

بسم الله الرحمن الرحيم



سمینار کارشناسی ارشد مهندسی شیمی

عنوان سمینار

مدل سازی جریان مخلوط پلیمری حاوی گرافیت با درصد بالا در مجرای دایره‌ای به کمک
نرم افزار پلی فلو

نام دانشجو

محمد مهدی آذریان

استاد راهنما

دکتر مجتبی گنویسی

پاییز ۱۴۰۳

فهرست مطالب

۴	مقدمه
۵	پرکننده‌های کربنی
۶	روش‌های تهیه کامپوزیت‌های کربنی
۷	اختلاط بر پایه حلال
۸	مخلوط مذاب
۹	پلیمریزاسیون درجا
۱۰	خواص مخلوط‌های پلیمری حاوی کربن
۱۱	کاربرد کامپوزیت‌های پلیمری حاوی کربن
۱۲	پیشینه تحقیق
۱۹	ضرورت انجام پژوهش
۲۰	پژوهش حاضر

- ✓ در طول دهه گذشته، مواد کامپوزیت پلیمری بر پایه کربن برای چندین کاربرد استراتژیک از نظر فناوری پیشرفته مانند دستگاه‌های الکترونیکی، دستگاه‌های محافظ تداخل الکترومغناطیسی، مهندسی بافت، حسگرها، ذخیره‌سازی نیرو، ابرخازن‌ها و غیره از اهمیت بالایی برخوردار بوده‌اند
- ✓ کامپوزیت‌های گرافیت/پلیمر مواد شکننده‌ای هستند که به طور گسترده در صنایع پتروشیمی، مکانیکی، الکترونیکی، هسته‌ای، دفاع ملی و متالورژی پودر استفاده شده است.
- ✓ مدل‌سازی و شبیه‌سازی روشی است که تغییرات خواص مواد را فراتر از ظرفیت روش‌های تجربی امکان‌پذیر می‌سازد.
- ✓ ANSYS Polyflow یک نرم افزار شبیه‌سازی جریان سیالات و رفتار مواد است که توسط شرکت ANSYS توسعه داده شده است.
- ✓ این نرم افزار برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرایندهای تولید و فرم‌دهی مواد پلاستیکی، لاستیک، فلزات و سرامیک‌ها استفاده می‌شود.

پرکننده‌های کربنی

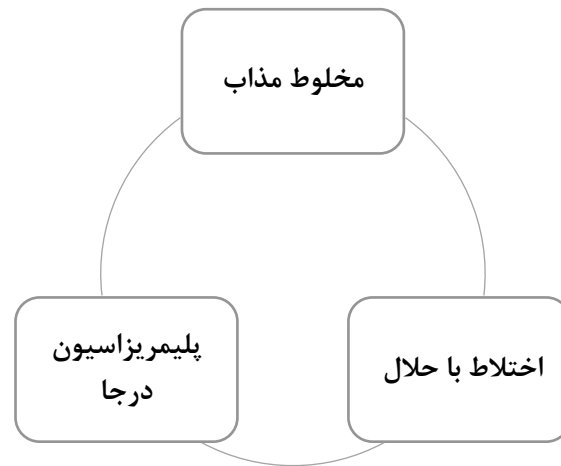
جدول ۱: ویژگی‌های پرکننده‌های کربنی

نوع پرکننده	چگالی (g/cm^3)	هدایت الکتریکی (S/cm)	هدایت حرارتی (W/mK)
نانولوله‌های کربنی	۲/۰۱	$۳/۸ \times ۱۰^۵$	۲۰۰۰-۶۰۰۰
گرافن	۱/۰۶	۶۰۰۰	۳۰۰۰-۵۰۰۰
گرافیت	۲/۲۵	$۱۰^۴$	۱۰۰-۵۰۰
کربن سیاه	۱/۸-۲/۱	$۰/۱-۱۰^۲$	$۰/۱-۰/۲$
الیاف کربن	۱/۵-۲/۰	$۱۰^۲-۱۰^۵$	۱۰-۱۰۰۰

- خواص پرکننده رسانا بر خواص فیزیکی کامپوزیت‌های پلیمری به دست آمده تأثیر می‌گذارد.
- خلوص پرکننده‌ها و پیوند سطحی بین پرکننده و ماتریس بسیار مهم است.

روش‌های تهیه کامپوزیت‌های کربنی

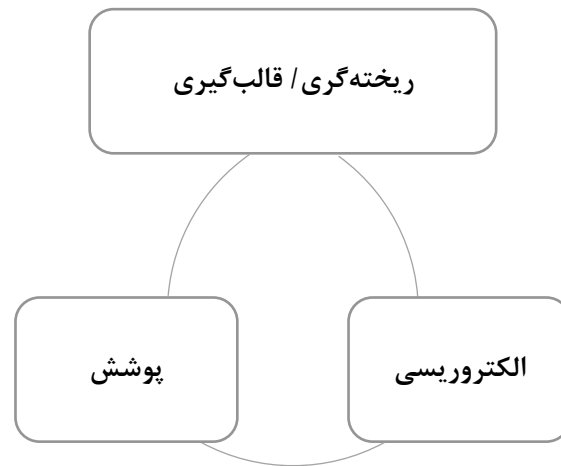
- تکنیک‌های زیادی برای تهیه کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه گرافن با خواص بهبود یافته، از جمله مخلوط مذاب، اختلاط با حلال و پلیمریزاسیون درجا مورد مطالعه قرار گرفتند.



شکل ۱: روش‌های تهیه کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه گرافن

روش‌های تهیه کامپوزیت‌های کربنی: اختلاط بر پایه حلال

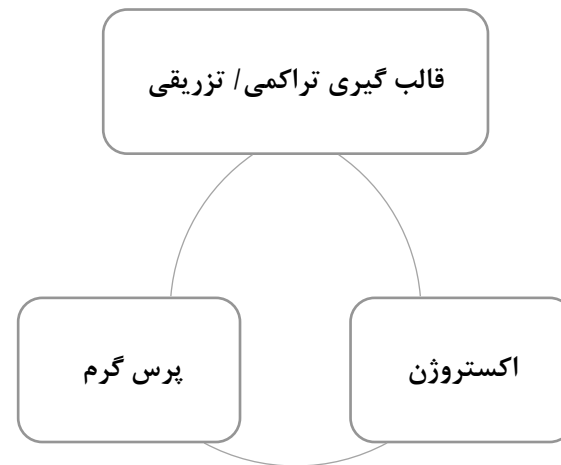
- روش اختلاط بر پایه حلال عمدتاً مبتنی بر یک سیستم حلال است که در آن پلیمر محلول است و پرکننده گرافن به محلول اضافه شده و مخلوط می‌شود.



شکل ۲: روش‌های اختلاط بر پایه حلال

روش‌های تهیه کامپوزیت‌های کربنی: مخلوط مذاب

- مخلوط مذاب یک فرآیند آماده‌سازی است که معمولاً با پلیمرهای ترموپلاستیک استفاده می‌شود. در طی این فرآیند، پلیمر ابتدا ذوب شده و سپس با مقدار مشخصی از پرکننده کربنی با استفاده از میکسرهای برش بالا در دمایی بالاتر از دمای ذوب پلیمر یا نقطه انتقال شیشه ترکیب می‌شود.



شکل ۳: روش‌های مخلوط مذاب

روش‌های تهیه کامپوزیت‌های کربنی: پلیمریزاسیون درجا

- در این فرآیند، یک محلول مونومر و سوسپانسیون‌های مواد بر پایه گرافن تحت شرایط واکنش مناسب و در حضور کاتالیزورها مخلوط می‌شوند تا یک کامپوزیت پلیمری بر پایه گرافن به دست آید.
- پلیمریزاسیون درجا برای تهیه پلیمرهای نامحلول و ناپایدار حرارتی مهم است زیرا چنین ماتریس‌هایی را نمی‌توان در حلال‌ها حل کرد یا ذوب کرد.

مزایا:

- یک روش موثر است که به پرکننده‌های بر پایه کربن اجازه می‌دهد تا به طور یکنواخت در ماتریس پراکنده شوند، در نتیجه برهمکنش قوی بین ماتریس و پرکننده ایجاد می‌شود.

معایب:

- برای تهیه مجموعه‌های خاصی از مواد بسیار محبوب نیست زیرا به مونومرهای با ویسکوزیته پایین و سایر مواد اولیه نیاز دارد.
- این روش افزایش ویسکوزیته همراه با پیشرفت فرآیند پلیمریزاسیون است که مانع از دستکاری و محدود کردن کسر بار پرکننده گرافن در ماتریس پلیمری می‌شود

خواص مخلوط‌های پلیمری حاوی کربن

هدایت الکتریکی:

- بیشتر پلیمرها عایق‌هایی با مقادیر هدایت الکتریکی بین 10^{-14} تا 10^{-17} S/cm هستند. با توجه به نسبت ابعاد بزرگ گرافن، گرافن یکی از کارآمدترین پرکننده‌ها برای بهبود هدایت الکتریکی در نظر گرفته می‌شود.
- افزایش هدایت الکتریکی بستگی به روش آماده‌سازی مورد استفاده برای ساخت کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه گرافن دارد.

هدایت حرارتی:

پس از افزودن پرکننده‌های گرافن با هدایت بالا با هدایت حرارتی 3000 تا 5000 W/mK به پلیمرهایی که هدایت حرارتی پایینی دارند (معمولاً در محدوده 0.2 W/mK) رسانایی حرارتی کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه گرافن افزایش چشمگیری دارد.

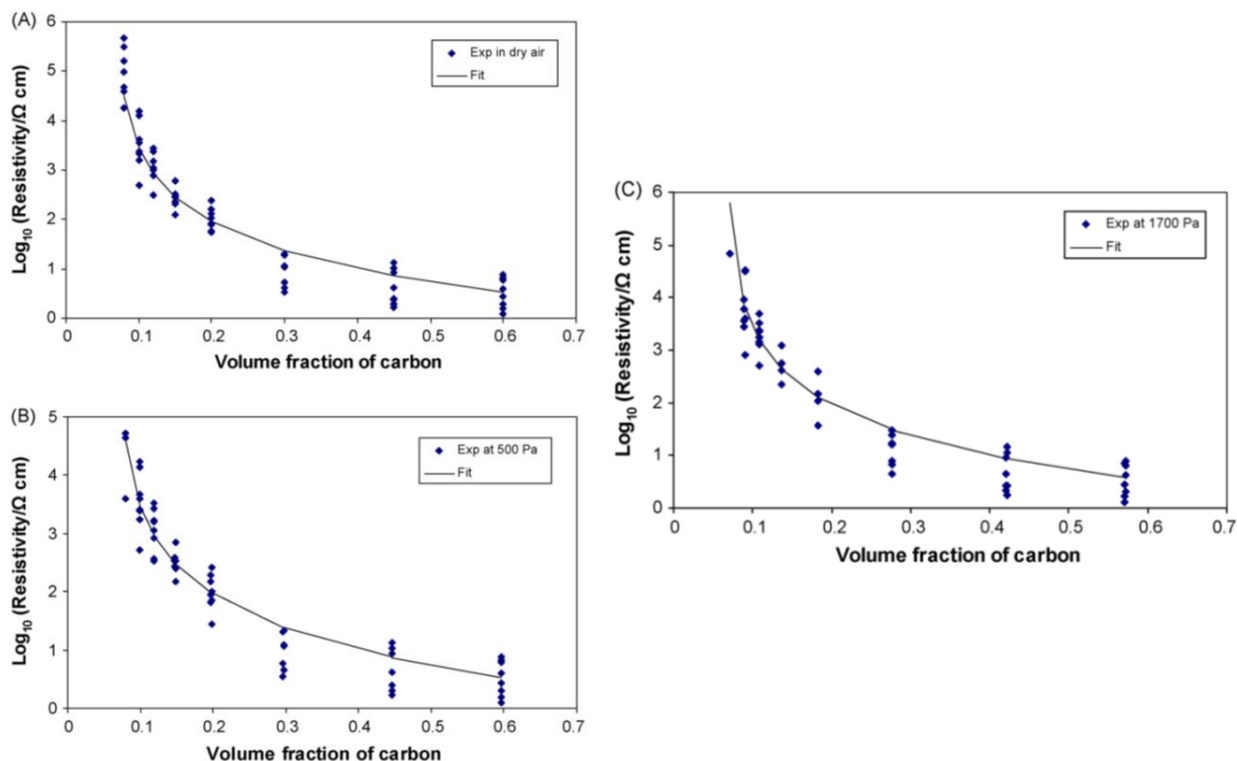
کاربرد کامپوزیت‌های پلیمری حاوی کربن

کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه کربن را می‌توان در بسیاری از کاربردها مانند دستگاه‌های الکترونیکی پوشیدنی/کشش پذیر، پارچه، باتری‌ها و حسگرها استفاده کرد. آنها مواد سبک وزن، بادوام و رسانا هستند و می‌توانند اجزای فلزی باشند که معمولاً سفت، سنگین، صلب و مستعد خوردگی با ضریب انبساط حرارتی بالا هستند.

کاربرد کامپوزیت‌های پلیمری حاوی کربن به شرح زیر است:

- ذخیره انرژی
- پارچه هوشمند یا منسوجات الکترونیکی
- مواد واسط حرارتی
- کاربردهای زیست پزشکی

پیشینه تحقیق



شکل ۴: نتایج بهینه‌سازی در محیط‌های مختلف در دمای ۲۳ درجه سانتی‌گراد. (a) مقاومت در هوای خشک، (b) مقاومت در بخار تولوئن در حدود ۵۰۰ Pa و (c) مقاومت در بخار تولوئن در حدود ۱۷۰۰ Pa

پژوهشگران: لی و همکاران

سال: ۲۰۰۷

عنوان پژوهش: مدل‌سازی سنسورهای کامپوزیت کربن سیاه/پلیمر

یافته‌های پژوهش: نتایج نشان داد که با استفاده از این مدل، پاسخ‌های حسگر را می‌توان به اندازه کافی برای فشار بخار داده شده پیش‌بینی کرد. علاوه بر این، غلظت بخار آنالیت را می‌توان بر اساس پاسخ‌های حسگر تخمین زد.

پژوهشگران: ژانگ و همکاران

سال: ۲۰۱۵

عنوان پژوهش: مدل سازی مکانیک فیلم کامپوزیت پلیمری بر پایه گرافن

یافته های پژوهش: نتایج نشان داد که این مدل جدید می تواند رفتار

مکانیکی مشاهده شده تجربی فیلم های کامپوزیت پلیمری بر پایه گرافن را

که با آزمایش bugle اندازه گیری می شود، پیش بینی کند

پژوهشگران: گاز و همکاران

سال: ۲۰۰۸

عنوان پژوهش: مدل سازی کامپیوتری مقایسه ای کامپوزیت های

کربن-پلیمر با میکروالیاف کربن، گرافیت یا نانولوله های کربنی

یافته های پژوهش: مدل سازی اجازه داد تا ویژگی ها را در پیش بینی

مقادیر ثابت های مکانیکی اساسی مشاهده شود.

پژوهشگران: چانکلین و همکاران

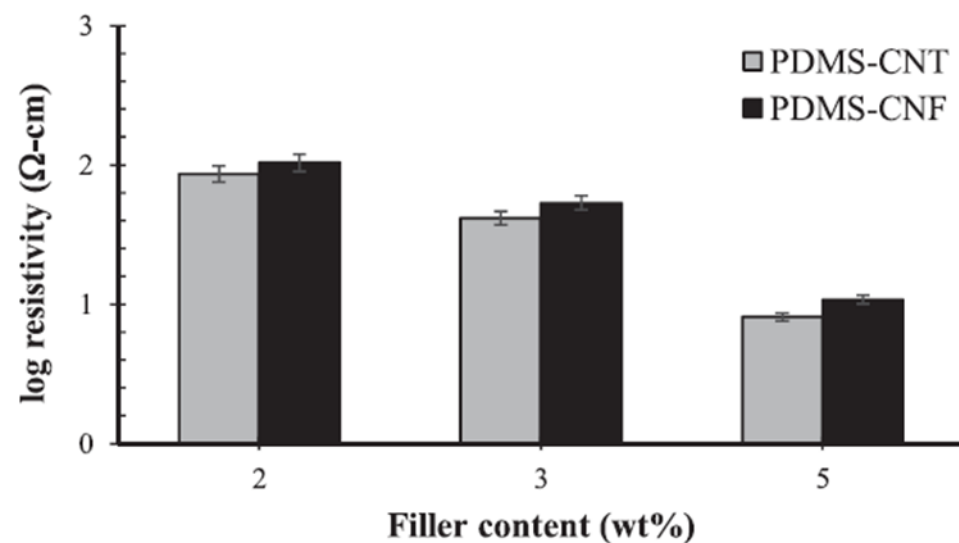
سال: ۲۰۱۸

عنوان پژوهش: خواص الکتریکی مدل سازی نفوذ در ساختارهای

پلیمری مختلف نانوکامپوزیت های بر پایه کربن

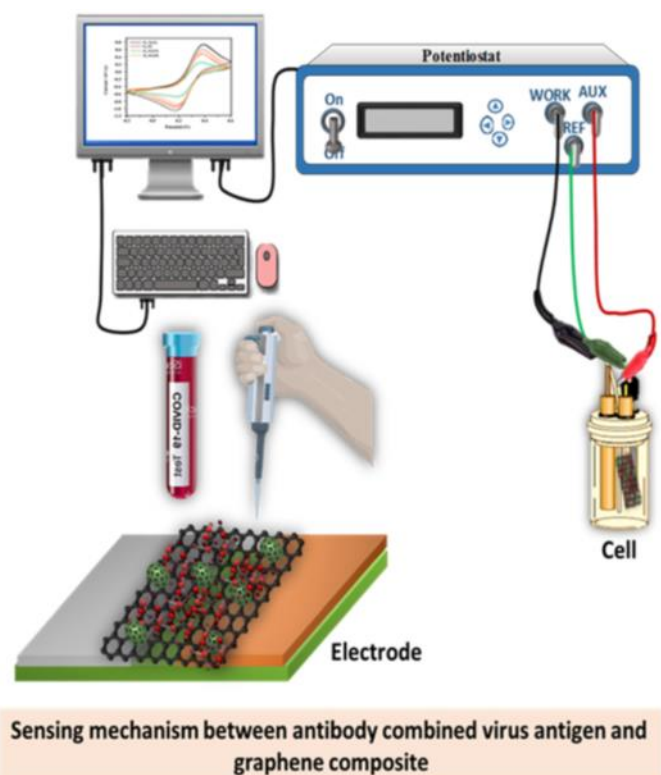
یافته های پژوهش: رفتار هدایت مستقل از ابعاد پرکننده در مقیاس

نانو فراتر از آستانه نفوذ بود.



شکل ۵: مقاومت الکتریکی کامپوزیت های PDMS پر شده با CNT و CNF در ۲، ۳ و ۵ درصد وزنی

پیشینه تحقیق



پژوهشگران: فاطما و همکاران

سال: ۲۰۲۲

عنوان پژوهش: مدل سازی نانوکامپوزیت بر پایه گرافن با استفاده از

شبیه سازی های دینامیکی مولکولی

یافته های پژوهش: این پلتفرم سنجش را می توان برای تشخیص

زود هنگام عفونت های ویروسی با استفاده از نمونه های واقعی اصلاح کرد.

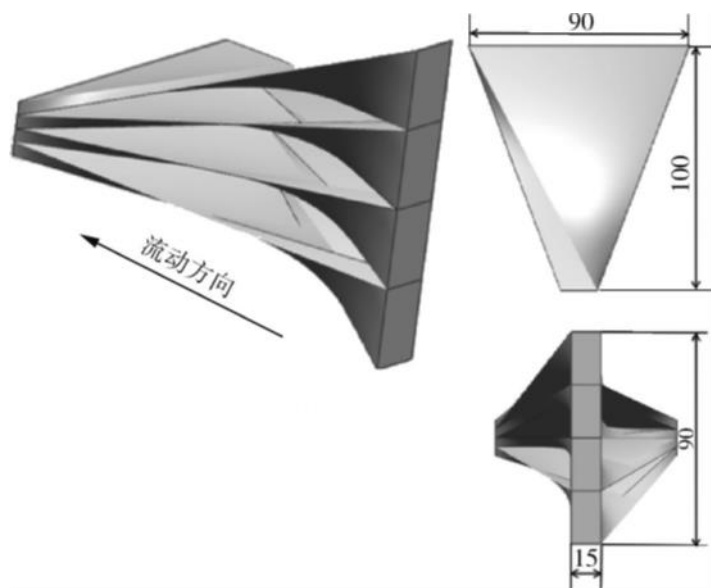
پژوهشگران: دجیان و همکاران

سال: ۲۰۲۳

عنوان پژوهش: مدل سازی سنسورهای کامپوزیت کربن سیاه/پلیمر

یافته های پژوهش:

- نتایج نشان داد که فشار در یک گرادیان در امتداد جهت اکستروژن کاهش می یابد و اختلاف فشار در موقعیت میانی با افزایش نرخ جریان ورودی افزایش می یابد.
- تغییر قابل توجهی در نرخ برش در کانال جریان وجود دارد.
- سرعت در ابتدا افزایش و سپس در جهت اکستروژن در کانال جریان کاهش یافت.



شکل ۷: مدل هندسی سه بعدی چند لایه

پژوهشگران: های و همکاران

سال: ۲۰۲۳

عنوان پژوهش: بهینه‌سازی و طراحی قالب کاتتر ورید مرکزی را

توسط نرم‌افزار پلی‌فلو

یافته‌های پژوهش: نتایج نشان داد که قالب اکستروژن بازده بالایی

دارد و می‌تواند به عنوان مرجعی برای توسعه قالب های اکستروژن مرتبط

مورد استفاده قرار گیرد.

پژوهشگران: وطنی و همکاران

سال: ۲۰۲۳

عنوان پژوهش: شبیه‌سازی هدایت موثر برای نانوکامپوزیت‌های

گرافن-پلیمر

یافته‌های پژوهش: محاسبات نشان داد که میزان هدایت با سطح

نفوذ کم، بین فاز متراکم، تونل کوتاه، قطعات بزرگ تونل و مقاومت

ضعیف تونل پلیمری بهبود می‌یابد.

پژوهشگران: وانگ و همکاران

سال: ۲۰۲۴

عنوان پژوهش: بررسی اثر گرافیت بر مقاومت در برابر تشعشع و ویژگی‌های محافظ اکسیژن کامپوزیت‌های

EPDM

یافته‌های پژوهش: نتایج شبیه‌سازی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان داد که افزودن گرافیت معدنی می‌تواند

فضای فعالیت اکسیژن در ماده را کاهش دهد و مهاجرت و انتشار اکسیژن را تضعیف کند.

ضرورت انجام پژوهش

- با توجه به گسترش روزافزون کاربردهای مواد پلیمری در صنایع مختلف، از جمله الکترونیک، خودروسازی و ساخت قطعات پیشرفته، نیاز به بهینه‌سازی فرآیندهای تولید و بررسی ویژگی‌های جریان این مواد بیش از پیش احساس می‌شود.
- گرافیت به عنوان یک ماده افزودنی با خواص منحصر به فرد، می‌تواند کیفیت و ویژگی‌های مکانیکی و حرارتی محصولات پلیمری را بهبود بخشد. اما استفاده از مقادیر بالا در ترکیب‌های پلیمری، به چالش‌هایی در فرآیند تولید مانند افت فشار، ته‌نشینی و عدم یکنواختی در توزیع ماده منجر می‌شود. به همین دلیل، فهم دقیق رفتار جریان این مخلوط‌ها در شرایط مختلف، ضروری است.

- در این پژوهش مدل سازی جریان مخلوط پلیمری حاوی گرافیت با درصد بالا در مجرای دایره ای به کمک نرم افزار پلی فلو انجام می شود و تاثیر پارامترهایی نظیر نرخ جریان و سرعت ورودی، هندسه و افت فشار اکسترودر، دمای ناحیه مذاب و هندسه نازل بر کیفیت قطعه پس از بهینه سازی گزارش خواهد شد.
- در نهایت، نتایج این پژوهش با ارائه راهکارهای علمی و تجربی، می تواند به سهولت در طراحی و بهبود فرآیندهای تولید، کاهش هزینه ها و زمان تولید، و ارتقای کیفیت محصولات کمک کند.

با تشکر از توجه شما