

دانشگاه صنعتی قوچان	فرم پروپوزال	شماره سریال:
---------------------	--------------	--------------



فرم پروپوزال پایان نامه کارشناسی ارشد

گروه: مهندسی شیمی

(این قسمت توسط دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه پر می شود)

شماره:
تاریخ درخواست:
پیوست:

مشخصات دانشجو:			
نام و نام خانوادگی:	شماره دانشجویی:	رشته: مهندسی شیمی	گرایش:
تلفن همراه:	تلفن ثابت:		

مشخصات استاد یا اساتید راهنما				
ردیف	نام و نام خانوادگی	تخصص اصلی	رتبه دانشگاهی	محل خدمت
۱	دکتر مجتبی کنویسی		استادیار	دانشگاه صنعتی قوچان
۲				

اطلاعات مربوط به اساتید مشاور:				
ردیف	نام و نام خانوادگی	تخصص اصلی	آخرین مدرک تحصیلی	رتبه دانشگاهی
۱				

عنوان پایان نامه	
فارسی:	
مدل سازی جریان مخلوط پلیمری حاوی گرافیت با درصد بالا در مجرای دایره ای به کمک نرم افزار پلی فلو	
لاتین:	
Modeling the flow of a polymer mixture containing high percentage of graphite in a circular channel using Polyflow software	
نوع تحقیق: ☐ بنیادی ☐ نظری ☐ کاربردی ☐ توسعه ای	
تعریف مساله و بیان سوال های اصلی تحقیق:	
در طول دهه گذشته، مواد کامپوزیت پلیمری بر پایه کربن برای چندین کاربرد استراتژیک از نظر فناوری پیشرفته مانند دستگاه های الکترونیکی، دستگاه های محافظ تداخل الکترومغناطیسی، مهندسی بافت، حسگرها، ذخیره سازی نیرو، ابرخازن ها و غیره از اهمیت بالایی برخوردار بوده اند [۱-۴]. محققان دانشگاهی موادی را با ویژگی های پیشرفته سیستم های کامپوزیتی که از نظر ابعادی در حوزه های علم و فناوری مدرن مناسب تر هستند، بررسی کرده اند و دریافته اند که مواد پلیمری بر پایه کربن به دلیل ویژگی های ساختاری شان دارای طیف وسیعی از کاربرد هستند. مواد بر پایه کربن مانند گرافیت، نانولوله های کربنی و گرافن، به ویژه به دلیل عملکرد حرارتی، الکتریکی و مکانیکی عالی شان توجه فوق العاده ای دارند [۵-۷]. گرافیت به عنوان کریستالی ترین شکل عنصر در نظر گرفته می شود که در آن اتم های کربن در ساختار بلوری شش ضلعی قرار گرفته اند. با این حال، گرافیت	

تک فاز (به عنوان پرکننده) نمی‌تواند چگالی ذخیره انرژی بالا را در حالی که مقاومت شکست دی‌الکتریک و مکانیکی رضایت بخشی را حفظ می‌کند، انجام دهد. در نتیجه، مقادیر کمی از پرکننده‌ها در ماتریس پلیمری گنجانده می‌شوند تا کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه گرافیت را تشکیل دهند [۸]. کامپوزیت‌های گرافیت/پلیمر مواد شکننده‌ای هستند که به طور گسترده در صنایع پتروشیمی، مکانیکی، الکترونیکی، هسته‌ای، دفاع ملی و متالورژی پودر استفاده شده است. صنایع با پیشرفت علم و فناوری و صنعت مدرن، زمینه کاربرد قطعات گرافیتی همچنان در حال گسترش است و نقش مهمی در اقتصاد ملی ایفا می‌کند [۹]. کامپوزیت گرافیت-پلیمر دارای خواص مکانیکی بسیار بالا است که آن را برای استفاده در بخش‌هایی از صنایع مختلف مفید می‌کند. این خواص شامل استحکام تسلیم، مدول الاستیسیته، مقاومت به خستگی و مقاومت به ضربه می‌شود. علاوه بر این، کامپوزیت گرافیت-پلیمر دارای مقاومت بالا در برابر خوردگی و سایش است که آن را برای استفاده در شرایط سخت و دشوار مناسب می‌کند. این خواص باعث شده است که این نوع کامپوزیت‌ها برای استفاده در قطعات سازه‌ای، قطعات مکانیکی و قطعات پوشش دهنده مناسب باشند. علاوه بر این، کامپوزیت گرافیت-پلیمر دارای خواص حرارتی مناسبی نیز است. این خواص شامل پایداری در دماهای بالا، عدم انقباض و تغییر شکل در دماهای مختلف و مقاومت در برابر حرارت و آتش می‌شود. این خواص باعث می‌شود که کامپوزیت گرافیت-پلیمر برای استفاده در بخش‌هایی از صنایع هوافضا، خودروسازی و انرژی مناسب باشد.

مدل‌سازی و شبیه‌سازی روشی است که تغییرات خواص مواد را فراتر از ظرفیت روش‌های تجربی امکان‌پذیر می‌سازد. پلیمرها یکی از متداول‌ترین ماتریس‌های انتخابی برای کامپوزیت‌ها هستند و در زمینه‌های متعددی کاربرد دارند. ساختار سفت و شکننده پلیمرهای یکپارچه منجر به ترک‌های ذاتی می‌شود که باعث شکستگی می‌شوند و بنابراین کاربردهای مهندسی پلیمرهای یکپارچه که نیاز به تحمل آسیب قوی و چقرمگی شکست بالا دارند، در همه جا حاضر نیستند. بنابراین، پلیمرهای یکپارچه رسانای بد گرما و الکتریسیته هستند. با این حال، به خوبی ثابت شده است که وقتی پلیمرها با مواد مناسب مخصوصاً پرکننده‌های نانو، مانند اکسیدهای فلزی، خاک رس و مواد کربنی جاسازی می‌شوند، عملکرد آنها به خوبی بهبود می‌یابد [۱۰]. 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. ANSYS Polyflow قابلیت شبیه‌سازی جریان سیالات نیوتنی و غیر نیوتنی را دارد و می‌تواند در تحلیل فرایندهای تزریق، فشرده‌سازی، ریخته‌گری و تولید قطعات پلاستیکی و رزین‌ها کمک کند. این نرم افزار همچنین قابلیت تحلیل رفتار حرارتی و مکانیکی مواد را نیز دارد و می‌تواند در طراحی و بهینه‌سازی فرایندهای تولید مواد پلیمری و کامپوزیت‌ها مورد استفاده قرار گیرد [۱۱].

در این پژوهش مدل‌سازی جریان مخلوط پلیمری حاوی گرافیت با درصد بالا در مجرای دایره‌ای به کمک نرم‌افزار پلی‌فلو انجام می‌شود 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 بهینه‌سازی گزارش خواهد شد.

سابقه و ضرورت انجام تحقیق:

پژوهش‌های مختلفی در حوزه مدل‌سازی و شبیه‌سازی کامپوزیت‌های پلیمری بر پایه مواد کربنی انجام شده است. لی^۱ و همکاران (۲۰۰۷)، مدل‌سازی سنسورهای کامپوزیت کربن سیاه/پلیمر را بررسی کردند. حسگرهای کامپوزیت پلیمری رسانا پتانسیل زیادی در شناسایی آنالیت‌های گازی نشان داده‌اند. برای درک دقیق‌تر مکانیسم‌های فیزیکی و شیمیایی این نوع حسگرها، یک مدل ریاضی با ترکیب دو مدل

¹ Lei

هدایت و ترمودینامیکی، که رابطه‌ای بین غلظت بخار آنالیت و تغییر سیگنال‌های سنسور را شامل می‌شود، توسعه داده شد. در این کار، ۶۴ مقاومت شیمیایی که نشان‌دهنده هشت غلظت کربن مختلف (۸ تا ۶۰ درصد حجم کربن) هستند، با قرار دادن لایه‌های نازک یک کامپوزیت کربن سیاه/پلی ایزوبوتیلن بر روی الکترودهای پلاتین مارپیچی متحدالمرکز روی یک تراشه سیلیکونی ساخته شدند. پاسخ سنسورها در هوای خشک و در فشارهای بخار مختلف تولوئن و تری کلرواتیلن اندازه‌گیری شد. 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 [۱۲]. گاز^۲ و همکاران (۲۰۰۸)، مدل‌سازی کامپیوتری مقایسه‌ای کامپوزیت‌های کربن-پلیمر با میکروالیاف کربن، گرافیت یا نانولوله‌های کربنی را انجام دادند. در این پژوهش، مدل اصلی میکرو و نانوکامپوزیت‌های خطی یا غیرخطی تغییر شکل الاستیک در نظر گرفته شده است. مدل‌سازی اجازه داد تا ویژگی‌ها را در پیش‌بینی مقادیر ثابت‌های مکانیکی اساسی مشاهده شود. این نتایج در مطالعه ویژگی‌های انتشار موج در میکرو و نانوکامپوزیت‌های فیبری خاص مورد استفاده قرار گرفت [۱۳].

ژانگ^۳ و همکاران (۲۰۱۵)، مدل‌سازی مکانیک فیلم کامپوزیت پلیمری بر پایه گرافن را انجام دادند. در این مقاله، از آزمون bugle برای بررسی خواص مکانیکی لایه‌های کامپوزیت پلیمری بر پایه گرافن استفاده شد. نتایج تجربی نشان می‌دهد که مدول یانگ لایه‌های کامپوزیتی پلیمری با افزایش محتوای دوپینگ گرافن به‌طور غیرخطی افزایش می‌یابد و تغییر شکل ویسکوالاستیک تحت شرایط بارگذاری چرخه‌ای القا می‌شود. علاوه بر این، برای توصیف رفتار مکانیکی آن‌ها، یک مدل ساختاری کرنش محدود «آرودا-بویس» (مدل BPA اصلاح شده)، بر اساس فرضیه تقویت کرنش، و یک مدل سنتی «آرودا-بویس» که بسیاری از ویژگی‌های نظریه‌های قبلی را در خود جای داده است، پیشنهاد شد. نتایج نشان داد که این مدل جدید می‌تواند رفتار مکانیکی مشاهده‌شده تجربی فیلم‌های کامپوزیت پلیمری بر پایه گرافن را که با آزمایش bugle اندازه‌گیری می‌شود، پیش‌بینی کند [۱۴]. چانکلین^۴ و همکاران (۲۰۱۸)، خواص الکتریکی مدل‌سازی نفوذ در ساختارهای پلیمری مختلف نانوکامپوزیت‌های بر پایه کربن را بررسی کردند. در این مطالعه، نقش ساختار مولکولی ماتریس پلیمری و روش پردازش به شدت متفاوت بر رفتار هدایت کامپوزیت‌های پلیمری پر شده با کربن بررسی شد. پارامترهای رسانایی و نفوذ الکتریکی پلی دی متیل سیلوکسان (PDMS الاستومر) پر شده با نانوالیاف کربنی (CNFs) و نانولوله‌های کربنی (CNTs) از طریق مخلوط کردن محلول ابتدا تعیین شد. با استفاده از مدل قانون توان، آستانه نفوذ برای CNF ۰/۸۳ وزنی و توان بحرانی $2/86(t)$ بود. این مقدار t به ابعاد پرکننده و خاصیت رسانایی ذاتی سیستم کامپوزیت بستگی دارد. با این حال، رفتار هدایت مستقل از ابعاد پرکننده در مقیاس نانو فراتر از آستانه نفوذ بود. این نتایج برای یک سیستم کامپوزیت پلیمری بسیار متفاوت از ترموپلاستیک نایلون-۶ پر شده با نانولوله‌های کربنی تهیه شده با روش اکستروژن برای پیش‌بینی رفتار نفوذ آن اعمال شد [۱۵].

فاطمه^۵ و همکاران (۲۰۲۲)، نانوکامپوزیت بر پایه گرافن با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیکی مولکولی مدل‌سازی جدید برای مکانیسم خنثی‌سازی پیشنهادی و سنجش سریع COVID-19 پیشنهاد کردند. در این پژوهش، واکنش شیمیایی و شکستن پیوند بین جزء فلزی و مولکول COVID-19 با داده‌های شبیه‌سازی کامپیوتری پیشنهاد شده است. این مدل‌سازی جدی، مکانیسم خنثی‌سازی مبتنی بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و تشخیص سریع COVID-19 بر روی حسگرهای زیستی بر پایه نانوکامپوزیت گرافن برای کاربردهای تشخیصی نقطه‌ای مناسب است و این پلت‌فرم سنجش را می‌توان برای تشخیص زودهنگام عفونت‌های ویروسی با استفاده از نمونه‌های واقعی اصلاح کرد [۱۶]. دجیان^۶ و همکاران (۲۰۲۳)، شبیه‌سازی عددی فرآیند جریان اکستروژن پلیمرهای طبیعی در کانال‌های جریان چند لایه را انجام دادند. برای بررسی فرآیند جریان اکستروژن و ویژگی‌های اختلاط پلیمرهای طبیعی در کانال جریان انباشته، یک مدل فیزیکی سه بعدی و یک مدل مش المان محدود از کانال جریان انباشته

² Guz

³ Zhang

⁴ Chanklin

⁵ Fatema

⁶ Dejian

دانشگاه صنعتی قوچان	فرم پروپوزال	شماره سریال:
---------------------	--------------	--------------

ایجاد شد. نرم افزار Polyflow برای محاسبه سرعت جریان مذاب غذا و توزیع فشار، سرعت، و نرخ برش در طول فرآیند اکستروژن استفاده شد. 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. نرخ برش از موقعیت میانی کانال جریان به سمت حاشیه و از سطح دیوار به ناحیه اطراف کاهش می یابد. سرعت در ابتدا افزایش و سپس در جهت اکستروژن در کانال جریان کاهش یافت. سرعت در نزدیکی سطح دیوار مقدار کمی را نشان داد. ساختار و طراحی اندازه کانال جریان پیچشی انباشته می تواند به بهبود اثر اختلاط پلیمرهای طبیعی کمک کند. همچنین افزایش در جریان ورودی نیز برای بهبود اثر اختلاط مفید بود [۱۷]. های^۷ و همکاران (۲۰۲۳)، بهینه سازی و طراحی قالب کاتر ورید مرکزی را توسط نرم افزار پلی فلو بررسی کردند. در این مطالعه، دقت قالب اکستروژن کاتر ورید مرکزی به عنوان یک هدف تحقیقاتی در نظر گرفته شد و شکل مقطع و اندازه دقیق قالب از تجزیه و تحلیل یک فناوری تغییر شکل معکوس با کمک نرم افزار Polyflow به دست آمد. یک شبیه سازی آزمایش متعامد سه عاملی و دو سطحی با استفاده از پارامترهای زاویه فشردگی، طول قالب و زاویه ترخیص، انجام شد و پارامترهای ساختار دنده قالب کاتر ورید مرکزی بهینه از تجزیه و تحلیل واریانس به دست آمد. نتایج شبیه سازی بیشتر با تولید واقعی تأیید شد. نتایج نشان داد که قالب اکستروژن بازده بالایی دارد و می تواند به عنوان مرجعی برای توسعه قالب های اکستروژن مرتبط مورد استفاده قرار گیرد [۱۸]. با توجه به مشکلات صنعت در بخش استفاده از کامپوزیت های پلیمری، نتایج این پژوهش نرم افزاری می تواند به کیفیت محصولات تولید شده کمک کند و همچنین هزینه های بخش صنعتی را کاهش دهد.		
فرضیه ها (هر فرضیه بصورت یک جمله خبری نوشته شود): (۱) دمای ناحیه مذاب بر کیفیت محصول تولید شده تاثیر گذار است. (۲) افت فشار و هندسه اکسترودر بر میزان اعوجاج و انقباض محصول نهایی اثر دارد. (۳) نرخ و سرعت تزریق مواد بر خواص رئولوژیکی پلاستیک و میزان انقباض و تاب خوردگی محصول تاثیر دارد.		
هدف: مهم ترین اهداف پروژه حاضر به شرح زیر است. (۱) بررسی شرایط عملیاتی و چالش های تولید (۲) بهینه سازی شرایط تولید مجرای دایره ای با استفاده از نرم افزار (۳) کاهش هزینه های بخش صنعتی		
جنبه جدید و نوآوری تحقیق: (۱) بررسی جریان مخلوط پلیمری حاوی گرافیت با درصد بالا در مجرای دایره ای به کمک نرم افزار پلی فلو برای اولین بار انجام می شود.		
چه کاربردهایی از انجام تحقیق متصور است: (۱) استفاده از مخلوط پلیمری حاوی گرافیت برای کاربرد در صنعت باتری		

مراجع:

⁷ Hai

- [1] P. Costa, J. Nunes-Pereira, J. Oliveira, J. Silva, J.A. Moreira, S. Carabineiro, J. Buijnsters, S. Lanceros-Mendez, High-performance graphene-based carbon nanofiller/polymer composites for piezoresistive sensor applications, *Composites Science and Technology*, 153 (2017) 241-252.
- [2] S. Sankaran, K. Deshmukh, M.B. Ahamed, S.K. Pasha, Recent advances in electromagnetic interference shielding properties of metal and carbon filler reinforced flexible polymer composites: A review, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 114 (2018) 49-71.
- [3] I.V. Lightcap, P.V. Kamat, Graphitic design: prospects of graphene-based nanocomposites for solar energy conversion, storage, and sensing, *Accounts of chemical Research*, 46 (2013) 2235-2243.
- [4] Z. Lei, N. Christov, X. Zhao, Intercalation of mesoporous carbon spheres between reduced graphene oxide sheets for preparing high-rate supercapacitor electrodes, *Energy & Environmental Science*, 4 (2011) 1866-1873.
- [5] X. Tong, N. Li, M. Zeng, Q. Wang, Organic phase change materials confined in carbon-based materials for thermal properties enhancement: Recent advancement and challenges, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 108 (2019) 398-422.
- [6] M. Khan, M.N. Tahir, S.F. Adil, H.U. Khan, M.R.H. Siddiqui, A.A. Al-Warthan, W. Tremel, Graphene based metal and metal oxide nanocomposites: synthesis, properties and their applications, *Journal of Materials Chemistry A*, 3 (2015) 18753-18808.
- [7] X. Huang, Z. Yin, S. Wu, X. Qi, Q. He, Q. Zhang, Q. Yan, F. Boey, H. Zhang, Graphene-based materials: synthesis, characterization, properties, and applications, *small*, 7 (2011) 1876-1902.
- [8] S. Chen, A. Skordos, V.K. Thakur, Functional nanocomposites for energy storage: Chemistry and new horizons, *Materials Today Chemistry*, 17 (2020) 100304.
- [9] W. Wang, D. Yang, R. Wang, F. Wei, M. Liu, The Optimization of Machining Parameters on Cutting Force during Orthogonal Cutting of Graphite/Polymer Composites, *Processes*, 10 (2022) 2096.
- [10] R. Atif, F. Inam, Modeling and simulation of graphene based polymer nanocomposites: advances in the last decade, *Graphene*, 5 (2016) 96-142.
- [11] <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-polyflow>.
- [12] H. Lei, W.G. Pitt, L.K. McGrath, C.K. Ho, Modeling carbon black/polymer composite sensors, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 125 (2007) 396-407.
- [13] A. Guz, J. Rushchitsky, I. Guz, Comparative computer modeling of carbon-polymer composites with carbon or graphite microfibers or carbon nanotubes, *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 26 (2008) 139.
- [14] J.-J. Zhang, Y.-y. Sun, D.-s. Li, Y. Cao, Z. Wang, J. Ma, G.-Z. Zhao, Modeling the mechanics of graphene-based polymer composite film measured by the bulge test, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 48 (2015) 425302.
- [15] W. Chanklin, J. Laowongkot, L.F. Chibante, Electrical property validation of percolation modeling in different polymer structures of carbon-based nanocomposites, *Materials Today Communications*, 17 (2018) 153-160.
- [16] K.N. Fatema, S. Sagadevan, J.Y. Cho, W.K. Jang, W.-C. Oh, Graphene-based nanocomposite using new modeling molecular dynamic simulations for proposed neutralizing mechanism and real-time sensing of COVID-19, *Nanotechnology Reviews*, 11 (2022) 1555-1569.
- [17] W. Dejian, Y. Pengfei, D. Yumei, Y. Weimin, Numerical simulation of extrusion flow process of natural polymers in laminated flow channels, *China Plastics*, 37 (2023) 60.
- [18] D. Hai, M. Bingxin, H. Shaozhen, C. Wei, Optimization and design of central venous catheter mold by Polyflow, *China Plastics*, 37 (2023) 113.