غیر اشباع [۱۷]، پلی (ε-کاپرولاکتام) [۲۸، ۲۹]، پلی (دی متیل سیلوکسان) [۳۰]، پلی پروپیلن [۳۰]، پلی استایرن [۳۱]، پلی آمید [۳۲]، پلی یورتان [۳۳]، پلی (متیل

¹ Clay

² Flame retardant capability

³ Global conformation

⁴ Local

⁵ Gallery

⁶ Usuki

مناکریلات) [۳۴]، پلی بوتن [۱۲، ۱۳]، پلی (۴- متیل - ۱- پنتن) [۳۵] و پلی (وینیلیدین کلراید) [۳۶] شده است. تاکنون تنها تعدادی از نانوکامپوزیت های خاک رس مذکور در مقیاس صنعتی تولید شده اند که به نظر می رسد کامپوزیت پلی پروپیلن / خاک رس در میان آنها از شرایط بهتری برخوردار است.

تا کنون مدل جامعی که بتواند داده های آزمایشگاهی آزمون کشش را به خوبی و با دقت بالا تخمین بزند در دسترس نبوده است. این امر به خاطر پیچیده گی برهمکنشهای درونی ماده می باشد. برهمکنش های مذکور رفتار ماده در مقیاس ماکروسکوپیک و تغییر میکروساختارهای آن را کنترل می کنند.

تا کنون تحقیقات زیادی برای مدلسازی مدول الاستیک (بدلیل افزایش چشم گیر این عامل در نانوکامپوزیتها نسبت به ماتریس خالص و همچنین شناخت مناسب آن) انجام گرفته است. تنها توجیه قابل قبولی که برای این افزایش چشمگیر ارائه شده است، ایجاد ناحیه سطح مشترک میان ماتریس و نانوذرات (با توجه به مساحت سطح بسیار بالای آنها) و همچنین محدودیت تحرک زنجیره ها می باشد. با استفاده از AFM^۱ نشان داده شده است که در پلیمرهای نیمه بلوری مانند پلی پروپیلن حاوی ذرات ولاستونیت^۲ (در مقیاس میکرو) فشردگی و درصد بلورها در ناحیه سطح مشترک ماتریس و ذرات تقویت کننده افزایش یافته است. بنابراین آگاهی از استحکام ناحیه سطح مشترک و تأثیرات مقیاس طولی ذره نانو بر روی مدول نهایی نانو کامپوزیت بسیار حائز اهمیت است، چرا که در این صورت ناحیه سطح مشترک در فهم و مدلسازی مدول و تغییر فرم پلاستیک نانوکامپوزیتهای پلیمری تنها نقش یک عامل هندسی را ایفا خواهد کرد.

یوسوکی و همکارانش [۳۷] و میسرا^۳ [۳۸] در طی تحقیقات خود نشان دادند که برهمکنش بسیار قوی یونی میان ذرات تقویت کننده عامل دار و پلیمر باعث افزایش تبلور محلی در ناحیه سطح مشترک می شود. این مشاهدات میزان اهمیت درک سطح مشترک را برای مدلسازی مدول و تغییر فرم پلاستیک نانوکامپوزیتهای پلیمری نشان می دهد.

¹ Atomic force microscopy

² Wollastonite

³ Misra

۳-۲- مدل های پیش بینی کننده خواص کامپوزیتها

Halpin and Tsai مدل ۱-۳-۲

مدل Halpin and Tsai (H-T) یکی از بهترین مدل‌های ارائه شده در زمینه پیش بینی مدول کامپوزیت ها (E_r) بوده که برای سیستم های تقویت شده با الیاف بلند طراحی شده است [۳۹]:

$$E_r \equiv \frac{E_c}{E_m} = \frac{(1 + 2p\kappa\phi_f)}{(1 - \kappa\phi_f)} \quad (1,2)$$

$$\kappa = \frac{(E_R - 1)}{(E_R + 2p)}; \quad E_R \equiv \frac{E_f}{E_m}$$

Φ کسر حجمی، $\Phi_m = 1 - \Phi_f$ و زیر نویس های c ، m و f به ترتیب بیانگر کامپوزیت، ماتریس و پر کننده^۱ هستند؛ و p نسبت منظر^۲ را نشان می دهد. مدل (H-T) تنها شامل دو مؤلفه می باشد و تمام ضرائب آن کاملاً تعیین شده اند، به همین خاطر بسیار ساده بوده و به راحتی قابل استفاده می باشد. برای مقادیر کم Φ_f ، معادله (۱,۲) را می توان با استفاده از سری مک لاورین^۳ بسط داد و آن را به صورت زیر خلاصه کرد:

$$\frac{E_c}{E_m} \cong 1 + \kappa^* \phi_f \quad (2,2)$$

برای مدول در جهت تنش و همچنین جهت عمود بر راستای تنش، معادله (۱,۲) (با نسبت منظر $p = \infty$ و $p = 0$) به ترتیب مقادیر زیر را ارائه می دهد:

$$E_{C\parallel} = E_m \phi_m + E_f \phi_f \quad \text{در راستای تنش:}$$

$$\frac{1}{E_{C\perp}} = \frac{\phi_m}{E_m} + \frac{\phi_f}{E_f} \quad \text{در جهت عمود بر راستای تنش:}$$

در علم فیزیک، نسبت منظر معمولاً^۴ توسط مؤلفه نسبت چرخش محور کره^۴ (محور اصلی چرخش که توسط یک محور چرخشی متعامد تقسیم شده است) تعیین می شود.

تجربه نشان داده است که مدل (H-T) می تواند فقط پیش بینی های خوبی را برای نانو کامپوزیت های تقویت شده توسط نانو ذرات صفحه ای شکل ارائه دهد. بر همین اساس، نسبت منظر در معادله (۱,۲) می بایست به صورت زیر تعیین شود:

¹ Filler

² Aspect ratio

³ Maclaurin

⁴ Rotational spheroid axial ratio

$$P = \frac{\text{fiber length}}{\text{fiber diameter}}$$

یا

$$P = \frac{\text{platelet diameter}}{\text{platelet thickness}}$$

Mori and Tanaka مدل ۲-۳-۲

این مدل بهترین نتیجه ها را برای پرکننده های با نسبت منظر بالا ارائه می دهد [۴۰]:

$$\frac{E_c}{E_m} = (1 - \phi_f \xi)^{-1} \quad (۳,۲)$$

$$\xi = \frac{[-2\nu_m A_3 + (1 - \nu_m) A_4 + (1 + \nu_m) A A_5]}{-2A}$$

ν_m نسبت پواسون^۱ ماتریس بوده در حالیکه A و A_i نسبت های ظاهری وابسته به ضرایب اشلی^۲ می باشند. پیش بینی های معادله (۳,۲) مقداری کمتر از مقادیر پیش بینی شده توسط مدل H-T است.

Brune and Bicerano مدل ۳-۳-۲

این مدل شکل اصلاح شده مدل H-T، برای پیش بینی مدول نانوکامپوزیتهای حاوی توده نانو ذرات خاک رس می باشد. در این مدل فرض شده است که هر کدام از توده ها شامل تعداد زیادی نانو لایه خاک رس با ضخامت t و فاصله بین صفحات $s = d_{001} - t \cong d_{001} - 0.96 \text{ nm}$ می باشد. متغیرهای Φ ، p و E_T در معادله (۱,۲) به صورت زیر اصلاح می شوند.

¹ Poisson's ratio

² Eshelby coefficient

$$\begin{aligned}
 p' &= \frac{\frac{p}{N}}{\left[1 + \left(1 - \frac{1}{N}\right)\left(\frac{s}{t}\right)\right]} \\
 \phi' &= \phi \left[1 + \left(1 - \frac{1}{N}\right)\left(\frac{s}{t}\right)\right] \\
 E'_r &= \frac{E_r + \left(1 - \frac{1}{N}\right)\left(\frac{s}{t}\right)}{1 + \left(1 - \frac{1}{N}\right)\left(\frac{s}{t}\right)}
 \end{aligned} \tag{۴,۲}$$

به این دلیل که در معادلات (۴,۲) وابستگی به نسبت s/t دارای حدود حداکثری^۱ صحیحی نمی باشد، پارامتر N به صورت زیر بیان می شود:

$$N' = N + (1 - N) \left(\frac{s}{t}\right) \frac{\phi}{1 - \phi} \tag{۵,۲}$$

معادلات (۴,۲ و ۵,۲) کاهش ناگهانی را برای مدول نانو کامپوزیت های دارای توده های پس ماند^۲ پیش بینی می کنند. برای مثال، در توده هایی با $N=2$ و $s/t=2$ ، E_r دارای کاهش ۴۷٪ می باشد. بنابراین، حتی کاهش بسیار ناچیز در جدایی نانوذرات از یکدیگر باعث کاهش قابل توجه مدول می گردد [۴۱]. در مرحله بعد تأثیرات پیش بینی شده نسبت منظر تقویت شده است. بر همین اساس مدول مقیاسی^۳ به صورت زیر ارائه می گردد:

$$\begin{aligned}
 E_s &\equiv \frac{E_c(p) - E_c(p=1)}{E_c(p \rightarrow \infty) - E_c(p=1)} = \frac{2(p-1)}{(E_R - 1)(1 - \phi_f) + 1 + 2p} \\
 E_r &= \frac{E_f}{E_m}
 \end{aligned} \tag{۶,۲}$$

برای مقادیر کمتر از ۵٪ حجمی فاز تقویت کننده، معادله (۶,۲) به شدت به E_R و p وابسته است و حساسیتی به ترکیب درصد اجزای تشکیل دهنده ندارد. با توجه به نتایج این مدل می توان دریافت که با

¹ Upper limit

² Residual stacks

³ Scale modulus

فرض اینکه مدول میکا^۱ برابر با ۱۷۰ Gpa باشد [۴۲] و مدول پلاستیکهای مهندسی از محدوده ۲ تا ۴ (Gpa) قرار گیرد، صفحات خاک رس با نسبت منظر برابر با ۲۰۰، می بایست مدول کامپوزیت را حدود ۹۰٪ مقدار ممکن (حداکثر تقویت)، افزایش دهند.

۲-۳-۴- مدل Utracki

این مدل شکل دیگری از مدل H-T می باشد. در این مدل تأثیرات جامد شدن^۲ پلیمر بر روس سطح نانوذرات نیز (علاوه بر فرضیات اولیه) در نظر گرفته شده است. با فرض جمع پذیری حجمی^۳ :

$$E'_f = \frac{(E_f + \xi E_m)}{(\xi + 1)}$$

$$p' = \frac{p}{(\xi + 1)} \quad (۷,۲)$$

$$\phi'_f = \phi_f (\xi + 1)$$

که پریم^۴ بیانگر مؤلفه های اصلاح شده معادله (۱,۲) بوده در حالیکه ξ بیانگر ضخامت پلیمر جذب (که به صورت ضخامت چندین لایه نانو با ضخامت t توصیف می شود) است [۴۳].
به صورت جبری نشان داده شده است که مدول مؤثر نسبی^۵ برای نانو کامپوزیتهای حاوی ذرات کاملاً جدا^۶ از هم تقریباً برابر با مقدار محاسبه شده توسط مدل H-T (معادله ۱,۲) می باشد، که در آن هیچ پلیمری بر روی سطح ذرات تقویت کننده در نظر گرفته نشده است. با جایگزینی معادلات (۲,۷) در معادله (۱,۲) داریم:

$$E'_r = \frac{(12p'\phi'_f \kappa')}{(1 - \phi'_f \kappa')} = 1 + 2p\phi_f \kappa'$$

$$\kappa' = \frac{[E_R - 1]}{[E_R + \xi + 2.p]} \quad \rightarrow \quad E'_r = E_r \quad (۸,۲)$$

$$E_f \gg E_m; p \gg 1$$

¹ Mica

² Solidification

³ Volumetric additivity

⁴ Prime

⁵ Effective relative modulus

⁶ Fully exfoliated

بنابراین، جامد شدن پلیمر بر روی سطح نانو ذرات حجم ذرات تقویت کننده را زیاد می کند ولی همزمان نسبت منظر آنها را کاهش خواهد داد. این دو پدیده نقایص یکدیگر را جبران کرده و در نهایت باعث افزایش مدول نانو کامپوزیت می شوند. تطابق مدل H-T با داده های آزمایشگاهی مربوط به مدول نسبی، عدم فرض حضور پلیمر جامد بر روی سطح نانو ذرات را می پوشاند.

Einstein مدل ۵-۳-۲

ساده ترین مدل بر پایه مدل سوسپانسیون انشتین^۱ به صورت زیر است:

$$E_r \equiv \frac{E_c}{E_m} = 1 + [\eta]\phi + O(\phi^2) = 1 + a\phi$$

$$a = \frac{[\eta]}{\left(\frac{100\rho_f}{\rho_m}\right)} = \frac{[\rho]}{314} \quad (9,2)$$

$$\text{experimental: } [\eta] = 2.5 + 0.025(p^{1.47} - 1)$$

در معادله ۹,۲ حجم هیدرودینامیک^۲ نانوذرات تقویت کننده (η) به نسبت منظر وابسته است از طرفی مقدار نسبت منظر تابعی از درجه توزیع^۳ می باشد به نحوی که با کاهش درجه توزیع (شکل گیری توده نانوذرات تقویت کننده) تأثیر نسبت منظر کاهش می یابد [۴۴].

Hui and Shia مدل ۶-۳-۲

شاخصه اصلی و متمایز کننده این مدل از سایر مدل ها دخالت ناحیه سطح مشترک در رویه محاسباتی است. برای نانو کامپوزیتهای دارای الیاف و یا توده نانوذرات جهت دار^۴ (با فرض مقدار ۰/۵ برای ضریب پواسون ناحیه سطح مشترک و ماتریس پلیمری و همچنین چسبندگی عالی میان ماتریس و ذرات پرکننده) مقدار مدول الاستیک با رابطه زیر قابل تعیین است [۴۵]:

¹ Einstein's suspension model

² Hydrodynamic volume

³ Dispersion

⁴ Oriented

$$\frac{E_m}{E_c} = 1 - \frac{\phi}{4} \left[\frac{1}{\zeta} + \frac{3}{\zeta + \Lambda} \right]$$

$$\zeta = \phi + \frac{1}{E_r - 1} + 3(1 - \phi) \frac{(1 - g) - \left(\frac{gp^2}{2}\right)}{1 - p^2} \quad (10,2)$$

$$\Lambda = (1 - \phi) \left(\frac{3(1 + 0.25p^2)g - 2}{1 - p^2} \right)$$

$$g \cong \frac{\pi}{2p}$$

معادله (۱۰،۲) مقدار مدول نسبی (Er) را بیشتر از مقدار پیش بینی شده آن توسط مدل H-T پیش بینی می نماید، و پارامتر مذکور در معادله (۱۰،۲) در مقایسه با مدل H-T، حساسیت بیشتری به نسبت منظر از خود نشان می دهد.

۲-۳-۲- Ji مدل

مدل ارائه شده توسط Ji و همکاران، یک مدل سه فازی می باشد. در این مدل فرض بر این است که یک پرکننده (f) با شکل دلخواه در یک ماتریس (m) توزیع شده است و مابین آنها ناحیه سطح مشترک (i) قرار دارد (که مخصوصاً در نانوکامپوزیتها از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است). برای ذرات تقویت کننده بزرگ، جزء سطح مشترک قابل چشم پوشی می باشد و در نتیجه مدل Takayanagi حاصل خواهد شد. سه فاز مذکور به صورت سری و موازی به یکدیگر متصل شده اند. در این مدل سیستم نانوکامپوزیت به صورت سه ناحیه A، B و C تصور شده است که به صورت سری به یکدیگر متصل هستند شکل (۷،۲).

$$\frac{1}{E_c} = \frac{1 - \beta}{E_m} + \frac{\beta - \phi}{(1 - \alpha)E_m + \alpha E_{Bi}} + \frac{\phi}{(1 - \alpha)E_m + (\alpha - \lambda)E_{Ci} + \lambda E_f} \quad (11,2)$$

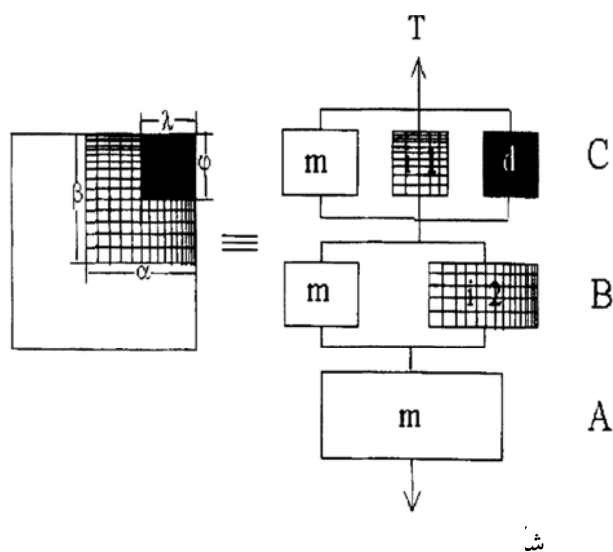
که α ، β ، ϕ و λ ابعاد فرضی نواحی سطح مشترک و فاز تقویت کننده می باشند. با استفاده از مؤلفه

های مذکور، کسر حجمی مؤلفه های مدل به صورت زیر تعیین می شود:

$$V_f = \lambda \cdot \alpha$$

$$V_i = \alpha \cdot \beta - \lambda \cdot \phi \quad (12,2)$$

$$V_m = 1 - V_f - V_i$$



ش

همانطور که در شکل (۱,۲) نشان داده شده است، از مدل جعبه های معادل^۱ نیز برای قرار دادن قسمت های مختلف مدل اصلی در حالت های سری و موازی استفاده می گردد.

مدول ناحیه سطح مشترک در قسمت های C و B به ترتیب به صورت موازی و سری به ترتیب با E_{Ci} و E_{Bi} نشان داده می شوند:

$$\frac{1}{E_{Bi}} = \frac{\ln\left(\frac{E_{0i}}{E_m}\right)}{E_{0i} - E_m}; \quad E_{Ci} = \frac{(E_{0i} + E_m)}{2} \quad \text{with: } \frac{E_{0i}}{E_m} \equiv k \quad (۱۳,۲)$$

که E_{0i} مدول ناحیه سطح مشترک بر روی سطح ذره نانو و k یکی از پارامترهای مربوط به مدل است. شکل ذرات پر کننده و متعاقباً سطح مشترک به صورت مربع در نظر گرفته شده است، بنابراین:

$$\alpha = \beta = \sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right] V_f}; \quad \phi = \lambda = \sqrt{V_f} \quad (۱۴,۲)$$

با جایگزاری معادله (۱۳,۲) در معادله (۱۱,۲) خواهیم داشت:

^۱ Equivalent box model

$$\frac{1}{E_c} = \frac{1 - \sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right]V_f}}{E_m} + \frac{\sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right]V_f} - \sqrt{V_f}}{\left\{1 - \sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right]V_f}\right\}E_m + \sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right]V_f} (k-1) \frac{E_m}{\ln(k)}} \quad (15,2)$$

$$+ \frac{\sqrt{V_f}}{\left\{1 - \sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right]V_f}\right\}E_m + \left\{\sqrt{\left[2\left(\frac{\tau}{t}\right) + 1\right]V_f} - \sqrt{V_f}\right\} (k+1) \frac{E_m}{2} + \sqrt{V_f} E_f}$$

برای نانوذرات استوانه ای داریم:

$$\alpha = \beta = \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f} \quad (16,2)$$

$$(17,2)$$

$$\frac{1}{E_c} = \frac{1 - \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f}}{E_m} + \frac{\sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f} - \sqrt{V_f}}{\left\{1 - \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f}\right\}E_m + \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f} (k-1) \frac{E_m}{\ln(k)}} \quad (18,2)$$

$$+ \frac{\sqrt{V_f}}{\left\{1 - \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f}\right\}E_m + \left\{\sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^2 V_f} - \sqrt{V_f}\right\} (k+1) \frac{E_m}{2} + \sqrt{V_f} E_f}$$

و برای نانوذرات کروی می توان نوشت:

$$\alpha = \beta = \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f} \quad (18,2)$$

$$\frac{1}{E_c} = \frac{1 - \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f}}{E_m} + \frac{\sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f} - \sqrt{V_f}}{\left\{1 - \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f}\right\} E_m + \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f} (k-1) \frac{E_m}{\ln(k)}} + \frac{\sqrt{V_d}}{\left\{1 - \sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f}\right\} E_m + \left\{\sqrt{\left[\frac{(r+\tau)}{r}\right]^3 V_f} - \sqrt{V_f}\right\} (k+1) \frac{E_m}{2} + \sqrt{V_f} E_f}$$

مؤلفه های تعیین کننده ناحیه سطح مشترک در معادله (۱۴,۲)، (۱۶,۲) و (۱۸,۲) τ و k هستند که به ترتیب با ضخامت ناحیه سطح مشترک و و سختی آن مرتبط می باشند [۴۶].

۲-۳-۸- مدل Hashin and Shtirkman

این مدل بر پایه فرضیه همسانگرد بودن^۱ بودن نانو کامپوزیت در مقیاس ماکرو و همچنین شبه یکنواخت بودن آن ارائه شده است. از فرضیات دیگر این مدل می توان به عدم محدودیت توسط شکل نانوذره تقویت کننده اشاره کرد. این مدل بر اساس فرضیات مذکور حدود حداکثری و حداقلی کامپوزیت را با استفاده از اصول تغییرپذیر الاستیسته تعیین می کند [۴۷]. با تعیین اینکه سختی ذرات پر کننده از ماتریس بیشتر است (یا برعکس)، حدود حداکثری و حداقلی برای مدول توده ای^۲ و مدول برشی^۳ به صورت زیر تعیین می شود:

$$K_{upper} = K_f + (1-\phi) \left[\frac{1}{K_m - K_f} + \frac{3\phi}{3K_f + 4G_f} \right]^{-1}$$

$$K_{lower} = K_m + \phi \left[\frac{1}{K_f - K_m} + \frac{3(1-\phi)}{3K_m + 4G_m} \right]^{-1}$$

$$G_{upper} = G_f + (1-\phi) \left[\frac{1}{G_m - G_f} + \frac{6\phi(K_f + 2G_f)}{5G_f(3K_f + 4G_f)} \right]^{-1}$$

$$G_{lower} = G_m + \phi \left[\frac{1}{G_f - G_m} + \frac{6(1-\phi)(K_m + 2G_m)}{5G_m(3K_m + 4G_m)} \right]^{-1}$$
(۲۰,۲)

که G و K به ترتیب مدول برشی و توده ای و زیرنویس f و m به ترتیب بیانگر پرکننده و ماتریس می باشند. حدود حداکثر و حداقلی مدول الاستیک را نیز می توان با استفاده از معادله زیر تعیین کرد:

^۱ Isotropic

^۲ Bulk modulus

^۳ Shear modulus

$$E = \frac{9K}{1 + 3\frac{K}{G}} \quad (21,2)$$

یکی از نقایص این مدل سه پارامتری بودن آن است.

Wang-Pryz مدل ۹-۳-۲

این مدل بر مبنای فرضیه همسانگرد بودن ماتریس پلیمری و جهتگیری تصادفی ذرات تقویت کننده (که به صورت یکنواخت بودن در جهات متقاطع هستند) ارائه شده است [۴۸]. در این مدل یک فرمول مختصر برای تعیین مدول توده ای و برشی کلی به صورت زیر بیان می گردد:

$$K = K_m + K_m \frac{\phi\varphi}{1 - \phi(1 - \alpha)} \quad (22,2)$$

$$\mu = \mu_m + \mu_m \frac{\phi\varphi}{1 - \phi(1 - \beta)}$$

پارامترهای α ، ψ ، φ و β به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\alpha = \frac{1}{3} T_{ijj} = \frac{F_1}{F_2}$$

$$\beta = \frac{1}{5} (T_{ijj} - T_{iij}) = \frac{1}{5} \left(\frac{2}{F_3} + \frac{2}{F_4} + \frac{F_5 - F_1}{F_2} \right)$$

$$\varphi = \frac{1}{3F_2} (2F_6A_1 + 6F_6B_1 + F_7A_2 + 3F_7B_2)$$

$$\psi = \frac{1}{5F_2} (F_8A_1 + F_9A_2 + 2F_6B_1 + F_7B_2) + \frac{2}{5} \left(\frac{A_3}{F_4} + \frac{A_4}{F_3} \right) - \frac{\varphi}{5}$$

پارامترهای مورد استفاده در معادلات بالا به صورت زیر هستند:

$$\begin{aligned}
F_1 &= 1 + \frac{1}{3} \left[\frac{1}{2} (1-R)(3f+9\theta-4) + 2R(1-\theta) \right] A_1 + \frac{1}{3} \left[(1-R)(2+3f) + R(2-\theta) \right] A_2 \\
&+ \frac{1}{3} (3-4R)(3\theta-2)(B_1-B_2) \\
F_2 &= 1 + \frac{1}{2} (1-R)(f+3\theta) A_1 + \left[(1-R)(1+f) + R(1-\theta) \right] A_2 + (3-4R) \left[\theta B_1 + R(1-\theta) B_2 \right] \\
&+ \frac{1}{2} (3-4R) \left[f + \theta - R(f-\theta+2\theta^2) \right] (A_1 A_2 + A_1 B_2 + 2B_1 A_2) \\
F_3 &= 1 + \left[1 - \left(f + \frac{3}{2} \theta \right) + R(f+\theta) \right] A_4 \\
F_4 &= 1 + 0.25 \left[(f+3\theta) + R(\theta-f) \right] A_3 \\
F_5 &= 2 + \frac{1}{2} (1-R)(f+3\theta) A_1 + \left[(1-R)(1+f) + R(1-\theta) \right] A_2 + (3-4R) \left[\theta B_1 + (1-\theta) B_2 \right] \\
F_6 &= 1 + \frac{1}{2} \left[(1-R)(2+3f) + R(2-\theta) \right] A_2 + \frac{1}{2} (3-4R)(2-3\theta) B_2 \\
F_7 &= 1 + \frac{1}{2} \left[(1-R)(3f+9\theta-4) + 4R(1-\theta) \right] A_1 + (3-4R)(3\theta-2) B_1 \\
F_8 &= 1 + \left[(1-R)(1+f) + R(1-\theta) \right] A_2 + (3-4R)(1-\theta) B_2 \\
F_9 &= 1 + \frac{1}{2} (1-R)(f+3\theta) + \theta(3-4R) B_1
\end{aligned}$$

ثوابت R ، A_i ($i=1,2,3$) و B_i ($i=1,2$) مقادیر بدون بعد مربوط به ثوابت الاستیک بوده:

$$\begin{aligned}
R &= \frac{3\mu_m}{3K_m + 4\mu_m} \\
A_1 &= \frac{k_f - l_f}{\mu_m}, \quad A_2 = \frac{n_f - l_f}{2\mu_m}, \quad A_3 = \frac{m_f}{\mu_m} - 1, \quad A_4 = \frac{p_f}{\mu_m} - 1 \\
B_1 &= \frac{2k_f + l_f}{9K_m} - \frac{2k_f - 2l_f}{6\mu_m}, \quad B_2 = \frac{n_f + 2l_f}{9K_m} - \frac{n_f - l_f}{6\mu_m}
\end{aligned}$$

پارامترهای p, m, n, k و L را می توان با استفاده از روابط زیر به دست آورد:

$$K = \frac{1}{2} (C_{2222} + C_{2233}), \quad n = C_{1111}, \quad m = \frac{1}{2} (C_{2222} - C_{2233}), \quad p = C_{1212}, \quad l = C_{1122}$$

برای یک ماده همسانگرد ثوابت بالا به صورت زیر قابل تعریف هستند: