POLYM PART
مرجع پلیمر در بازار ایران

ساختار و خواص مکانیکی ماده پلیمری متخلخل حاصل از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی

چکیده

در پژوهش حاضر، ساختار و پاسخ مکانیکی سیستم شیشه‌ای متخلخلی، با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و همچنین جدایش فازی غیرتعادلی یک نمونه مذاب پلیمری، مشخص گردید. بر اساس آنچه برای سایر سیستم‌های جدایش فازی گزارش شده است، زمانی‌که نیروی محرکه خارجی حضور ندارد، دینامیک‌های پیچیده که با یک قاعده توانی به زمان[1] وابسته است، تکامل ساختاری تدریجی را کنترل می‌کند. پاسخ مکانیکی در شرایط شبه استاتیک حرارتی بررسی شد. در یک ساختار الاستیک در مقایسه با سیستم‌های شیشه‌ای متراکم، که از ساختاری متخلخل آغاز شده‌اند، مدول یانگ و مدول برشی پایینی مشاهده شد. برای تغییر شکل‌های شدید، منحنی‌های تنش-کرنش رفتاری بسیار متناوب همراه با تغییرات ناشی از تغییر شکل پلاستیک زیاد، سریع و ناگهانی نشان می‌دهند. توزیع کاهشی تنش[2] با بررسی مجموعه بزرگی از پارامترها مشخص شد. این کار فراتر از مطالعات عددی قبلی در مورد مواد متخلخل اتمی است، همانطورکه ابتدا نقش اتصال زنجیره‌ای را در پاسخ‌های الاستیک و پلاستیک مواد از این نوع بررسی می‌نماید.

کلمات کلیدی

مواد متخلخل؛ جدایش فازی؛ انتقال شیشه‌ای؛ تجزیه و تحلیل ساختاری؛ خواص مکانیکی؛ دینامیک مولکولی

نتایج

ساختار و خواص مکانیکی یک ماده پلیمری متخلخل با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به طور کامل مورد بررسی قرار گرفت. با جدایش فازی متوقف شده، سیستم‌های تولید شده متشکل از فازهای گاز- جامد پیوسته‌ی دوسویی[3]- و ساختار بی‌شکل[4] جامد مشخص گردید. تکامل زمانی فرآیند درشت‌شدن بررسی شد و در دمای توقف[5] بالا (اما کمتر از انتقال شیشه‌ای)، قاعده توانی در سیستم‌های اتمی مشاهده شد، که می‌تواند با ماهیت ویسکوالاستیک مکانیسم مرتبط باشد.

سپس، پاسخ‌های الاستیک و پلاستیک سیستم به تغییر شکل خارجی در محدوده شبه استاتیک حرارتی برای چگالی‌ها، دماهای توقف و زمان‌های پیری مختلف، تجزیه و تحلیل شد. تجزیه و تحلیل ثابت‌های الاستیک، غلبه پیچده شدن را بر پیر شدن شیشه‌ای نشان داد که هم‌زمان با پیر شدن مواد، منجر به ساختاری نرم‌تر شد (حجم و مدول برشی کم‌تر). برای تغییر شکل‌های زیاد، پاسخ پلاستیک آشکار است، که منجر به ایجاد یک الگوی متناوب از منحنی‌های تنش-کرنش می‌شود. در پژوهش حاضر یک توزیع تنش کاهشی بازیابی شد که از یک قاعده توانی با توان $\tau \sim 1/45$ پیروی می‌کند، که نسبتاً قوی است، به پارامترهای وضعیت یا پیری سیستم بستگی ندارد و با نتایج عددی و تجربی قبلی سازگار است.

این پژوهش نشان‌دهنده اولین تجزیه و تحلیل از تاثیر اتصال زنجیره‌ای بر پدیده جدایش فازی غیرتعادلی[6] است. کار حاضر پرسش‌های جالب توجهی را مطرح می‌کند، مانند تأثیرهای سفتی پیوند، معماری زنجیره‌ای و گره‌خوردگی‌های بین زنجیری[7]، که می‌تواند تمرکز مطالعات آینده باشد.

Source

Volpe, S.C.; Leporini, D.; Puosi, F. Structure and Mechanical Properties of a Porous Polymer Material via Molecular Dynamics Simulations. *Polymers* **2023**, *15*, 358. DOI: 10.3390/ polym15020358

---

[1] power-law time dependence
[2] stress-drop distribution
[3] bicontinuous
[4] amorphous
[5] high quench temperature
[6] arrested phase separation
[7] entanglement effects