

## بررسی دقت روابط تحلیلی مرسوم در جهت پیش‌بینی خواص نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانوذرات مختلف\*

### مقاله پژوهشی

سامرند رش احمدی<sup>(۱)</sup>سینا مسلمان<sup>(۲)</sup>

**چکیده** به منظور پیش‌بینی رفتار و خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانوذرات مختلف مدل‌های مختلف تحلیلی میکرومکانیکی و ماکرومکانیکی ارائه شده است. نوع، ابعاد و مشخصات مکانیکی ماده پایه و تقویت‌کننده از جمله مواردی هستند که در مدل‌های تحلیلی مختلف مورد توجه قرار گرفته‌اند. در برخی از مدل‌ها فرض‌ها و ساده‌سازی‌هایی انجام شده است که نتیجه آن ارائه روابطی است که پارامترهای کم‌تری را درگیر می‌کند. در برخی موارد این ساده‌سازی‌ها منجر به عدم دقت در پیش‌بینی نتایج می‌شوند. هدف از پژوهش پیش‌رو مقایسه نتایج آزمایشگاهی با مدل‌های مطرح شده و بررسی دقت آن‌ها و در نتیجه ارائه مناسب‌ترین مدل برای پیش‌بینی خواص نانوکامپوزیت‌های مورد مطالعه است. به این منظور پلیمر پلی‌متیل متاکریلات (PMMA) به عنوان ماده پایه و نانوذرات  $TiO_2$ ،  $SiO_2$  و  $Al_2O_3$  به عنوان تقویت‌کننده انتخاب شد. در این مطالعه مدول الاستیسیته مواد در بیشترین حالت به ترتیب حدود ۷، ۴ و ۴ درصد نسبت به نمونه پایه افزایش نشان دادند. نتایج حاصل از آزمایش استخراج گردید و با مدل‌های تحلیلی مطرح شده مورد مقایسه قرار گرفت. مقایسه‌ها نشان داد که مدل سه‌بعدی پن نتایج را با دقت مناسبی نسبت به نتایج آزمایشگاهی برای اکثریت نمونه‌ها پیش‌بینی می‌کند.

**واژه‌های کلیدی** نانوکامپوزیت، خواص مکانیکی، مدل‌های تحلیلی، نانوذرات، مدول یانگ.

### مقدمه

از زمان‌های گذشته افزودن ماده‌ای به عنوان فاز دوم به ماده پایه، یکی از اصلی‌ترین راه‌ها برای بهبود خواص مکانیکی محسوب می‌شود [1-3]. در سال‌های اخیر، مواد مرکب یا کامپوزیت‌ها در صنایع مختلف به دلیل خواص ترمودینامیکی مناسب، دوام و وزن پایین و توانایی بالا در تحمل بار بسیار مورد توجه و استقبال قرار گرفته‌اند و روز به روز بر کاربرد آن‌ها در حوزه‌های مختلف افزوده می‌شود. اخیراً افزودن تقویت‌کننده‌هایی در ابعاد نانو منجر به تولید نانوکامپوزیت‌هایی شده است که به خاطر خواص فوق‌العاده مکانیکی از جمله نسبت استحکام به وزن بالا، توجهات فراوانی را به خود جلب کرده‌اند [4-5].

در مقایسه با فناوری میکرو، نانو تکنولوژی عملکرد و نمودی کاملاً متفاوت نشان می‌دهد. محصولات نانوکامپوزیتی حاوی تقویت‌کننده‌هایی در ابعاد نانو (کم‌تر از ۱۰۰ نانومتر) هستند. اکثر خواص مکانیکی از جمله مدول یانگ و پایداری

حرارتی [6-7]، مدول و استحکام خمشی [7]، قابلیت برش‌کاری [8]، چقرمگی شکست [9] و رسانایی الکتریکی و حرارتی [10] امکان بهبود توسط نانوذرات تقویت‌کننده را دارند. در واقع، برای تولید نانوکامپوزیت‌های پلیمری با خواص مطلوب، انواع مختلفی از نانوذرات می‌توانند به ماده پایه افزوده شوند [11-12]. در همین راستا، محققان در مورد محصولات فعلی و آینده مرتبط با علوم نانو مطالعات زیادی انجام داده‌اند؛ آن‌ها پیش‌بینی می‌کنند که نانومواد، ابعاد جدیدی در کاربردهای صنعتی بگشایند.

در راستای بهبود رفتار مکانیکی مواد با افزودن تقویت‌کننده‌های مختلف، مطالعات متعددی انجام گرفته است. در این ارتباط می‌توان به بررسی رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های دندان پزشکی بر پایه رزین تقویت‌شده با  $TiO_2$ ، مورد مطالعه هوا و همکارانش [13] اشاره کرد. در این بررسی عملی اثرات نسبت حجمی، نسبت ابعادی و دیگر شاخص‌های بین ماده پایه و تقویت‌کننده مورد بررسی قرار

\* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۰/۳/۱۰ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۰/۹/۱۵ می‌باشد.

(۱) دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه ارومیه.

(۲) نویسنده مسئول، دانشیار دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه ارومیه.

مکانیکی پلیمر پلی متیل متاکریلات ( Poly methyl methacrylate (PMMA) مورد مطالعه قرار می‌گیرد و در انتها نتایج آزمایشگاهی با نتایج حاصل از روابط تحلیلی مذکور مقایسه می‌شوند تا دقیق‌ترین مدل یا مدل‌ها در تخمین خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانوذرات اکسیدی ذکر شده، انتخاب شود.

### مدل‌های تئوری

مدل‌هایی که برای توضیح وضعیت کلی و یا بیان رفتار یک ماده طراحی شده‌اند، به نام مدل‌های تئوری شناخته می‌شوند. هدف از ارائه این مدل‌ها، استخراج رابطه‌ای است که در نهایت بتوان با کمک آن‌ها رفتار ماده را به راحتی و بدون نیاز به آزمایش‌های عملی پیش‌بینی کرد. در ادامه تعدادی از پرکاربردترین مدل‌های ماکرومکانیکی و میکرومکانیکی [17] در جهت پیش‌بینی رفتار کششی کامپوزیت‌ها مطرح شده و مورد بررسی قرار گرفته‌اند. اساس این روابط برپایه قانون اختلاط کامپوزیت‌ها (رابطه ۱) استوار است. در ادامه همه مدل‌ها تشریح و پارامترهای استفاده‌شده در این روابط و خود روابط در قالب جدول (۱) و جدول (۲) مطرح شده‌اند.

جدول ۱ پارامترهای استفاده‌شده در روابط مدل‌های تحلیلی

نماد	شرح
Ec	مدول یانگ کامپوزیت
Ef	مدول یانگ تقویت‌کننده
Em	مدول یانگ ماتریس
Gc	مدول برشی کامپوزیت
Gf	مدول برشی تقویت‌کننده
Gm	مدول برشی ماتریس
Vf	درصد حجمی تقویت‌کننده
Kc	مدول بالک کامپوزیت
Kf	مدول بالک تقویت‌کننده
Km	مدول بالک ماتریس
vm	نسبت پواسون ماتریس
vf	نسبت پواسون تقویت‌کننده
l	طول ذرات تقویت‌کننده
d	قطر ذرات تقویت‌کننده

گرفته‌است. نتایج حاصل، برتری آشکار خواص مکانیکی کامپوزیت تقویت‌شده با نانوذرات در مقایسه با کامپوزیت‌های تقویت‌شده با میکروالیاف را نشان می‌دهد. در کنار مطالعات عملی، بررسی‌های تحلیلی نیز مورد توجه قرار گرفته‌اند. در این بررسی‌ها تمرکز بر روی مدل‌های تئوری است که به کمک آن‌ها می‌توان رفتار مواد مرکب با درصد‌های مختلف از تقویت‌کننده را پیش‌بینی کرد. این مدل‌ها با در نظر گرفتن پارامترهایی از قبیل شکل، اندازه و نوع ذرات ماده پایه و پرکننده ارائه شده‌اند. استفاده از این روابط در جهت کاهش آزمایش‌های عملی و کاهش اتلاف زمان و متعاقباً هزینه‌های مالی ناشی از آن است. از پژوهش‌های صورت‌گرفته در این زمینه می‌توان به کار تاکر و لیانگ [14] اشاره کرد. در این مطالعه سعی شده‌است سفتی کامپوزیت‌های تقویت‌شده با الیاف کوتاه هم‌جهت را با استفاده از مدل‌های میکرومکانیکی، پیش‌بینی کنند. مدل‌های مختلف مطرح و مورد مقایسه قرار گرفته‌اند و نهایتاً مدل موری تاناکا به‌عنوان مناسب‌ترین مدل برای پیش‌بینی سفتی ماده حاصل انتخاب شده‌است. سیف‌الاسلام و همکارانش [15] اثرات ترکیب درصد‌ها و اندازه‌های مختلف از نانوذرات اکسیدسیلیسیوم با اپوکسی را مورد مطالعه آزمایشگاهی و تحلیلی قرار داده‌اند. در این بررسی نشان داده شده‌است که مدول یانگ، تنش نهایی و تنش تسلیم نانوکامپوزیت حاصل با افزایش ذرات تقویت‌کننده به‌صورت خطی افزایش می‌یابد. از دیگر کارهای پیشین در زمینه نانوکامپوزیت‌ها می‌توان به تحقیق فریدون و همکارانش [16] اشاره کرد. در این مطالعه اثرات افزودن درصد‌های مختلف نانولوله‌های کربنی به پلی‌پروپیلین مورد مطالعه قرار گرفته و نتایج آزمایش برای ارائه مدلی در جهت پیش‌بینی رفتار نانوکامپوزیت حاصل با روابط تحلیلی مقایسه شده‌است.

از آنجایی که در مطالعات گذشته مقایسه جامعی بین روابط تحلیلی موجود صورت نگرفته بود، تصمیم به بررسی و انجام این مهم و کارایی‌سنجی روابط موجود در قیاس با یکدیگر گرفته شد. ابتدا مدل‌های مختلف تحلیلی معرفی می‌شوند. سپس اثرات درصد‌های مختلف حجمی نانوذرات اکسیدی تیتانیوم، سیلیسیوم و آلومینیوم بر روی خواص

جدول ۲ روابط ارائه شده برای مدل‌های تحلیلی

شماره رابطه	رابطه
(۱)	$E_c = V_f E_f + (1 - V_f) E_m$
(۲)	$E_c \approx V_f \left( \frac{16}{45} E_f + 2 E_m \right) + \frac{8}{9} E_m$
(۳)	$G_c \approx V_f \left( \frac{2}{15} E_f + \frac{3}{4} E_m \right) + \frac{1}{3} E_m$
(۴)	$E_{c,2D} = \frac{V_f}{\pi} E_f + \left( 1 - \frac{V_f}{\pi} \right) E_m$
(۵)	$v_{c,2D} = \frac{V_f}{\pi} v_f + \left( 1 - \frac{V_f}{\pi} \right) v_m$
(۶)	$E_{c,3D} = \frac{V_f}{2\pi} E_f + \left( 1 - \frac{V_f}{2\pi} \right) E_m$
(۷)	$v_{c,3D} = \frac{V_f}{2\pi} v_f + \left( 1 - \frac{V_f}{2\pi} \right) v_m$
(۸)	$E_{c,2D} = \frac{V_f}{3} E_f + (1 + V_f) E_m$
(۹)	$E_{c,3D} = \frac{V_f}{6} E_f + [1 + (1 + v_m) V_f] E_m$
(۱۰)	$E_c = \frac{3}{8} [V_f E_f + (1 - V_f) E_m] + \frac{5}{8} \left[ \frac{E_f E_m}{E_m V_f + (1 - V_f) E_f} \right]$
(۱۱-الف)	$\frac{E_c}{E_m} = \frac{3}{8} \left[ \frac{1 + \frac{1}{d} n_l V_f}{1 - n_l V_f} \right] + \frac{5}{8} \left[ \frac{1 + 2n_r V_f}{1 - n_r V_f} \right]$
(۱۱-ب)	$n_l = \frac{\left( \frac{E_f}{E_m} - 1 \right)}{\left( \frac{E_f}{E_m} - 2 \frac{1}{d} \right)}$
(۱۱-ج)	$n_r = \frac{\left( \frac{E_f}{E_m} - 1 \right)}{\left( \frac{E_f}{E_m} + 2 \right)}$
(۱۲)	$\frac{E_c}{E_m} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1 + \frac{1}{d} n_l V_f}{1 - n_l V_f} \right] + \frac{4}{5} \left[ \frac{1 + 2n_r V_f}{1 - n_r V_f} \right]$
(۱۳)	$\frac{E_c}{E_m} = 1 + 2.5 V_f$
(۱۴)	$\frac{1}{E_{cT}} = \frac{V_f}{E_f} + \frac{1 - V_f}{E_m}$
(۱۵)	$E_{c,L} = V_f E_f + (1 - V_f) E_m$
(۱۶)	$K_{c,upper} = K_f + (1 - V_f) \left[ \frac{1}{K_m - K_f} + \frac{3V_f}{3K_f + 4G_f} \right]^{-1}$
(۱۷)	$K_{c,lower} = K_m + V_f \left[ \frac{1}{K_f - K_m} + \frac{3(1 - V_f)}{3K_m + 4G_m} \right]^{-1}$
(۱۸)	$G_{c,upper} = G_f + (1 - V_f) \left[ \frac{1}{G_m - G_f} + \frac{6V_f(K_f + 2G_f)}{5G_f(3K_f + 4G_f)} \right]^{-1}$
(۱۹)	$G_{c,lower} = G_m + V_f \left[ \frac{1}{G_f - G_m} + \frac{6(1 - V_f)(K_m + 2G_m)}{5G_m(3K_m + 4G_m)} \right]^{-1}$
(۲۰)	$E = \frac{9K}{1 + 3K/G}$

سیستم دوبعدی و سه‌بعدی در نظر گرفته‌اند. در این مدل با استفاده از بررسی برهم‌کنش بین ماتریس و ذرات تقویت‌کننده، و در نظر گرفتن این فرض که درصد حجمی تقویت‌کننده باید کم‌تر از  $0/2$  باشد، مدول یانگ در حالت دوبعدی و سه‌بعدی به شکل روابط (۸) و (۹) مطرح می‌شود. بین نتایج رابطه (۸) و نتایج حاصل از آزمایش، مقایسه دیگری توسط لی (Lee) [22] انجام شده است. در این بررسی نشان داده شده است که گاهی در نسبت‌های حجمی پایین تقویت‌کننده، نتایج با اختلاف در حدود ۰ تا ۱۵٪ بیشتر از خروجی‌های آزمایش هستند. این اختلاف به پیوندهای غیر-مؤثر و اثر انتهایی الیاف ریز نسبت داده شده است.

#### مدل هیرش (Hirsch's Model)

هیرش [23] با انجام مطالعاتی، مدول یانگ کامپوزیت را به صورت ترکیبی از مدول طولی و عمودی در نظر گرفته است. رابطه‌ای هم که ارائه شده (رابطه ۱۰)، متشکل از دو قسمت است که بخش اول آن ضریبی از مدول طولی و بخش دوم آن ضریبی از مدول عمودی کامپوزیت است.

#### رابطه اصلاح‌شده هالپین-تسای

##### (Modified Halpin-Tsai relation)

این رابطه با اعمال مقادیر مربوط به تنش طولی و عمودی کامپوزیت از رابطه هالپین-تسای [24] در مدل هیرش (رابطه ۱۰) تشکیل می‌شود و به رابطه اصلاح‌شده هالپین-تسای [25] معروف است. مدل مذکور برای مواد کامپوزیتی تقویت‌شده با الیاف کوتاه و جهت‌گیری تصادفی، پاسخ‌های بسیار مناسبی را پیش‌بینی می‌کند (روابط ۱۱-الف تا ۱۱-ج).

#### رابطه لیونگود و گوتلر

##### (Lavengood and Goettler relation)

لیونگود و گوتلر [22] با انجام مطالعات و اصلاح ضرایب عددی رابطه تغییر یافته هالپین-تسای، مدلی دیگر برای پیش‌بینی رفتار کامپوزیت‌ها پیشنهاد دادند. در این رابطه، به جای ضرایب  $\frac{3}{8}$  و  $\frac{5}{8}$  از رابطه (۱۱-الف)، به ترتیب  $\frac{1}{4}$  و  $\frac{3}{8}$

#### مدل تقریب مانرا (Manera Approximation Model)

مانرا [18] رابطه‌ای تقریبی برای پیش‌بینی خواص الاستیک کامپوزیت‌های شکل‌گرفته با تقویت‌کننده‌های طول کوتاه و با چینش تصادفی پیشنهاد داده است. خواص تغییرناپذیر کامپوزیت‌ها که توسط تسای (Tsai) و پاگانو (Pagano) [19] مطرح شده بودند، در کنار فرمولاسیون میکرومکانیکی پاک (Puck) [18] برای این رابطه مورد استفاده قرار گرفته‌اند. مانرا تعدادی فرض در نظر گرفته و رابطه نامتغیرهای پاک را ساده‌سازی کرده است. این فرض‌ها شامل نسبت ابعادی بالای فیبرها (بیشتر از ۳۰۰)، فیبرهای دوبعدی با توزیع تصادفی و رفتار فیبرهای ناپیوسته با توزیع تصادفی به‌عنوان ورقه‌هایی با تعداد لایه‌های نامحدود که در همه جهات چیده شده‌اند، است. در نتیجه رابطه تقریب مانرا برای مدول یانگ و برشی به ترتیب به شکل رابطه (۲) و رابطه (۳) مطرح شده است. از روابط (۲) و (۳) استنتاج می‌شود که نتایج به دست آمده، رابطه  $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$  را تصدیق می‌کنند که در آن  $\nu$  ضریب پواسون،  $E$  مدول یانگ و  $G$  مدول برشی است. برای حصول نتایج با دقت مناسب، مانرا پیشنهاد داد که  $E_m$  در محدوده  $2 \text{ GPa} \leq E_m \leq 4 \text{ GPa}$  انتخاب شود.

#### مدل پن یا رابطه چگالی الیاف

##### (Modified Density Function-Pan's Model)

اساس ایده تئوری پن [20] ایجاد رابطه‌ای بین نسبت حجمی و نسبت سطحی تقویت‌کننده در حالتی است که تقویت‌کننده‌ها در یک جهت چیده نشده باشند. پن در این مدل با استفاده از بسط قانون ساده اختلاط کامپوزیت‌ها و بهره‌گیری از یک معادله چگالی فرضی، رابطه‌ای را بر مبنای جهت‌گیری نامنظم الیاف در فضای دوبعدی و سه‌بعدی ارائه داده است (روابط ۴ تا ۷). این مدل برای کامپوزیت‌های با جهت‌گیری منظم و با طول بلند نیز معتبر است.

#### مدل کریستینسن و وال

##### (Christensen and Waal's Model)

کریستینسن و وال [21] برای بررسی رفتار یک کامپوزیت با جهت‌گیری تصادفی الیاف تقویت‌کننده همانند مدل پن، دو

قرار داده می‌شود تا مدل جدید حاصل شود (رابطه ۱۲).

### مدل کران بالا و پایین هاشین (Hashin) و اشتریکمن (Shtirkman)

هاشین و اشتریکمن [30-31] کامپوزیت را به صورت میکرو سکویی هم سان و شبه هم‌گن در نظر گرفتند. در این مدل شکل تقویت‌کننده عامل محدودکننده محسوب نمی‌شود؛ با این فرض کران بالا و پایین کامپوزیت را براساس اصول متغیر الاستیسیته تخمین زدند. بسته به این که سفتی فاز زمینه بیش تر یا کم تر از تقویت‌کننده باشد، کران بالا و پایین مدول بالک ( $K_{c,upper}$  و  $K_{c,lower}$ ) و مدول برشی ( $G_{c,upper}$  و  $G_{c,lower}$ ) کامپوزیت از روابط (۱۶) الی (۱۹) حاصل می‌شود. کران بالا و پایین مدول یانگ نیز از رابطه (۲۰) قابل محاسبه خواهد بود.

#### مراحل تجربی

آماده‌سازی نمونه‌ها طبق شرح در ادامه در چندین مرحله صورت گرفت. در گام اول نانوذرات تقویت‌کننده در درصد‌های جرمی موردنظر با پلیمر (که از قبل به منظور رطوبت‌زدایی در دستگاهی مجزا خشک شده بود) ترکیب و تبدیل به گرانول شدند. پلی‌متیل متاکریلات به‌عنوان فاز زمینه و نانوذرات اکسیدی تیتانیوم، سیلیسیوم و آلومینیوم با اندازه ذرات تقریباً ۲۰ نانومتر به‌عنوان تقویت‌کننده انتخاب شدند. در این مرحله از دستگاه اکسترودر دومادورنه ZSK-25 (ساخت شرکت آلمانی کپریون ورنر و فلایدرر (Coperion Werner & Pfeleiderer)) برای اختلاط ذوبی مواد استفاده گردید و گرانول‌های نانوکامپوزیتی در درصد‌های جرمی مدنظر حاصل گردیدند. پیش از تزریق در قالب، برای دومین بار خشک کردن گرانول‌ها صورت گرفت. در گام بعدی گرانول‌ها به‌روش قالب‌گیری تزریقی در قالب‌های نمونه استاندارد کشش تزریق و نمونه‌های مورد نیاز آزمایش مطابق شکل (۱) آماده شدند. برای انجام تست کشش از دستگاه تست کشش (SANTAM STM-150) طبق استاندارد ASTM-D638 استفاده شد. هم‌چنین به‌منظور بررسی ساختار نمونه‌های ساخته‌شده، از نمونه‌ها تست SEM گرفته شد. همان‌گونه که در شکل (۲) مشخص است، ناحیه کلوخه‌ای در خروجی تست‌ها مشاهده نمی‌شود و توزیع ذرات تقویت‌کننده به‌شکل مناسب و یک‌نواخت صورت

### مدل اینشتین (Einstein's Model)

اینشتین [26-27] برای توصیف ارتباط بین نسبت حجمی ذرات صلب کروی تقویت‌کننده و مدول یانگ کامپوزیت‌ها، یک مدل خطی پیشنهاد داده‌است. با فرض چسبندگی کامل بین ذرات تقویت‌کننده و ماده پایه و نبود عکس‌العمل بین ذرات، رابطه حاصل از این مدل به شکل رابطه (۱۳) است. این رابطه فقط برای بارگذاری‌های کم معتبر است و برهم‌کنش‌های زیرذره‌ای را در نظر نمی‌گیرد.

### مدل کران بالای وویگت (Voigt) و کران پایین رئوس (Reuss)

در این مدل فرض شده‌است که تقویت‌کننده‌ها و فاز زمینه تحت کرنش یک‌نواخت مشابهی درجهت الیاف قرار بگیرند. باتوجه به همین فرض، وویگت [28] مدول مؤثر در امتداد تقویت‌کننده‌ها را به‌شکل رابطه (۱) استخراج کرده‌است. رئوس [29] نیز رابطه ذکرشده را برای حالت تنش یک‌نواخت درجهت عمود بر امتداد الیاف تقویتی اعمال کرده و رابطه مدول یانگ مؤثر به‌شکل رابطه (۱۴) درآمده‌است. در این رابطه زیرنویس‌های L و T به‌ترتیب به جهت‌های طولی و عمود بر طولی در تقویت‌کننده اشاره دارند. معادله (۱) یک رابطه با کوپلینگ موازی است که به نام قانون اختلاط نیز شناخته می‌شود؛ درحالی‌که معادله‌های (۱۴) و (۱۵) رابطه‌هایی با کوپلینگ معکوس‌اند و با نام قانون اختلاط معکوس شناخته می‌شوند.

معادلات (۱)، (۱۴) و (۱۵) می‌توانند برای همه کامپوزیت‌های دوفازی فارغ از شکل تقویت‌کننده تعمیم داده شوند. در روابط (۱۴) و (۱۵)،  $E_{cL}$  و  $E_{cT}$  به‌ترتیب کران‌های بالا و پایین مدول یانگ کامپوزیت‌ها را بیان می‌کنند. هم‌چنین در این روابط، فقط سه پارامتر درگیر هستند که عبارتند از مدول یانگ تقویت‌کننده، ماتریس و نسبت حجمی تقویت‌کننده.

گرفته‌است.

## نتایج و بحث

برای انجام محاسبات، اولین گام تبدیل نسبت‌های جرمی به حجمی است. در جدول (۳) برای تمام نمونه‌ها، نسبت‌های حجمی، با توجه به درصد وزنی نانوکامپوزیت‌ها و چگالی آن‌ها، به تفکیک محاسبه شده‌است.

جدول ۳ چگالی و کسر حجمی نمونه‌های مورد بررسی

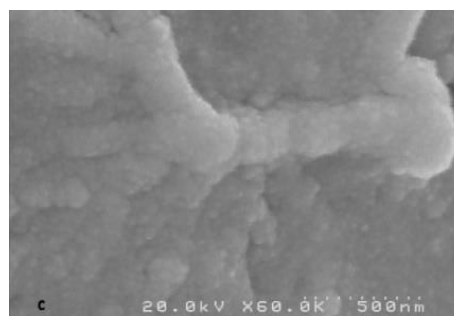
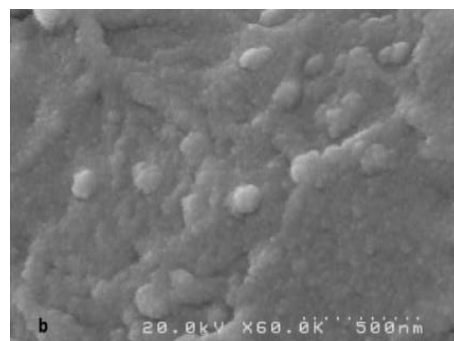
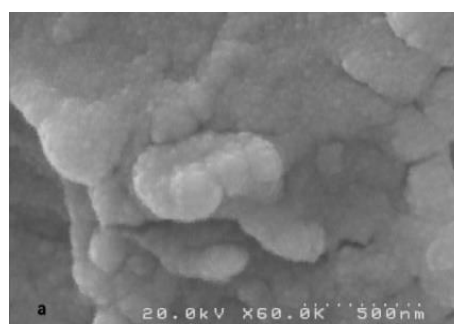
$V_f$	چگالی ( $\text{gr}/\text{cm}^3$ )	ماده
---	۱/۱۸۰	Pure PMMA
۰/۰۰۱۵	۱/۱۸۹	PMMA + $\text{TiO}_2$ 0.5 wt %
۰/۰۰۳۰	۱/۱۹۳	PMMA + $\text{TiO}_2$ 1.0 wt %
۰/۰۰۶۰	۱/۲۰۲	PMMA + $\text{TiO}_2$ 2.0 wt %
۰/۰۰۲۵	۱/۱۸۳	PMMA + $\text{SiO}_2$ 0.5 wt %
۰/۰۰۵۰	۱/۱۸۶	PMMA + $\text{SiO}_2$ 1.0 wt %
۰/۰۱۰۰	۱/۱۹۲	PMMA + $\text{SiO}_2$ 2.0 wt %
۰/۰۰۱۵	۱/۱۸۴	PMMA + $\text{Al}_2\text{O}_3$ 0.5 wt %
۰/۰۰۳۰	۱/۱۸۸	PMMA + $\text{Al}_2\text{O}_3$ 1.0 wt %

نتایج به‌دست‌آمده در جدول (۴) نشان می‌دهد که تأثیر نانوذرات تیتانیوم‌دی‌اکسید بر روی پلیمر مورد مطالعه بیشتر از دیگر تقویت‌کننده‌ها بوده‌است. این تقویت‌کننده در هر سه درصد وزنی در ترکیب با ماده پایه منجر به افزایش مدول یانگ کامپوزیت حاصل شده‌است. این نتایج در هماهنگی با نتایج ترکیب اکسید تیتانیوم و رزین اپوکسی هستند [32]. در پژوهش معرفی شده نیز افزودن درصد‌های بیشتر تقویت‌کننده موجب بهبود خواص مکانیکی کامپوزیت حاصل شده بود.

هم‌چنین از نتایج چنان برمی‌آید که این روند افزایشی مدول یانگ درمورد تقویت‌کننده اکسید سیلیسیم نیز حفظ شده‌است؛ اما نکته قابل توجه به نمونه حاوی ۰/۵ درصد وزنی برمی‌گردد که مدول یانگ در ابتدا کاهش را نشان می‌دهد، اما در درصد‌های بالاتر منجر به بهبود آن می‌شود. در مورد اکسید آلومینیوم روند رشد برعکس اکسید تیتانیوم و سیلیسیم نزولی بوده‌است و نشان از این دارد که ۱/۰ درصد وزنی از تقویت‌کننده اکسید آلومینیوم منجر به کاهش مدول



شکل ۱ نمونه‌های ساخته‌شده برای تست کشش

شکل ۲ تصویر SEM از سطح مقطع نمونه‌های حاوی (a) ۲٪ وزنی  $\text{TiO}_2$ ، (b) ۲٪ وزنی  $\text{SiO}_2$  و (c) ۱٪ وزنی  $\text{Al}_2\text{O}_3$

نظر به خواص مکانیکی نانوکامپوزیت و ماده پایه و هم‌چنین درصد حجمی نانوکامپوزیت بستگی دارد. مشخصاً با افزایش در صد حجمی، بازه نیز بزرگ‌تر می‌شود و خطا هم افزایش می‌یابد. در نتیجه درصد اختلاف بالای مدول یانگ کامپوزیت حاصل با کران بالای وویگت و یا کران بالای اشتريکمن کاملاً قابل توجیه است و با صحت مدل‌ها و یا نتایج حاصل از آزمایش متناقض نیست.

مورد حائز اهمیت دیگر در نتایج به‌دست‌آمده، دقت بیشتر مدل‌های سه‌بعدی پن و کریستین و وال نسبت به مدل‌های دو بعدی آن‌ها است. خطای بیشتر مدل‌های دو بعدی نسبت به امثال سه‌بعدی آن‌ها، به فرض‌های موجود در آن‌ها برمی‌گردد. در مدل‌های دو بعدی، فرض بر این است که الیاف نانوکامپوزیتی در امتداد صفحه پراکنده شده‌است. این فرض در مورد کامپوزیت‌ها با الیاف طول‌بلند که با روش‌هایی از قبیل تزریق در امتداد محور طولی تولید شده‌اند صحت بیشتری دارد. در ضمن، خطای بالای به‌دست‌آمده از مدل لیونگود و گوتلر را می‌توان به این نکته ارتباط داد که این مدل بیشتر برای کامپوزیت‌ها با نسبت حجمی بالای فیلر طراحی شده‌است. در نتیجه خطای بالای این مدل در نمونه‌هایی با نسبت حجمی پایین (۰/۰۱ و کم‌تر) کاملاً قابل توجیه است. همان‌گونه که در جداول مشخص است، با بالاتر رفتن نسبت حجمی، خطای این مدل کم‌تر و کم‌تر شده‌است.

رفتار کامپوزیت در دو مورد اضافه کردن اکسید سیلیسیم با ۰/۵ درصد وزنی و اکسید آلومینیوم با ۱/۰ درصد وزنی با مدل‌های تحلیلی در تناقض است. در مورد اکسید سیلیسیم که تنها در درصد وزنی پایین، این رفتار را از خود نشان می‌دهد، می‌توان دلیل این ناسازگاری را به عدم پراکندگی یکنواخت نانوکامپوزیت‌ها ربط داد. در حالی که در مورد اکسید آلومینیوم با درصد وزنی بالاتر می‌توان این موضوع را به پیوند نامناسب بین ذرات تقویت‌کننده و ماده پایه و یا عدم سازگاری بین اکسید آلومینیوم و پلی‌متیل-متاکریلات در درصدهای وزنی بالا ارتباط داد.

یانگ نانوکامپوزیت تولیدشده می‌گردد. این کاهش را می‌توان به این موضوع نسبت داد که در مقادیر بیشتر از ۰/۵ درصد وزنی از تقویت‌کننده، پیوند بین ذرات به‌خوبی شکل نگرفته و استحکام بین پیوندهای تشکیل‌یافته کاهش داشته‌است.

جدول ۴ نتایج حاصل از تست نمونه‌های مورد بررسی

ماده	مدول الاستیک (MPa)	تغییر نسبت به نمونه خالص (%)
Pure PMMA	۲۹۱۳/۷۷	---
PMMA + TiO <sub>2</sub> 0.5 wt %	۲۹۴۹/۰۰	۱/۲۱
PMMA + TiO <sub>2</sub> 1.0 wt %	۳۰۲۲/۹۰	۳/۷۵
PMMA + TiO <sub>2</sub> 2.0 wt %	۳۱۱۱/۵۰	۷۹/۶
PMMA + SiO <sub>2</sub> 0.5 wt %	۲۸۶۰/۹۰	-۱/۸۱
PMMA + SiO <sub>2</sub> 1.0 wt %	۲۹۶۴/۶۰	۱/۷۴
PMMA + SiO <sub>2</sub> 2.0 wt %	۳۰۲۴/۲۰	۳/۷۹
PMMA + Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 0.5 wt %	۳۰۳۲/۶۰	۴/۰۸
PMMA + Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 1.0 wt %	۲۶۹۸/۹۰	-۷/۳۷

نهایتاً نتایج حاصل از آزمایش‌های تحلیلی با نتایج حاصل از رابطه‌های (۲۰-۲) مقایسه شده و در جداول (۶) تا (۸) آورده شده‌است. برای حصول نتایج هر کدام از مدل‌ها، از پارامترهای موجود در جدول (۵) استفاده شده‌است. در ضمن توجه شود که در انجام محاسبات روابط هالپین-تسای و لیونگود-گوتلر نسبت منظر یا نسبت ابعادی ( $l/d$ ) با فرض کروی بودن نانوذرات، ۱ در نظر گرفته شده‌است. در صد اختلاف نتایج هر کدام از مدل‌ها با نمونه آزمایش‌شده نیز محاسبه شده و در جداول ارائه شده‌است.

همان‌گونه که در نتایج موجود در جداول هم مشخص است، نتایج حاصل از آزمایش و مدل‌های تحلیلی با هم سازگارند. هرچند باید توجه کرد که هدف مدل کران بالای وویگت و کران پایین رنوس و هم‌چنین مدل کران بالا و پایین هاشین و اشتريکمن بیشتر مشخص کردن بازه‌ای برای خواص مکانیکی کامپوزیت حاصل است. اندازه بازه مورد

جدول ۵ خواص مکانیکی مواد استفاده‌شده

ماده	مدول یانگ (MPa)	مدول برشی (MPa)	مدول بالک (MPa)	ضریب پواسون
پلی‌متیل متاکریلات (PMMA)	۲۹۱۳/۷۷	۱۰۴۹/۶	۳۳۹۸	۰/۳۷۵
اکسید تیتانیم (TiO <sub>2</sub> )	۲۳۷۲۵۰	۹۲۷۵۰	۲۱۰۲۰۰	۰/۲۸
اکسید سیلیسیم (SiO <sub>2</sub> )	۶۷۳۶۰	۲۸۴۵۰	۳۳۹۱۰	۰/۱۷
اکسید آلومینیوم (Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	۲۳۹۷۵۰	۹۷۶۳۰	۱۶۰۳۸۰	۰/۲۷

جدول ۶ مدول یانگ حاصل از نتایج تحلیلی و مقایسه با مقادیر آزمایش‌شده برای نمونه‌های حاوی نانوذرات TiO<sub>2</sub>

مدل	PMMA + TiO <sub>2</sub> 0.5 wt % (MPa)	PMMA + TiO <sub>2</sub> 1.0 wt % (MPa)	PMMA + TiO <sub>2</sub> 2.0 wt % (MPa)
نتیجه آزمایش	۲۹۴۹/۰۰	۳۰۲۲/۹۰	۳۱۱۱/۵۰
مدل تقریب مانرا	۲۷۲۵/۲۹	۲۸۶۰/۵۷	۳۱۳۱/۱۲
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	-۷/۵۸	-۵/۳۷	۰/۶۳
مدل پن دوبعدی	۳۰۲۵/۶۶	۳۱۳۷/۵۴	۳۳۶۱/۳۲
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۲/۶۰	۳/۷۹	۸/۰۳
مدل پن سه‌بعدی	۲۹۶۹/۷۱	۳۰۲۵/۶۶	۳۱۳۷/۵۴
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۰/۷۰	۰/۰۹	۰/۸۴
مدل کریستین و وال دوبعدی	۳۰۳۶/۷۷	۳۱۵۹/۷۶	۳۴۰۵/۷۵
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۲/۹۸	۴/۵۳	۹/۴۶
مدل کریستین و وال سه‌بعدی	۲۹۷۹/۰۹	۳۰۴۴/۴۱	۳۱۷۵/۰۶
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۱/۰۲	۰/۷۱	۲/۰۴
مدل هیرش	۳۰۴۸/۲۹	۳۱۸۲/۸۱	۳۴۵۱/۸۸
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۳/۳۷	۵/۲۹	۱۰/۹۴
مدل اصلاح شده هالپین-تسای	۲۹۲۵	۲۹۳۶/۲۷	۲۹۵۸/۹۱
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	-۰/۸۱	-۲/۸۷	-۴/۹۰
مدل لیونگود و گوتلر	۳۸۰۲/۴۶	۳۸۱۷/۰۶	۳۸۴۶/۴۰
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۲۸/۹۴	۲۶/۲۷	۲۳/۶۲
مدل اینشتین	۲۹۲۴/۷۰	۲۹۳۵/۶۲	۲۹۵۷/۴۸
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	-۰/۸۲	-۲/۸۹	-۴/۹۵
مدل وویگت	۳۲۶۵/۲۷	۳۶۱۶/۷۸	۴۳۱۹/۷۹
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۱۰/۷۲	۱۹/۶۴	۳۸/۸۳
مدل رئوس	۲۹۱۸/۰۹	۲۹۲۲/۴۳	۲۹۳۱/۱۴
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	-۱/۰۵	-۳/۳۲	-۵/۸۰
مدل کران بالای هاشین و اشتریکمن	۳۰۴۴/۱۸۱۹	۳۲۳۳/۲۵	۳۶۱۰/۸۲
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	۳/۲۳	۶/۹۶	۱۶/۰۴
مدل کران پایین هاشین و اشتریکمن	۲۸۶۳/۶۸	۲۸۷۲/۵۴	۲۸۹۰/۳۲
تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)	-۲/۸۹	-۴/۹۷	-۷/۱۱



جدول ۷ مدول یانگ حاصل از نتایج تحلیلی و مقایسه با مقادیر آزمایش شده برای نمونه‌های حاوی نانوذرات SiO<sub>2</sub>

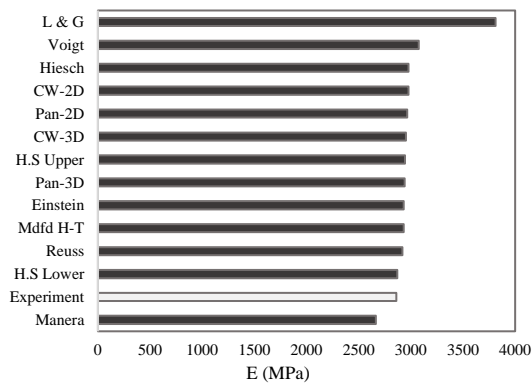
PMMA + SiO <sub>2</sub> 2.0 wt % (MPa)	PMMA + SiO <sub>2</sub> 1.0 wt % (MPa)	PMMA + SiO <sub>2</sub> 0.5 wt % (MPa)	مدل
۳۰۲۴/۲۰	۲۹۶۴/۶۰	۲۸۶۰/۹۰	نتیجه آزمایش
۲۸۸۷/۸۳	۲۷۳۸/۹۲	۲۶۶۴/۴۷	مدل تقریب مانرا
-۴/۵۱	-۷/۶۱	-۶/۶۸	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۱۱۸/۹۴	۳۰۱۶/۳۵	۲۹۶۵/۰۶	مدل پن دوبعدی
۳/۱۳	۱/۷۵	۳/۶۴	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۰۱۶/۳۵	۲۹۶۵/۰۶	۲۹۳۹/۴۲	مدل پن سه بعدی
-۰/۲۶	-۰/۰۲	۲/۷۴	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۱۶۷/۴۷	۳۰۴۰/۶۲	۲۹۷۷/۲۰	مدل کریستین و وال دوبعدی
۴/۷۴	۲/۵۶	۴/۰۶	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۰۶۶/۱۲	۲۹۸۹/۹۴	۲۹۵۱/۸۶	مدل کریستین و وال سه بعدی
۱/۳۹	-۰/۸۵	۳/۱۸	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۱۷۳/۰۷	۳۰۴۳/۳۸	۲۹۷۸/۵۶	مدل هیرش
۴/۹۲	۲/۶۶	۴/۱۱	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۸۵/۴۴	۲۹۴۹/۴۳	۲۹۳۱/۵۶	مدل اصلاح شده هالپین - تسای
-۱/۲۸	-۰/۵۱	۲/۴۷	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۸۸۰/۸۷	۳۸۳۴/۱۷	۳۸۱۰/۹۸	مدل لیونگود و گوتلر
۲۸/۳۳	۲۹/۳۳	۳۳/۲۱	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۸۶/۶۱	۲۹۵۰/۱۹	۲۹۳۱/۹۸	مدل اینشتین
-۱/۲۴	-۰/۴۹	۲/۴۸	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۵۵۸/۳۲	۳۲۳۶/۰۵۱	۳۰۷۴/۹۱	مدل وویگت
۱۷/۶۶	۹/۱۶	۷/۴۸	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۴۱/۹۲	۲۹۲۷/۷۷	۲۹۲۰/۷۶	مدل رئوس
-۲/۷۲	-۱/۲۴	۲/۰۹	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۲۱۵/۴۹	۳۰۳۵/۱۲	۲۹۴۴/۹۷	مدل کران بالای هاشین و اشتريکمن
۶/۳۲	۲/۳۸	۲/۹۴	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۱۰/۷۲	۲۸۸۲/۶۶	۲۸۶۸/۶۹	مدل کران پایین هاشین و اشتريکمن
-۳/۷۵	-۲/۷۶	-۰/۲۷	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)

جدول ۸. مدول یانگ حاصل از نتایج تحلیلی و مقایسه با مقادیر آزمایش شده برای نمونه‌های حاوی نانوذرات  $Al_2O_3$ 

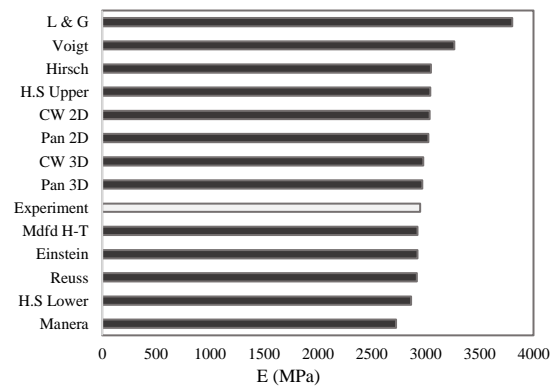
PMMA + $Al_2O_3$ 1.0 wt % (MPa)	PMMA + $Al_2O_3$ 0.5 wt % (MPa)	مدل
۲۶۹۸/۹۰	۳۰۳۲/۶۰	نتیجه آزمایش
۲۸۶۳/۲۳	۲۷۲۶/۶۳	مدل تقریب مانرا
۶/۰۹	-۱۰/۰۹	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۱۳۹/۹۳	۳۰۲۶/۸۵	مدل پن دوبعدی
۱۶/۳۴	-۰/۱۹	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۰۲۶/۸۵	۲۹۷۰/۳۱	مدل پن سه‌بعدی
۱۲/۱۵	-۲/۰۵	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۱۶۲/۲۶	۳۰۳۸/۰۲	مدل کریستین و وال دوبعدی
۱۷/۱۷	۰/۱۸	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۰۴۵/۶۶	۲۹۷۹/۷۲	مدل کریستین و وال سه‌بعدی
۱۲/۸۵	-۱/۷۴	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۱۸۵/۶۲	۳۰۴۹/۶۹	مدل هیرش
۱۸/۰۳	۰/۵۶	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۳۶/۲۸	۲۹۲۵/۰۱	مدل اصلاح شده هالپین-تسای
۸/۷۹	-۳/۵۵	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۸۱۷/۰۷	۳۸۰۲/۴۶	مدل لیونگود و گوتلر
۴۱/۴۳	۲۵/۳۸	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۳۵/۶۲	۲۹۲۴/۷۰	مدل اینشتین
۸/۷۷	-۳/۵۵	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۶۲۴/۲۸	۳۲۶۹/۰۲	مدل وویگت
۳۴/۲۹	۷/۸۰	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۹۲۲/۴۳	۲۹۱۸/۰۹	مدل رئوس
۸/۲۸	-۳/۷۷	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۳۲۳۹/۴۳	۳۰۴۷/۳۴	مدل کران بالای هاشین و اشتريکمن
۲۰/۰۳	۰/۴۹	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)
۲۸۷۲/۵۵	۲۸۶۳/۶۹	مدل کران پایین هاشین و اشتريکمن
۶/۴۳	-۵/۵۷	تغییر نسبت به نتیجه آزمایش (%)

وزنی، نتایج حاصل از آزمایش در بازه مدلهای کران بالای وویگت و کران پایین رئوس و مدل کران بالا و پایین هاشین و اشتريکمن قرار گرفته است.

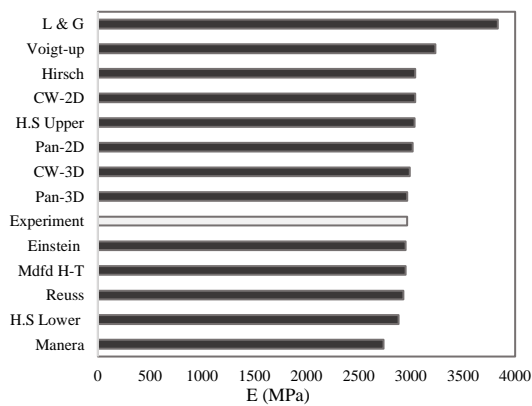
در ادامه، برای درک و مقایسه بهتر، نتایج در قالب شکل‌های (۳) تا (۱۰) نیز مطرح و مقایسه شده‌اند. همان‌طوری که مشخص است در همه موارد به جز اکسید سیلیسیم با ۰٫۵ درصد وزنی و اکسید آلومینیوم با ۱/۰ درصد



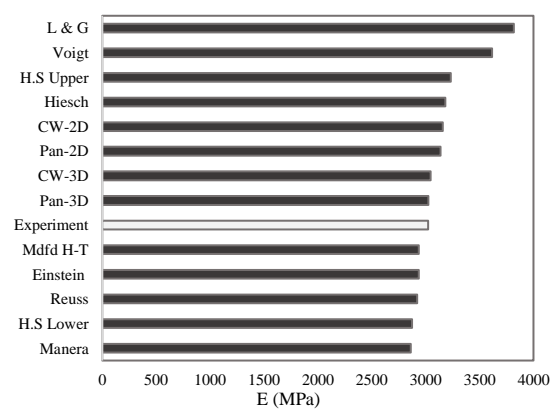
شکل ۶ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 0.5% وزنی  $SiO_2$



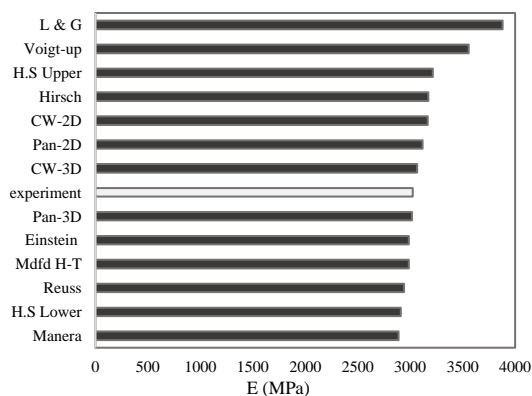
شکل ۳ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 0.5% وزنی  $TiO_2$



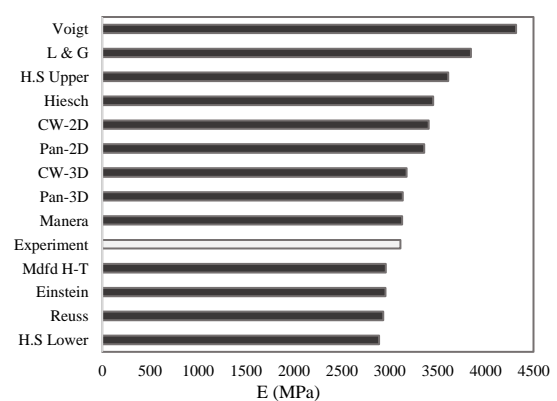
شکل ۷ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 1.0% وزنی  $SiO_2$



شکل ۴ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 1.0% وزنی  $TiO_2$



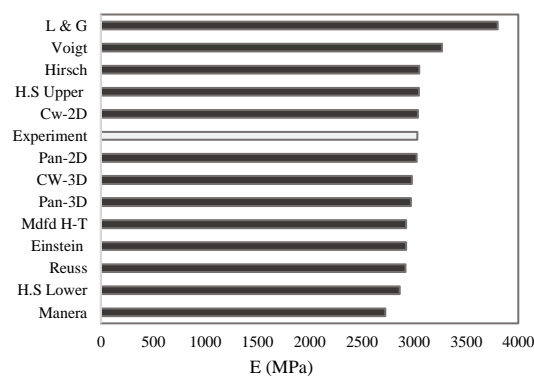
شکل ۸ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 2.0% وزنی  $SiO_2$



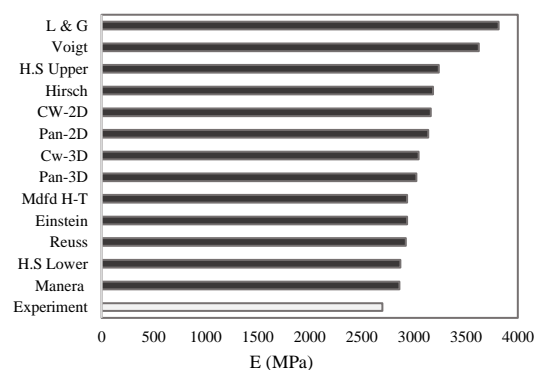
شکل ۵ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 2.0% وزنی  $TiO_2$

به ترتیب ۲-، ۲ و ۴ درصد و برای ۰,۵ و ۱ درصد وزنی  $Al_2O_3$  به ترتیب ۴ و ۷/۵- درصد تغییر را گزارش داد. به جز دو مورد (۰/۵ درصد وزنی اکسیدسیلیسیم و ۱/۰ درصد وزنی اکسیدآلومینیوم)، در بقیه موارد افزایش درصد وزنی تقویت‌کننده منجر به افزایش مدول یانگ ماده حاصل شد. کاهش مدول یانگ برای کامپوزیت با ۰/۵ درصد وزنی اکسیدسیلیسیم هم می‌تواند به دلیل عدم پراکندگی یک‌نواخت نانوکامپوزیت‌ها باشد. در پژوهش آریماتیا و همکارانش [33] هم در ۱ درصد وزنی از نانوذرات آلومینا تغییری در مدول الاستیک ایجاد نگردید و حتی برخی از خواص مکانیکی دیگر نیز با کاهش همراه بود. در این پژوهش نیز کاهش مدول یانگ برای کامپوزیت با ۱/۰ درصد وزنی اکسیدآلومینیوم را می‌توان به اثر پیوند نامناسب بین ذرات تقویت‌کننده و ماده پایه و یا ناسازگاری این دو ماده به خصوص در نسبت‌های حجمی بالاتر نسبت داد. این اثر از انتقال یک‌نواخت نیرو بین ماده پایه و تقویت‌کننده جلوگیری می‌کند و عاملی برای کاهش در مدول یانگ به‌شمار می‌رود.

نتایج به‌دست‌آمده از روابط تحلیلی نشان می‌دهد که مدل‌های تئوری، برای تمامی نمونه‌ها به جز نمونه با ۱,۰ درصد وزنی اکسیدآلومینیوم، روند را به درستی پیش‌بینی کرده‌است و در برخی مدل‌ها نتیجه را با دقت بالایی نسبت به نتایج تجربی ارائه می‌دهند. در واقع، می‌توان گفت رابطه لیونگود و گوتلر تمامی نتایج را با اختلاف تقریبی ۲۳ تا ۳۳ درصد نسبت به نتایج آزمایشگاهی تخمین می‌زند که دلیل آن درصد پایین وزنی نانوکامپوزیت‌ها در این مطالعه است. مدل‌های کران بالا و پایین وویگت و رئوس و یا هاشین و اشتریکمن بازه مناسبی را برای تخمین مدول یانگ کامپوزیت‌ها ارائه می‌دهند. مدل‌های سه‌بعدی پن و کریستین و وال هم مدول یانگ را با دقت بیشتری از مدل‌های دوبعدی آن‌ها پیش‌بینی می‌کنند. با بررسی خروجی مدل‌ها و مقایسه آن‌ها با مقادیر آزمایشگاهی می‌توان گفت که مدل سه‌بعدی پن با اختلافی کم برای اکثریت نتایج، مقادیر دقیقی را پیش‌بینی می‌کند. مورد قابل ذکر در انتها که با افزایش درصد وزنی تقویت‌کننده پیش می‌آید، صحت نتایج برای مقادیر بیشتر از ۲/۰ درصد وزنی از تقویت‌کننده است. در این حالت



شکل ۹ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 0.5% وزنی  $Al_2O_3$



شکل ۱۰ مقایسه مقادیر مدول یانگ حاصل از روابط تحلیلی با نمونه مورد آزمایش حاوی 1.0% وزنی  $Al_2O_3$

### نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، اثرات افزودن مقادیر مختلف نانوذرات اکسیدی تیتانیوم، سیلیسیم و آلومینیوم به پلی‌متیل متاکریلات بر روی خواص مکانیکی و مقایسه نتایج آن با روابط تحلیلی بررسی گردید.

بررسی نتایج حاصل از آزمایش‌های تجربی و مقایسه آن‌ها با نتایج استخراج‌شده از روابط تحلیلی نتایج جالب توجهی را آشکار کرد. نانوذرات  $TiO_2$  در هر سه درصد وزنی منجر به بهبود مدول الاستیسیته پلیمر پایه شدند. با افزودن ۰/۵، ۱ و ۲ درصد وزنی از نانوذرات  $TiO_2$  به پلی‌متیل متاکریلات مدول الاستیسیته به ترتیب حدود ۱,۵، ۴ و ۷ درصد افزایش یافت. مقدار مدول الاستیسیته برای سه درصد وزنی ۰,۵، ۱ و ۲ درصد از نانوتقویت‌کننده‌های  $SiO_2$

تیتانیم اکسید مدل سه‌بعدی پن (دارای کم‌ترین میانگین اختلاف و کم‌ترین انحراف معیار) مناسب‌ترین مدل معرفی می‌شود.

۴. مدل تحلیلی که دقیق‌ترین پیش‌بینی را برای تقویت‌کننده سیلیسیم اکسید ارائه کند مدل پن سه‌بعدی (دارای کم‌ترین میانگین اختلاف) و مدل دوبعدی پن (دارای کم‌ترین انحراف معیار) است.

۵. مدل تحلیلی که مناسب برای تقویت‌کننده آلومینیوم اکسید باشد مدل هاشین کران پایین (دارای کم‌ترین میانگین اختلاف و کم‌ترین انحراف معیار) معرفی می‌گردد.

البته ذکر این نکته الزامی است که در صورت لزوم به انتخاب یک مدل برای کامپوزیت‌های تقویت‌شده با هر سه نوع نانوکامپوزیت‌های اکسی تیتانیم، اکسیدسیلیسیم و اکسید آلومینیوم، بهترین گزینه مدل پن سه‌بعدی است که در هر سه نوع کامپوزیت نتایج نسبتاً دقیقی را ارائه می‌دهد.

با افزایش مقادیر تقویت‌کننده، اثر کلوخه شدن پیش می‌آید که به دلیل عدم دخالت این اثر در روابط تحلیلی مذکور، نمی‌توان با قطعیت به نتایج فوق استناد کرد.

به طور کلی می‌توان مناسب‌ترین مدل‌ها را به تفکیک ذرات تقویت‌کننده در چند جمله خلاصه کرد:

۱. استفاده از درصدهای مختلف وزنی نانو ذرات تقویت‌کننده به منظور بهبود خواص مکانیکی پلی‌متیل متاکریلات عموماً منجر به افزایش مدول الاستیسیته شد. این افزایش وابسته به جنس ذرات تقویت‌کننده می‌باشد.
۲. اگر مقدار ذرات تقویت‌کننده از درصدی بیشتر شود منجر به ایجاد عیوب ساختاری می‌شود و به طبع آن موجب ثابت ماندن و حتی کاهش خواص مکانیکی ماده مرکب حاصل می‌شود. در مطالعه حاضر این مورد برای نانو ذرات  $Al_2O_3$  در ۱ درصد وزنی آشکار شد.
۳. از بین مدل‌های تحلیلی مطرح شده برای تقویت‌کننده

## مراجع

1. Saha, B., Toh, W.Q., Liu, E., Tor, S.B., and Lee, J., "A Study on Frictional Behavior of PMMA Against FDTS Coated Silicon as a Function of Load, Velocity and Temperature", *Tribology International*, Vol. 102, Pp. 44-51, (2016).
2. Eungkee Lee, R., Hasanzadeh, R., and Azdast, T., "A Multi-Criteria Decision Analysis on Injection Moulding of Polymeric Microcellular Nanocomposite Foams Containing Multi-Walled Carbon Nanotubes", *Plastics, Rubber and Composites*, Vol. 46, Pp. 155-162, (2017).
3. Eungkee Lee, R., Afsari Ghazi, A., Azdast, T., Hasanzadeh, R., and Mamaghani Shishavan, S., "Tensile and Hardness Properties of Polycarbonate Nanocomposites in the Presence of Styrene Maleic Anhydride as Compatibilizer", *Advances in Polymer Technology*, doi 10.1002/adv.21832, (2017).
4. Liu, H., Ye, H., Lin, T., and Zhou, T., "Synthesis and Characterization of PMMA/ $Al_2O_3$  Composite Particles by in Situ Emulsion Polymerization", *Particuology*, Vol. 6, Pp. 207-213, (2008).
5. Jiao, J., Sun, X., Pinnavaia, T. J., "Mesostructured Silica for the Reinforcement and Toughening of Rubbery and Glassy Epoxy Polymers", *Polymer*, Vol. 50, No. 4, Pp. 983-989, (2009).
6. Agag, T., Koga, T., and Takeichi, T., "Studies on Thermal and Mechanical Properties of Polyimide-Clay Nanocomposites", *Polymer*, Vol. 42, No. 8, Pp. 3399-3408, (2001).
7. Ahmad, F. N., Jaafar, M., Palaniandy, S., & Azizli, K. A. M., "Effect of Particle Shape of Silica Mineral on the Properties of Epoxy Composites", *Composites Science and Technology*, Vol. 68, No. 2, Pp. 346-353, (2008).
8. Ghavidel, A. K., Azdast, T., Shabgard, M. R., Navidfar, A., & Shishavan, S. M., "Effect of Carbon Nanotubes

- on Laser Cutting of Multi-Walled Carbon Nanotubes/Poly Methyl Methacrylate Nanocomposites", *Optics & Laser technology*, Vol. 67, Pp. 119-124, (2015).
9. Opelt, C. V., Becker, D., Lepiński, C. M., & Coelho, L. A., "Reinforcement and Toughening Mechanisms in Polymer Nanocomposites–Carbon Nanotubes and Aluminum Oxide", *Composites Part B: Engineering*, Vol. 75, Pp. 119-126, (2015).
  10. Coetzee, Divan, et al., "Influence of Nanoparticles on Thermal and Electrical Conductivity of Composites", *Polymers*, Vol. 12.4 Pp. 742, (2020).
  11. Liu, H. Y., Wang, G. T., Mai, Y. W., & Zeng, Y., "On Fracture Toughness of Nano-Particle Modified Epoxy", *Composites Part B: Engineering*, Vol. 42, No. 8, Pp. 2170-2175, (2011).
  12. Sun, S., Li, C., Zhang, L., Du, H. L., & Burnell-Gray, J. S., "Effects of Surface Modification of Fumed Silica on Interfacial Structures and Mechanical Properties of Poly (Vinyl Chloride) Composites", *European polymer journal*, Vol. 42, No. 7, Pp. 1643-1652, (2006).
  13. Hua, Y., Gu, L., & Watanabe, H., "Micromechanical Analysis of Nanoparticle-Reinforced Dental Composites", *International Journal of Engineering Science*, Vol. 69, Pp. 69-76, (2013).
  14. Tucker III, C. L., & Liang, E., "Stiffness Predictions for Unidirectional Short-Fiber Composites: Review and Evaluation", *Composites science and technology*, Vol. 59, No. 5, Pp. 655-671, (1999).
  15. Islam, M. S., Masoodi, R., & Rostami, H., "The Effect of Nanoparticles Percentage on Mechanical Behavior of Silica-Epoxy Nanocomposites", *Journal of Nanoscience*, Vol. 2013, Pp. 1-10, (2013)
  16. Fereydoun, A., Mohammad Zamani, M. and Mohammad Zamani, M., "Experimental Investigation of Tensile Properties of PP/CNTs: Comparison of Experimental and Analytical Results", *First national conference of nanomaterials and nanotechnology*, Shahroud, Iran, (2011). (In Persian)
  17. Hu, H., Onyebueke L., Abatan, A., "Characterizing and Modeling Mechanical Properties of Nanocomposites- Review and Evaluation", *Journal of minerals and materials characterization and engineering*, Vol. 9, No. 04, Pp. 275, (2010).
  18. Manera, M., "Elastic Properties of Randomly Oriented Short Fiber-Glass Composites", *Journal of Composite Materials*, Vol. 11, No. 2, Pp. 235-247, (1977).
  19. Tsai, S. W., and Pagano, N. J., "Invariant Properties of Composite Materials", *Composite Materials Workshop, Technomic Publishing Co., Stamford, Conn.*, Pp.233-238, (1968).
  20. Pan, N., "The Elastic Constants of Randomly Oriented Fiber Composites: A New Approach to Prediction", *Science and Engineering of composite materials*, Vol. 5, No. 2, Pp. 63-72, (1996).
  21. Christensen, R. M., Waals. F. M., "Effective Stiffness of Randomly Oriented Fibre Composites", *Journal of Composite Materials*, Vol. 6, No. 3, Pp. 518-535, (1972).
  22. Lee, L. H., "Strength-Composition Relationships of Random Short Glass Fiber-Thermoplastics Composites", *Polymer Engineering and Science*, Vol. 9, Pp. 213-219, (1969).
  23. Thostenson, E. T., Ren, Z., & Chou, T. W., "Advances in the Science and Technology of Carbon Nanotubes and their Composites: A Review", *Composites science and technology*, Vol. 61, No. 13, Pp. 1899-1912,

- (2001).
24. Halpin, J. C., "Stiffness and Expansion Estimates for Oriented Short Fiber Composites", *Journal of Composite Materials*, Vol. 3, No. 4, Pp. 732-734, (1969).
  25. Tsai, S. W., Halpin, J. C., Pagano. N. J., "Composite Materials Workshop", (1968).
  26. Einstein, A., "On the Movement of Small Particles Suspended in Stationary Liquids", *Annalen der Physik*, Vol. 17, Pp. 549-560, (1905).
  27. Einstein, A., "Investigations on the Theory of the Brownian Movement", *Courier Corporation*, (1956).
  28. Voigt, W., "Ueber die Beziehung Zwischen den Beiden Elasticitätsconstanten Isotroper Körper", *Annalen der Physik*, Vol. 274, No. 12, Pp. 573-87, (1889).
  29. Reuss, A., "Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle", *ZAMM*, Vol. 9, Pp. 49-58, (1929).
  30. Hashin, Z., Shtrikman, S., "A Variational Approach to the Theory of the Elastic Behaviour of Multiphase Materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol, 11. No. 2, Pp. 127-140, (1963).
  31. Hashin, Z., "Analysis of Composite Materials", *J. appl. Mech*, Vol, 50, No. 2, Pp. 481-505, (1983).
  32. Shirkavand, S., Moslehifard, E., "Effect of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles on Tensile Strength of Dental Acrylic Resins", *Journal of dental research, dental clinics, dental prospects*, Vol. 8, No. 4, Pp. 197, (2014).
  33. Arimatéia, Rafaela R., et al., "Effect of Alumina on the Properties of Poly (Methyl Methacrylate)/Alumina Composites Obtained by Melt Blending", *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, Vol, 34, No. 4, Pp. 451-471, (2021).





## Investigation on Efficiency of Analytical Relations to Predict the Properties of Reinforced Nanocomposites

Sina Mosalman<sup>1</sup>Samrand Rash-Ahmadi<sup>2</sup>

### 1- Introduction

In order to improve the mechanical behavior of materials by adding different reinforcements, several studies have been performed. Beside experimental studies, analytical studies also have gotten attentions. In these studies, the focus is on analytical models which can predict behavior of composite with different percentage of reinforcements. These models are presented by considering parameters such as shape, size and type of particles of base and filler material. The use of these relationships is to reduce practical experiments and to reduce waste of time and consequently financial costs.

Since in previous studies there was no comprehensive comparison between the existing analytical relationships, it was decided to study and evaluate the effectiveness of the existing relationships in comparison with each other. At first, different analytical models are introduced. Then the effects of different volumetric percentages of titanium dioxide, silicon dioxide and aluminum oxide nanoparticles on the mechanical properties of polymethyl methacrylate polymer are studied. Finally, the experimental results are compared with the results of the analytical relationships to determine the most accurate model or models in estimating the mechanical properties of reinforced polymer nanocomposites with the mentioned oxide nanoparticles (Table 1).

**Table 1. Density, volume fraction & results obtained from experimental tests samples**

Specimens	Density (gr/cm <sup>3</sup> )	V <sub>f</sub>	Modulus of Elasticity (MPa)	Change compared to pure sample (%)
Pure PMMA	1.180	---	2913.77	---
PMMA + TiO <sub>2</sub> 0.5 wt %	1.189	0.0015	2949.00	1.21
PMMA + TiO <sub>2</sub> 1.0 wt %	1.193	0.0030	3022.90	3.75
PMMA + TiO <sub>2</sub> 2.0 wt %	1.202	0.0060	3111.50	6.79
PMMA + SiO <sub>2</sub> 0.5 wt %	1.183	0.0025	2860.90	-1.81
PMMA + SiO <sub>2</sub> 1.0 wt %	1.186	0.0050	2964.60	1.74
PMMA + SiO <sub>2</sub> 2.0 wt %	1.192	0.0100	3024.20	3.79
PMMA + Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 0.5 wt %	1.184	0.0015	3032.60	4.08
PMMA + Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 1.0 wt %	1.188	0.0030	2698.90	-7.37

### 2-Analytical Models

Models designed to explain the behavior of a substance are known as theoretical models. The purpose of presenting these models is to derive a relationship that can be used to predict the behavior of materials without requirement of practical experiments.

The models studied in this study are: Manera Approximation Model, Modified Density Function-Pan's Model, Christensen and Waal's Model, Hirsch's Model, Modified Halpin-Tsai relation, Lavengood and Goettler relation, Einstein's Model, Voigt and Reuss bounds, Hashin and Shtrikman bounds.

### 3-Experimental Steps

The samples were prepared in several steps as described below. In the first step, the reinforcing nanoparticles were combined with the polymer (which had already been dried in a separate device for dehumidification) at the desired mass percentages and turned into granules. Polymethyl methacrylate was selected as the base matrix and titanium dioxide, silicon dioxide and aluminum oxide nanoparticles with a particle size of approximately 20 nm were selected as reinforcement. Next, the ZSK-25 twin-screw extruder (manufactured by the German company Caprion Werner and Floider) was used to melt and combine the material. The nanocomposite granules were obtained in the desired mass percentages. The specimens were prepared by injection molding of granules into molds.

### 4-Results & Discussions

The results obtained from experimental tests indicates that the effect of titanium dioxide nanoparticles on the base matrix was more than other nanoparticles.

Examining the results of experimental experiments and comparing them with the results extracted from the analytical relations revealed interesting results. All specimens containing TiO<sub>2</sub> nanoparticles improved the modulus of elasticity of the base polymer. By adding 0.5, 1 and 2 weight percentage of TiO<sub>2</sub> nanoparticles to polymethyl methacrylate, the modulus of elasticity increased by about 1.5, 4 and 7%, respectively. The modulus of elasticity for 0.5, 1 and 2 weight percentage of SiO<sub>2</sub> nanoparticles reported -2, 2% and 4%, respectively, and for 0.5 and 1 weight percentage of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, reported 4% and -7.5%. Except for two cases (0.5 wt.% of silicon oxide and 0.1 wt.% of aluminum oxide), in all other cases, increasing the weight percentage of the nanofillers resulted an increase in the modulus of elasticity of the material. The reduction of the Young's modulus for composites with 0.5 wt.% silicon oxide can also be

<sup>1</sup> M.Sc. Department of Mechanical Engineering, Urmia University, Urmia, Iran .

<sup>2</sup> Corresponding Author; Associate, Department of Mechanical Engineering, Urmia University, Urmia, Iran .  
Email: s.rashmadi@urmia.ac.ir

due to the lack of uniform dispersion of the nanocomposites.

The results obtained from the analytical relations (FIG.1 to 3 for TiO<sub>2</sub> 2.0 wt.%, SiO<sub>2</sub> 2.0 wt.% & Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 1.0 wt.%) show that the theoretical models correctly predict the trend for all samples except the sample with 1 wt.% of aluminum oxide, and in some models, they present the result with high accuracy. In fact, it can be said that the relationship between Lavengood and Goettler estimates all the results with an approximate difference of 23 to 33% compared to the experimental results, due to the low weight percentage of nanocomposites in this study. The upper and lower bound models of Voigt and Reuss or Hashin and Shtrikman provide a suitable interval for estimating the Young's modulus of composites. Pan's 3D model and Christensen and Waal's 3D models predict the Young's modulus more accurately rather than their 2D models. With examining the output of the models and comparing them with the experimental results, it can be said that the Pan's three-dimensional model predicts accurate values with a small difference for the majority of results. Noteworthy, which occurs with increasing the weight percentage of the amplifier, the accuracy of the results for values greater than 0.2 wt.% of the amplifier. In this case, with increasing the amount of amplifier, the clumping effect occurs, which due to the lack of this effect in the analytical relations, the above results cannot be invoked with certainty. With increasing amounts of nanoparticles, the clumping effect occurs. Due to the lack of this effect in the analytical relationships, for a higher percentage of weight of the reinforcing nanoparticles the results cannot be cited with certainty.

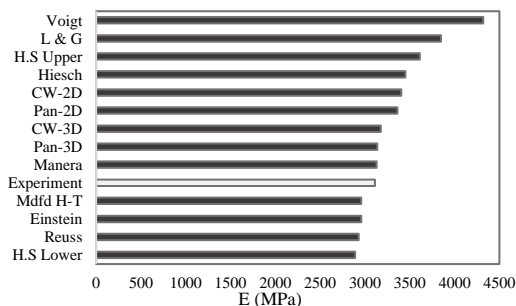


Fig. 5 Comparison of analytical results of young's modulus with experimental results (for samples containing 2.0 wt % TiO<sub>2</sub>)

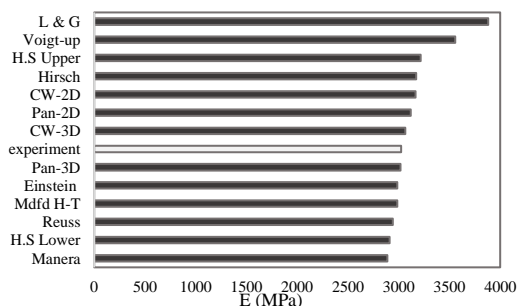


Fig. 8 Comparison of analytical results of young's modulus with experimental results (for samples containing 2.0 wt % SiO<sub>2</sub>)

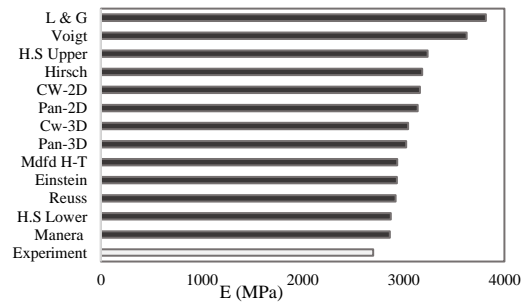


Fig. 10 Comparison of analytical results of young's modulus with experimental results (for samples containing 1.0 wt. % Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)

Finally, the most suitable models can be summarized in terms of reinforcing particles as follows:

- 1) The use of different weight percentages of reinforcing nanoparticles to improve the mechanical properties of polymethyl methacrylate generally led to an increase in the modulus of elasticity. This increase depends on the type of reinforcing particles.
- 2) If the number of reinforcing particles is more than a certain percentage, it leads to structural defects. This causes to mechanical properties of material remain constant and even reduce rather to base matrix. In the present study, this was revealed for Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles at 1 wt.%.
- 3) Among the proposed analytical models, the Pan's 3D model (with the lowest mean difference and the least standard deviation) is the most suitable model for titanium dioxide reinforcement nanoparticles.
- 4) The analytical model that provides the most accurate prediction for the silicon dioxide nanoparticles is the Pan's 3D model (with the lowest mean difference) and the Pan's 2D model (with the lowest standard deviation).
- 5) The analytical model that is suitable for aluminum oxide nanoparticles is introduced as the Hashin and Shtrikman's low bound (with the lowest mean difference and the lowest standard deviation).

As the final result, to choose a model for composites reinforced with all three types of nanocomposites of titanium dioxide, silicon dioxide and aluminum oxide, the best option is Pan's 3D model which provides best results for all nanocomposites.