



تأثیر مقدار اینکونل 625 بر روی خواص مکانیکی و تریبولوژیکی کامپوزیت‌های زمینه تفلون: مطالعات تجربی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

حمید دانشمند¹، مسعود عراقچی^{2*}

1- دانشجوی دکتری، ارگان اصلی مواد، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

2- استادیار، ارگان اصلی مواد، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

* تهران، صندوق پستی 11365-8486، maraghchi@aeoi.org.ir

چکیده

اطلاعات مقاله:

کامپوزیت‌های زمینه تفلون به‌طور گسترده به‌عنوان مواد آب‌بندی استفاده می‌شوند. این مواد کامپوزیتی با تقویت‌کننده‌های مختلف به‌صورت صنعتی ساخته و عرضه شده‌اند. با وجود خواص مطلوب آب‌بند‌های تجاری، این مواد به‌طور کلی قابلیت آب‌بندی در شرایط خاص کاری را ندارند و نیاز به طراحی و ساخت آب‌بند‌های کامپوزیت زمینه تفلون با تقویت‌کننده‌های جدید می‌باشد. در این مطالعه از پودر اتمیزه آلایژ اینکونل 625 به‌عنوان فاز تقویت‌کننده برای ساخت کامپوزیت زمینه تفلون استفاده شده است. تأثیر درصد وزنی تقویت‌کننده بر روی خواص مکانیکی و تریبولوژیکی کامپوزیت‌ها بررسی شده است. بعلاوه، از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌منظور بررسی سایش کامپوزیت استفاده شد. افزودن اینکونل 625 به‌طور قابل‌توجهی مقاومت سایش تفلون را بهبود می‌بخشد. افزودن فاز تقویت‌کننده اینکونل 625 به زمینه تفلون سبب تغییر ساز و کار سایش تفلون از نوع خستگی به نوع چسبندگی می‌شود. با بررسی‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مشخص شد که علت این امر به سبب انرژی برهمکنش بالا در فصل مشترک تفلون و اینکونل 625 می‌باشد که اجازه نمی‌دهد تفلون به‌سادگی از نمونه جدا شوند. در بین کامپوزیت‌های توسعه‌یافته، کامپوزیت زمینه تفلون تقویت‌شده با 50 درصد وزنی اینکونل 625 بهترین ترکیب از نظر سختی (70 شور D) و نرخ سایش ویژه ($4.710 \times 10^{-4} \text{ mm}^3/\text{Nm}$) را داشت. روش ساخت به‌سهولت قابل استفاده می‌باشد و نمونه‌های ساخته‌شده قابلیت تولید صنعتی را دارند.

دریافت: 1401/01/14

پذیرش: 1401/04/08

کلیدواژگان

کامپوزیت تفلون،

سایش،

کشش، سختی،

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

The effect of Inconel 625 value on mechanical and tribological properties of PTFE-based composites: Experimental and molecular dynamics simulation studies

Hamid Daneshmand¹, Masoud Araghchi^{1*}

1- Leading Material Organization, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran, Iran

* P.O.B. 11365-8486, maraghchi@aeoi.org.ir

Keywords

PTFE composite, Wear, Hardness, Molecular dynamics simulation

Abstract

PTFE-based composites are widely used as sealing materials. These composite materials are industrially manufactured and supplied with various reinforcements. Despite the desirable properties of commercial seals, these materials are generally not capable of sealing in specific working conditions and require the design and construction of PTFE-based composite with new reinforcements. In this study, Inconel 625 alloy powder was used as a reinforcing phase to make the PTFE-based composite. The effect of weight percentage of reinforcement on mechanical and tribological properties of composites has been investigated. In addition, the molecular dynamics simulation was used to investigate the composite wear. Addition of Inconel 625 significantly improves PTFE wear resistance. Addition of Inconel 625 reinforcing phase to PTFE matrix changes the PTFE wear mechanism from fatigue to adhesive type. Molecular dynamics simulation studies have shown that this is due to the high interaction energy at the junction of PTFE and Inconel 625, which does not allow PTFE to be easily separated from the sample. Among the developed composites, PTFE-reinforced composite with 50% by weight Inconel 625 had the best combination in terms of hardness (70 shore D) and specific wear rate ($4.710^{-4} \text{ mm}^3/\text{Nm}$). The manufacturing method is easy to use and the manufactured samples are capable of industrial production.

Please cite this article using:

برای ارجاع به مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Daneshmand, H., Araghchi, M., "The effect of Inconel 625 value on mechanical and tribological properties of PTFE-based composites: Experimental and molecular dynamics simulation studies," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 8, No. 4, pp. 1797-1805, 2022. <https://doi.org/10.22068/JSTC.2022.551166.1778>

1- مقدمه

دینامیک مولکولی برای بررسی خواص مختلف کامپوزیت‌های زمینه پلیمری از جمله خواص مکانیکی، دمای انتقال شیشه، ضریب انتقال حرارتی و... استفاده کرده‌اند. با این وجود، مطالعات کمی در خصوص خواص سایشی این مواد با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی صورت گرفته است. برای مثال، اخیراً، یانگ و همکاران [19] خواص سایشی کامپوزیت تفلون تقویت‌شده با نانولوله‌های کربن را بررسی نمودند.

در این مطالعه هدف ساخت آب‌بند کامپوزیت تفلون با تقویت‌کننده اینکونل 625 می‌باشد به صورتی که خواص سایشی زمینه تفلون بهبود یابد. بدین منظور، کامپوزیت زمینه تفلون با درصدهای مختلف پرکننده اینکونل 625 ساخته و مورد بررسی قرار گرفت. بررسی‌های تجربی بر روی سایش، سختی و کشش نمونه انجام گرفت. برای توصیف سایش و بررسی بیشتر اندرکنش‌های فصل مشترک کامپوزیت و نقش آن در نتایج تجربی، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شد.

2- مواد و روش‌ها**2-1- مواد**

پودر تفلون با اندازه تقریبی و مش‌بندی کوچک‌تر از 10 میکرومتر و پودر اتمیزه کرومی اینکونل 625 در سایز تقریبی 15-45 میکرومتر ساخت شرکت HOGANAS AB برای ساخت کامپوزیت تفلون-اینکونل خریداری شد. شکل 1 مورفولوژی و میانگین سایز ذرات اینکونل 625 را نشان می‌دهد. برای اختلاط تر، از حلال استون 99٪ به‌عنوان محیط پراکنده‌گی استفاده شد.

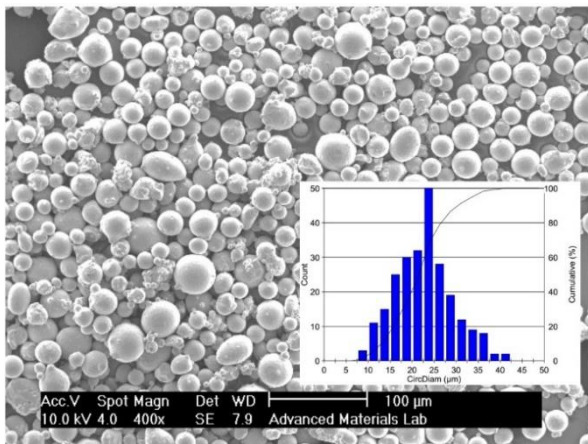


Fig. 1 Morphology and particle size distribution of Inconel 625 powder

شکل 1 مورفولوژی و توزیع اندازه ذرات پودر اینکونل 625

2-2- ساخت کامپوزیت

روش ساخت کامپوزیت تفلون دارای سه مرحله اختلاط، پرس سرد و تفجوشی است. بدین منظور پودرهای تفلون و اینکونل 625 در 200 میلی‌لیتر حلال استون آماده شد. برای تبخیر حلال در حین هم زدن با همزن مکانیکی، از حمام گرمایی استفاده شد و دمای حمام روی 70 درجه سانتی‌گراد تنظیم و به مدت یک ساعت هم زده شد. در نهایت تبخیر کامل حلال استون با استفاده از آون خلأ صورت گرفت. به‌منظور ساخت کامپوزیت تفلون-اینکونل از روش پرس سرد استفاده شد. بدین منظور، پودرهای مختلط شده در قالبی از جنس فولاد زنگ‌نزن ریخته و با فشار ایزوستاتیک سرد با فشاری معادل 670 مگاپاسکال پرس شدند. قالب به مدت یک دقیقه در این فشار نگه داشته شد. سپس نمونه از قالب خارج و در شرایط محیطی به مدت دو ساعت قرار داده شد تا هوای باقیمانده از نمونه خارج شود و تنش‌های پسماند باقی‌مانده از بین

در شرایط کاری، آب‌بندهای مکانیکی در معرض اصطکاک و سایش در برابر سطوح قرار می‌گیرند. درک خوب این پدیده برای بهبود حفاظت و دوام این مواد ضروری است. در حال حاضر از ترموپلاستیک‌ها، ترموست‌ها و کامپوزیت‌ها به‌عنوان آب‌بند استفاده می‌شود. در بین پلیمرهایی که به‌طور گسترده به‌عنوان آب‌بند مکانیکی استفاده می‌شوند، پلیمر پلی‌تترافلوئورواتیلن (تفلون) به دلیل ضریب اصطکاک کم، خاصیت خود روان‌کننده و همچنین مقاومت خوب در برابر حلال‌ها به‌طور گسترده در صنعت به‌منظور آب‌بندی مورد استفاده قرار می‌گیرد [5-1]. با این حال، تفلون مقاومت کمی در برابر سایش دارد که منجر به خرابی زودرس و مشکلات ناشی در آب‌بندی می‌شود [3].

مؤثرترین راه برای افزایش مقاومت در برابر سایش تفلون با استفاده از پرکننده‌هایی مانند برنز [8-6]، الیاف کربن [9]، الیاف شیشه [10-12]، اکسید روی [13]، آلومینا [3] و سیلیس [14] است.

جیشنگ و همکاران [1] خواص اصطکاک و سایش کامپوزیت تفلون پر شده با برنز را با لغزش بر چدن بررسی کردند. آن‌ها خاطر نشان کردند که کامپوزیت تفلون-برنز مقاومت سایش برتری نسبت به هر یک از اجزای تشکیل‌دهنده آن در حالت خالص خود نشان می‌دهد. با توجه به کار تحقیقاتی آن‌ها، مقدار ذرات برنز در سطح به‌طور قابل‌توجهی با پیشرفت لغزش افزایش یافت. تفلون ترجیحاً از سطح برداشته می‌شود و ذرات برنز عمیق‌تر به زمینه فشرده می‌شوند و در نتیجه کسر سطحی برنز در سطح تماس افزایش می‌یابد. محققان به این نتیجه رسیدند که کاهش نرخ سایش نتیجه اثر ذرات برنز است که یک عمل مسدودکننده بر روی لغزش نوارهای کریستالی تفلون ایجاد می‌کند. وانگ و همکاران [6] فیلم‌های انتقال کامپوزیت تفلون/برنز را با لغزش روی سطح فولادی تحت شرایط طراحی شده آماده کردند. محققان شکل، ضخامت و رفتار تریبولوژیکی فیلم‌های انتقال به‌دست‌آمده را دقیقاً مانند آنچه روی فیلم‌ها یا پوشش‌های معمول انجام شده بود، بررسی کردند. آن‌ها دریافتند که خواص تریبولوژیکی با افزایش مقدار برنز در کامپوزیت بهبود یافته است. همچنین ضریب اصطکاک کاهش یافته بود. تاناکا و همکاران [7] خواص سایش انواع مختلف پرکننده‌ها را در کامپوزیت‌های مبتنی بر تفلون مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها دریافتند که الیاف، مقاومت در برابر سایش را به‌طور مؤثرتری نسبت به دی‌سولفیدمولیبدن، پودرهای گرافیت یا حتی ذرات بسیار کوچک سخت بهبود می‌بخشند. علاوه بر این، محققان به این نتیجه رسیدند که بهبود مقاومت در برابر سایش کامپوزیت‌های مبتنی بر تفلون به مواد، شکل و اندازه پرکننده بستگی دارد. سایر محققان [3، 15، 16] گزارش کردند که افزودن ذرات پرکننده سخت می‌تواند مقاومت سایش و استحکام زمینه را بهبود بخشد.

اگرچه نتایج تجربی نشان می‌دهد که در حضور پرکننده‌ها، خواص مکانیکی و تریبولوژیکی زمینه تفلون به‌طور قابل‌توجهی افزایش می‌یابد، با این وجود ساز و کار اندرکنش در فصل مشترک زمینه تفلون با پرکننده‌ای مختلف به‌طور کامل مشخص نشده است [17]. به‌خصوص این امر برای بررسی خواص سایشی می‌تواند بسیار اهمیت داشته باشد. به‌طور کلی، بررسی‌های تجربی قابلیت توصیف کامل ساز و کارهای اندرکنش میان فاز تقویت‌کننده و فاز زمینه در فصل مشترک کامپوزیت را ندارند [18]. اخیراً، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌عنوان روشی کارآمد به‌منظور تکمیل مطالعات تجربی برای مطالعه اندرکنش‌های موجود در فصل مشترک مواد به‌خصوص برای مواد کامپوزیتی مورد استفاده قرار گرفته است. محققین از روش‌های شبیه‌سازی

ضریب اصطکاک (μ) هر نمونه به‌طور خودکار در طول آزمایش با کمک یک مبدل جابجایی متغیر خطی ثبت شد، تا بتوان تغییر ضریب اصطکاک با زمان را به دست آورد.
2- حجم کاهش یافته

پس از آزمایش، نمونه‌های دیسک با مسواک زدن نرم در زیر شیر آب گرم برای حذف زباله‌های ایجاد شده در طول آزمایش سایش، تمیز، خشک، و با دقت 10^{-4} گرم وزن شدند. با فرض عدم وجود سایش قابل توجه بین، از معادله زیر برای محاسبه حجم کاهش یافته نمونه در اثر سایش استفاده شد [20]، که در آن $\text{mm}^3 = (\text{حجم کاهش یافته}) \Delta V = g = (\text{جرم کاهش یافته}) m$ و $\text{g/cm}^3 = (\text{چگالی}) P$ است.

$$\Delta V = \frac{m}{\rho} \times 1000 \quad (1)$$

3- ضریب سایش

با استفاده از فرمول بیان شده در زیر، ضریب سایش یا نرخ سایش ویژه هر نمونه به دست آمد:

$$k = \frac{\Delta V}{F} \Delta s \quad (2)$$

که در آن k نرخ سایش ویژه (mm^3)، ΔV (حجم کاهش یافته) F ، نیروی نرمال (N) و Δs مسافت لغزش (m) است.

2-3-2- سختی

با توجه به ویژگی منحصر به فرد مواد تفلون، نمی‌توان از مقیاس‌های HRE و HRL Rockwell برای اندازه‌گیری سختی نمونه‌ها استفاده کرد. برای مواد پلیمری می‌توان از سختی سنچ که معمولاً برای پلاستیک استفاده می‌شود استفاده کرد. دو مقیاس متداول دورومتر مقیاس A و D هستند. اولی معمولاً برای پلاستیک‌های نرم‌تر استفاده می‌شود، در حالی که دومی برای پلاستیک‌های سخت‌تر استفاده می‌شود. در تحقیق حاضر از مقیاس D برای نشان دادن سختی تمامی نمونه‌ها استفاده شد، و سختی نمونه بر اساس استاندارد ASTM D2240 [21] با دستگاه Santam به دست آمد.

2-3-3- کشش

خواص مکانیکی نمونه‌ها تحت آزمایش کشش تعیین شد. آزمایش‌ها با نرخ بارگذاری 13 میلی‌متر (0.5 اینچ) بر دقیقه انجام شد. نمونه‌ها برای آزمایش کشش مطابق با استاندارد ASTM D4894 [22] با دستگاه Santam STM-15 ساخته شدند (شکل 4).

2-3-4- آزمون چگالی

چگالی نمونه‌های کامپوزیت بر اساس استاندارد ASTM D792 [23] با دستگاه Mettler toledo xs204 انجام شد (شکل 5). چگالی تئوری نمونه‌ها با استفاده از رابطه زیر محاسبه شد.

$$\frac{1}{P_{th}} = \frac{X_1}{P_1} + \frac{X_2}{P_2} \quad (3)$$

درصد تخلخل نمونه‌ها از رابطه 4 محاسبه شد؛

$$(V_{pro} = \frac{P_{th} - P_{ex}}{P_{th}}) \times 100 \quad (4)$$

که در این رابطه V_{pro} درصد حجمی تخلخل کامپوزیت، P_{th} چگالی تئوری و P_{ex} چگالی تجربی کامپوزیت می‌باشند.

برود. سیکل عملیات حرارتی استفاده شده به منظور تفجوشی نمونه به صورت 6 ساعت از دمای اتاق تا دمای 380 درجه سانتی‌گراد بود و سپس نمونه به مدت 6 ساعت در این دما نگه داشته شد. شکل 2 قالب مورد استفاده را نشان می‌دهد.



Fig. 2 Mould of fabrication

شکل 2 قالب نمونه‌سازی

2-3-3- روش‌های مشخصه‌یابی

2-3-1- سایش

رفتارهای تریبولوژیکی مواد با استفاده از تریبومتر پین روی دیسک مورد بررسی قرار گرفت. سایش کشویی به نوعی از سایش اشاره دارد که از لغزش یک سطح جامد در امتداد سطح دیگر ایجاد می‌شود؛ بنابراین در آزمون پین روی دیسک دو نمونه مورد نیاز است که به پین و دیسک معروف هستند. پین مورد استفاده یک رینگ تنگستنی با قطر 5 میلی‌متر بود. پین عمود بر یک سطح صاف به نام دیسک قرار داشت. دیسک‌ها نمونه آزمایش شده با دستگاه Bongshin در شکل 3 نشان داده شده است.

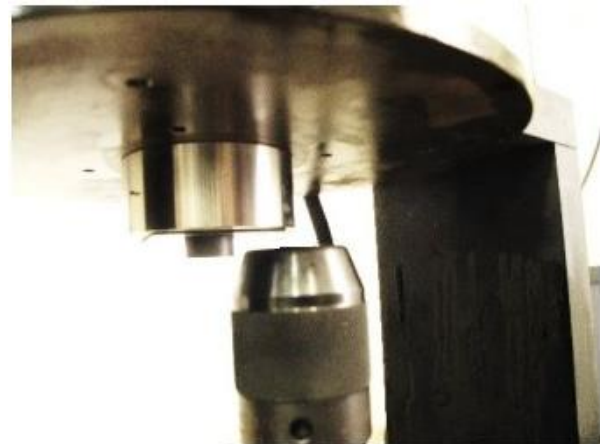


Fig. 3 Wear test sample

شکل 3 نمونه آزمون سایش

بر اساس مطالعه خدام زاده¹ و همکاران [5]، پارامترهای آزمون سایش انتخاب شد. آزمون سایش تحت شرایط روان کاری خشک انجام شد و پارامترهای آزمایش عبارت‌اند از: بار تماس 10 نیوتن، سرعت نگهدارنده پین 0.1 متر بر ثانیه و فاصله لغزش 500 متر. داده‌های زیر از آزمون سایش به دست آمد:

1- ضریب اصطکاک

¹ Khoddamzadeh

2-4-2- شبیه‌سازی سایش

بررسی تغییرات ساختار مواد پلیمری در سطح اتمی برای آزمون تجربی تریبولوژی بسیار مشکل است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی قابلیت بررسی تغییرات مولکولی را دارد و می‌تواند آزمون‌های تجربی مرسوم سایش را تکمیل کند. به‌منظور بررسی سایش کامپوزیت تفلون/اینکونل از روش 3 لایه‌ای بر اساس مطالعات یانگ و همکاران [19] استفاده شد. لایه‌های بالا و پایین از اتم‌های تنگستن و لایه میانی کامپوزیت بود. اندازه لایه تنگستن $3.0 \times 3.3 \times 1.1$ نانومتر مکعب و کامپوزیت $3.0 \times 3.3 \times 3.0$ نانومتر مکعب بود. قبل از شروع شبیه‌سازی بهینه‌سازی توسط الگوریتم اسمارت و به‌صورت 5 سیکل فرایند باز تفجوشی به مدت زمان 500 پیکوثانیه و به ترتیب در آنسامبل‌های NVT و NPT در رنج دمایی 300 تا 653 کلوین انجام شد. لایه تنگستن بالایی برای شبیه‌سازی جسم ساینده انتخاب شد. بارگذاری نیرو نرمال 101 کیلو پاسکال به لایه بالایی اعمال شد و نمونه با سرعت 1 Å/ps برای 200 پیکوثانیه تحت بارگذاری برشی قرار گرفت تا فرآیند اصطکاک کامل شود.

3- نتایج و بحث

1-3- تریبولوژی کامپوزیت تفلون/اینکونل 625

خواص تریبولوژیکی برای مواد آب‌بندی بسیار مهم است. رفتار تریبولوژیکی کامپوزیت‌های تفلون یک پدیده پیچیده است که به عوامل زیادی بستگی دارد. این عوامل شامل نوع پرکننده‌ها، درصد وزنی پرکننده‌ها و مورفولوژی آن‌ها می‌باشد [26]. ماهیت پرکننده که شامل ضریب هدایت حرارتی، سختی، قابلیت حمل بار و مقاومت در برابر تکه‌تکه شدن در مقیاس بزرگ است، مهم‌ترین نقش را در رفتار سایش کامپوزیت‌های تفلون ایفا می‌کند [4]. باید تأکید شود که تحقیقات تریبولوژیکی میکرو کامپوزیت‌های زمینه تفلون بالغ‌بر 50 سال یا بیشتر قدمت دارد [6].

همان‌طور که در شکل 6 نشان داده شده است، افزودن پرکننده‌ها به تفلون، ضریب اصطکاک تفلون را کاهش می‌دهد. با این‌وجود، با افزایش درصد وزنی مقدار پرکننده ضریب اصطکاک کامپوزیت‌ها به مقدار کمی کاهش یافته است. حجمی کاهش یافته نمونه‌ها در شکل 6 نشان داده شده است.

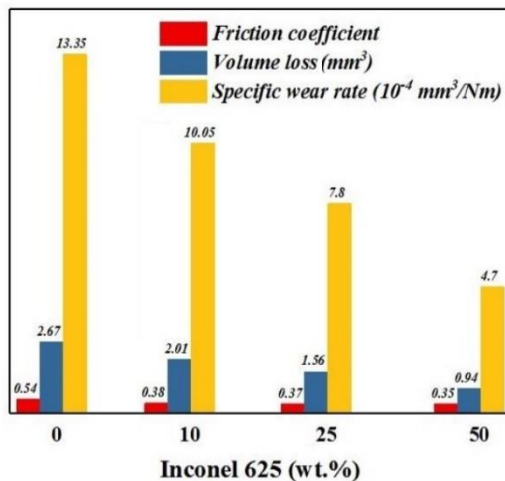


Fig. 6 Wear test results (coefficient of friction, volume loss and specific wear rate) PTFE and PTFE / Inconel 625 composites.

شکل 6 نتایج آزمون سایش (ضریب اصطکاک، حجم کاهش‌یافته و نرخ سایش ویژه) تفلون و کامپوزیت‌های تفلون/اینکونل 625

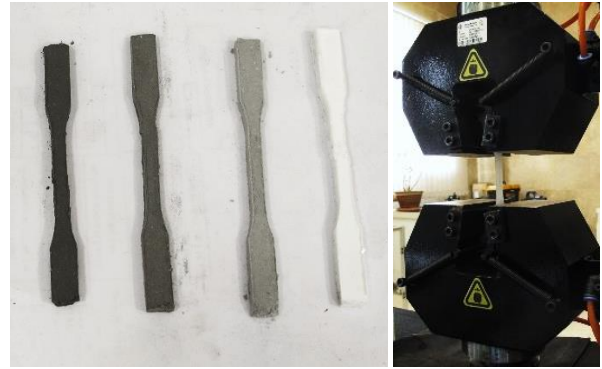


Fig. 4 Tensile test samples.

شکل 4 نمونه‌های آزمون کشش.

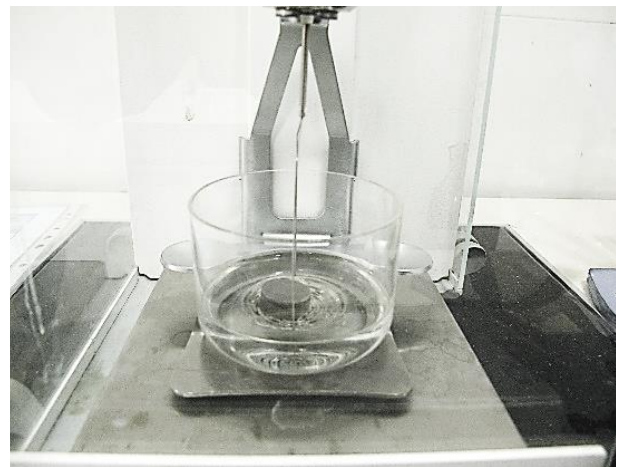


Fig. 5 Density test sample.

شکل 5 نمونه آزمون چگالی

5-3-2- میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)

برای بررسی ریزساختار کامپوزیت از آنالیز SEM دستگاه شرکت philips مدل XL-30 استفاده شد.

4-2- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی توسط نرم‌افزار Materials Studio V8.0 و با استفاده از میدان نیرو کامپس انجام شده است. به‌منظور محاسبه اندرکنش‌های واندروالس و الکترواستاتیک، از روش پایه اتمی و شعاع قطع 15 آنگستروم استفاده شد.

1-4-2- ساخت کامپوزیت تفلون

مدل‌سازی ساختار کامپوزیت تفلون بر اساس مطالعه پن و همکاران [24] صورت گرفت. شاخه بلند تفلون با درجه پلیمراسیون 200 ساخته و بهینه‌سازی شد. مطالعات نشان می‌دهد که زمانی درجه پلیمراسیون تفلون بزرگ‌تر از 10 باشد، انرژی چسبندگی مولکولی به حالت پایدار می‌رسد که در تطابق با نتایج تجربی است. به‌منظور ساخت اینکونل 625، ساختار کروی پودر اینکونل به شعاع 20 آنگستروم ساخته و بهینه‌سازی شد. سپس توسط Amorphous Cell Packing، به روش مونت کارلو، در چگالی 1.2 g/cm^3 ، سل پودر اینکونل 625 با تفلون پر شد. اتم‌های پودر اینکونل ثابت شد و 5 سیکل فرایند باز تفجوشی به مدت زمان 500 پیکوثانیه به ترتیب در آنسامبل‌های NVT و NPT در رنج دمایی 300 تا 653 کلوین انجام شد. بعد از آن نمونه برای بررسی سایش مورد استفاده قرار گرفت.

افزودن مواد پرکننده می‌تواند باعث بهبود قابل توجه نرخ سایش ویژه به مقدار 36 درصد به نسبت تفلون شود. برای درک ساز و کار سایش کامپوزیت‌های تفلون ریزساختار سطوح نمونه‌های ساییده شده با آنالیز SEM بررسی شد (شکل 7). برای تفلون ساز و کار غالب سایش از نوع خستگی است (شکل 7 الف و 1 و الف 2).

همان‌طور که مشخص است افزودن تقویت‌کننده اینکونل 625 تأثیر بسیار زیادی بر روی حجم نمونه در حین فرایند سایش داشته و برای نمونه کامپوزیت تفلون با 50 درصد وزنی اینکونل 625، حجم کاهش یافته به نسبت تفلون به مقدار 75 درصد کاهش یافته است. بعلاوه، مشاهده می‌شود که نرخ سایش ویژه بالای تفلون با افزودن پرکننده‌ها به‌طور چشمگیری کاهش می‌یابد.

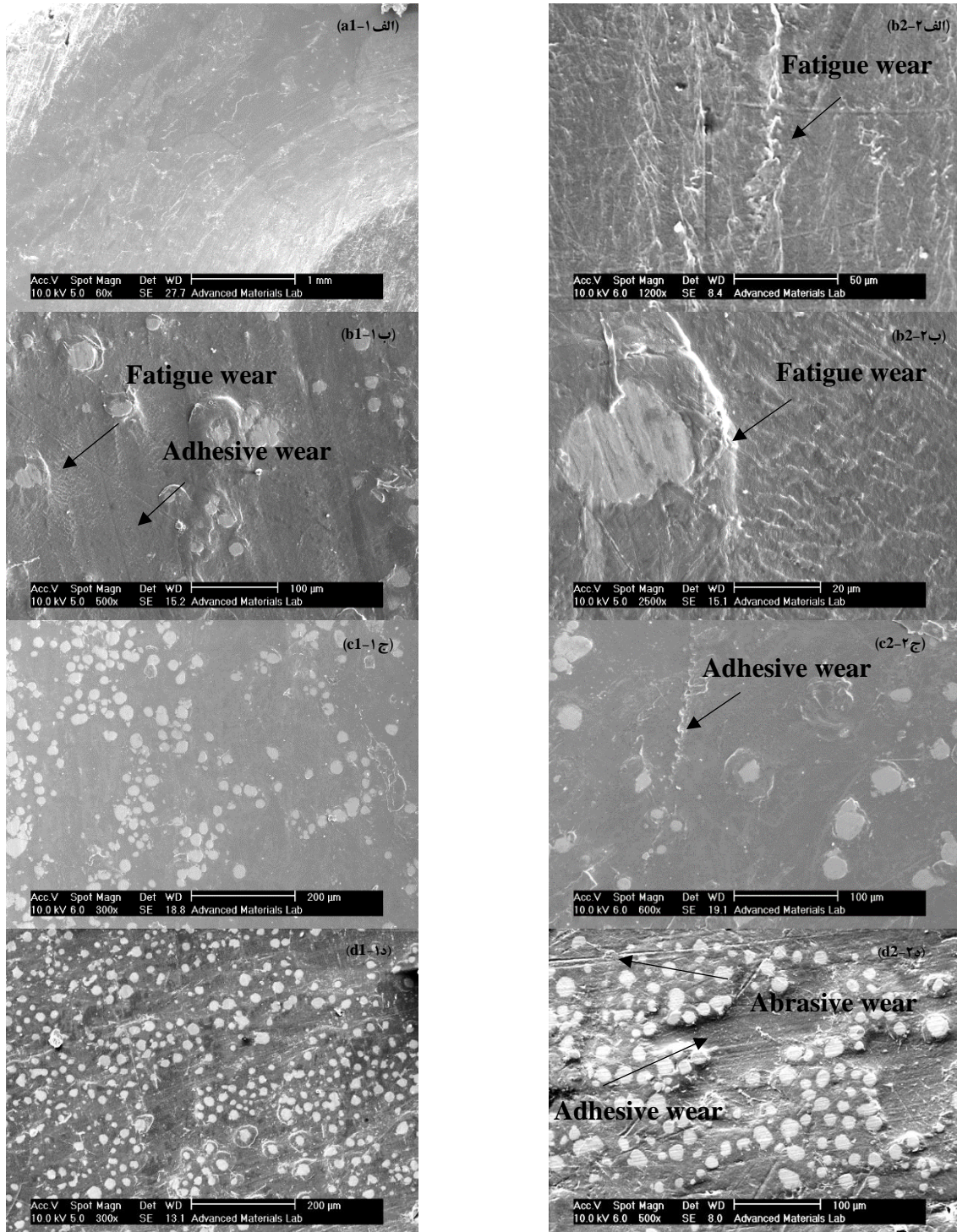


Fig. 7 Abrasive Surfaces: a) PTFE, b) 10 wt.% iniconel 625, c) 25 wt.% iniconel 625 and d) 50 wt.% iniconel 625.

شکل 7 سطوح ساییده شده: الف) تفلون، ب) کامپوزیت 10 درصد وزنی اینکونل 625، ج) کامپوزیت 25 درصد وزنی اینکونل 625 و د) کامپوزیت 50 درصد وزنی اینکونل 625

سریع شاخه‌های تفلون شده که این امر از باز شدن ساختار جلوگیری کرده است. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی درک کاملی از نتایج آزمون تجربی سایش می‌دهد. همان‌طور که در آزمون تجربی سایش نشان داده شد، افزودن فاز تقویت‌کننده اینکونل 625 به زمینه تفلون سبب تغییر ساز و کار سایش تفلون از نوع خستگی به نوع چسبنده می‌شود. با بررسی‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مشخص شد که علت این امر به سبب انرژی پیوند بالا در فصل مشترک تفلون و اینکونل می‌باشد که اجازه نمی‌دهد تفلون به‌سادگی از نمونه جدا شوند. باین‌وجود به سبب آنکه ذرات اینکونل 625 به‌طور کاملاً یکنواخت در زمینه پخش نشده‌اند، در نواحی خالی از فاز تقویت‌کننده اینکونل 626، تفلون به‌سادگی کنده‌شده است که این امر سبب شده ساز و کار سایش غالب نمونه‌های کامپوزیت تفلون تقویت‌شده با ذرات اینکونل 625 از نوع چسبنده باشد.

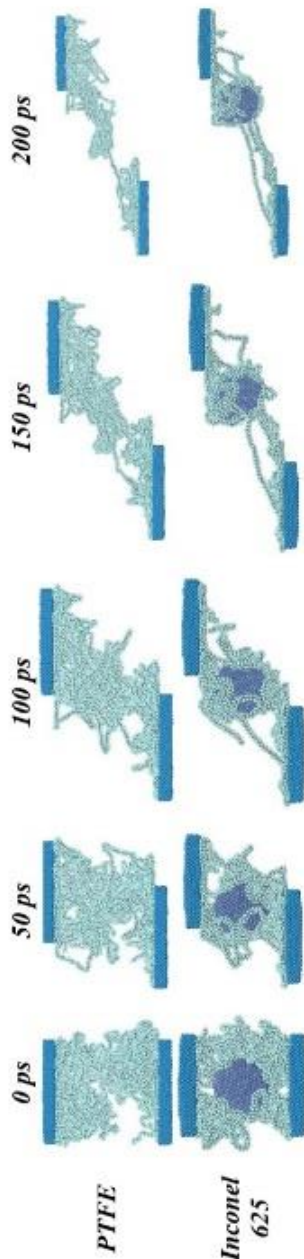


Fig. 8 Snapshots of the PTFE and PTFE / Inconel 625 composite abrasion process obtained from molecular dynamics simulation.

شکل 8 تصاویر فرآیند سایش تفلون و کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

با افزودن اینکونل به مقدار 10 درصد وزنی رفتار سایش دارای دو ساز و کار خستگی و همین‌طور چسبنده می‌شود. علت این امر به سبب درصد کم بسیار پایین فاز تقویت‌کننده است که سبب می‌شود هنوز ساز و کار سایش خستگی وجود داشته باشد اما به سبب حضور اینکونل، ساز و کار چسبنده نیز به نمونه اضافه‌شده است.

به سبب چسبندگی مناسب اینکونل با زمینه تفلون در فصل مشترک، اینکونل‌های در زمینه‌ی مانده‌اند و در طول فرآیند سایش از زمینه کنده نشده‌اند. ناحیه سایش چسبنده در نقاطی است که فاز تقویت‌کننده اینکونل وجود نداشته است (شکل 7 ب 1 و ب 2). در نتیجه با افزودن مقدار بیشتر تقویت‌کننده به زمینه تفلون می‌توان انتظار داشت ساز و کار سایش چسبنده به دلیل حضور بیشتر فاز تقویت‌کننده غالب‌تر شود. این امر در نمونه 25 درصد وزنی اینکونل مشاهده می‌شود. با افزایش درصد وزنی اینکونل از 10 درصد وزنی به 25 درصد وزنی می‌توان مشاهده نمود که سایش خستگی حذف‌شده است و تنها سایش چسبنده مشاهده می‌شود. (شکل 7 ج 1 و ج 2).

در نمونه 50 درصد وزنی اینکونل سایش چسبنده به‌خوبی قابل تشخیص است. علاوه بر آن، به دلیل درصد وزنی بسیار زیاد اینکونل در زمینه و سختی بالای این ماده، می‌توان مشاهده نمود که در کنار سایش چسبنده، سایش خراشان نیز به‌صورت محدود در سطح کامپوزیت ایجاد شده است (شکل 7 د 1 و د 2). می‌توان پیش‌بینی نمود که افزایش بیشتر فاز تقویت‌کننده می‌تواند سبب شود که سایش خراشان ساز و کار اصلی در نمونه‌ها گردد.

به‌طور کلی، ساز و کار سایش زمینه تفلون از نوع خستگی است. درصد وزنی اینکونل و چسبندگی فصل مشترک تفلون با اینکونل 625 عوامل اصلی در تعیین نوع ساز و کار سایش غالب زمینه تفلون است. این امر به سبب اندرکنش قوی فیزیکی در فصل مشترک اینکونل با زمینه تفلون است. با افزودن اینکونل به زمینه ساز و کار سایش زمینه تفلون از حالت خستگی به چسبنده تغییر می‌یابد.

به‌منظور درک بهتر نتایج آزمون تجربی سایش، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تریبولوژی کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 صورت گرفت. در شکل 8 تصاویر شبیه‌سازی سایش تفلون و کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 نشان داده‌شده است. با توجه به شکل مشخص است برای تفلون، به سبب تغییر فرم سریع و شکست به سبب تنش برشی، نمونه به‌سرعت از هم باز شده است [27]. باین‌وجود، در نمونه کامپوزیت به سبب چسبندگی بالای زمینه تفلون یا ذره اینکونل 625، از تغییر فرم سریع جلوگیری شده است [27]. به‌منظور بررسی بیشتر، پروفایل‌های غلظت تفلون و کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 در راستای ضخامت کامپوزیت با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دست آمد (شکل 9). غلظت نسبی تفلون در فصل مشترک سایش با لایه‌های بالای و پایینی تنگستن بسیار بیشتر از کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 است. از طرفی دیگر، به سبب وجود فاز تقویت‌کننده اینکونل و جلوگیری از تغییر فرم سریع شاخه‌های تفلون، غلظت نسبی کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 در قسمت بالک بسیار بیشتر از تفلون است. در نتیجه در نمونه تفلون، مقدار بسیار زیادی از شاخه تفلون جذب ناحیه سایش با تنگستن شده است، در حالی که در نمونه کامپوزیت، بیشتر شاخه‌های تفلون به سبب انرژی پیوند بالا، جذب ذره اینکونل 625 شده است. در نتیجه نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که تفاوت زیادی میان تفلون و تفلون تقویت‌شده با ذره اینکونل 625 می‌باشد. شاخه‌های پلیمر تفلون به‌سرعت در طی فرآیند شبیه‌سازی تغییر فرم داد و از هم باز می‌شوند. باین‌وجود در تفلون تقویت‌شده با ذره اینکونل، به سبب انرژی پیوند بالا در فصل مشترک تفلون و اینکونل 625، فاز تقویت‌کننده سبب جلوگیری از تغییر فرم

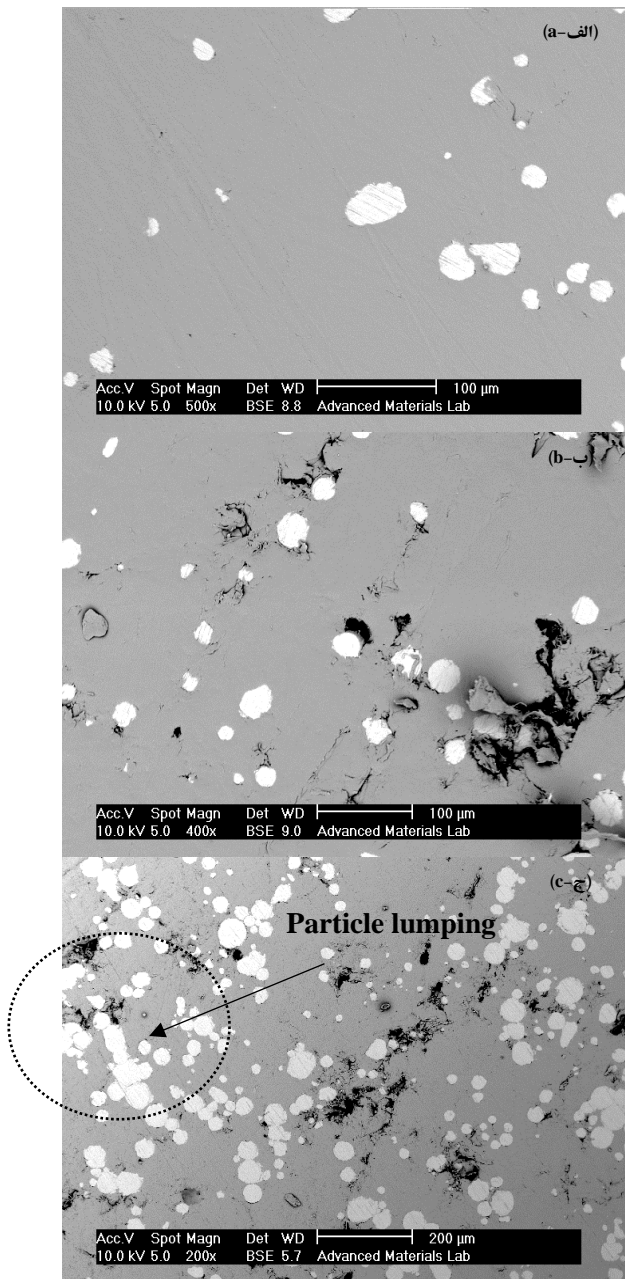


Fig. 10 Composite microstructure: a) 10% wt.% Inconel 625, b) 25% wt.% Inconel 625 and c) 50% wt.% Inconel 625.

شکل 10 ریزساختار کامپوزیت: الف) 10 درصد وزنی اینکونل 625، ب) 25 درصد وزنی اینکونل 625 و ج) 50 درصد وزنی اینکونل 625

2-2-3- کشش

منحنی‌های تنش-کرنش آزمایش‌های کششی در شکل 11 نشان داده شده است. در جدول 2، خواص مکانیکی نمونه‌های به‌دست‌آمده از منحنی‌های تنش-کرنش ارائه شده است. با توجه به آنکه کامپوزیت رفتار ویسکو-الاستیک دارند بالاترین تنش و کرنش این کامپوزیت‌ها اندازه‌گیری می‌شود [5].

نتایج آزمون کششی نشان می‌دهد که با افزودن و افزایش درصد وزنی اینکونل 625، استحکام تسلیم نمونه‌ها کاهش می‌یابد. استحکام کششی یک کامپوزیت عمدتاً به چسبندگی فصل مشترک بین زمینه و تقویت‌کننده‌ها بستگی دارد، زیرا تنش باید از طریق فصل مشترک از زمینه به تقویت‌کننده‌ها منتقل شود. پیوند بین پرکننده‌ها و تفلون به‌جای شیمیایی، کاملاً فیزیکی است.

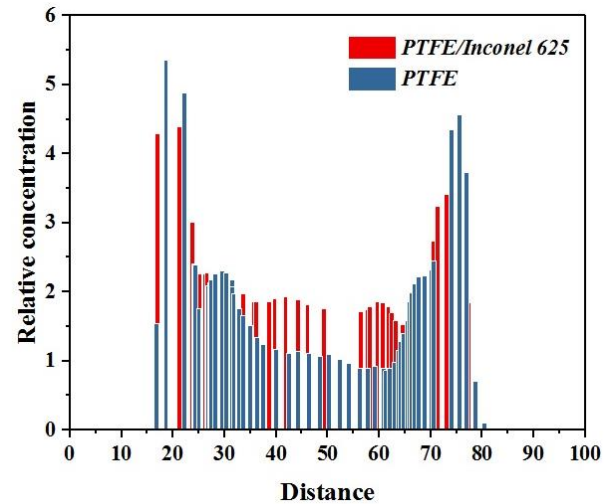


Fig. 9 PTFE and PTFE / Inconel 625 composite concentration profiles in line with the thickness obtained from molecular dynamics simulations.

شکل 9 پروفیل‌های غلظت تفلون و کامپوزیت تفلون/اینکونل 625 در راستای ضخامت به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

2-3- خواص مکانیکی کامپوزیت تفلون/اینکونل 625

1-3-2- سختی

افزودن ذرات سخت به‌عنوان عوامل تقویت‌کننده، به دلیل افزایش توان حمل بار و ممانعت ذرات سخت از تغییر فرم دانه‌های تفلون می‌تواند سختی زمینه تفلون را افزایش دهد [25]. همان‌طور که در جدول 1 نشان داده شده است، افزودن اینکونل 625 تا درصد وزنی 50 درصد وزنی، سختی زمینه تفلون را به‌اندازه تقریباً 30 درصد افزایش داده است. در نتیجه افزودن فاز تقویت‌کننده اینکونل تأثیر قابل‌توجهی بر روی سختی زمینه تفلون دارد. افزایش مقدار فاز تقویت‌کننده اینکونل در زمینه تفلون سبب افزایش سختی شده است. با این وجود، همان‌طور که در بررسی ریزساختاری در شکل 10 مشخص است، در مقادیر بالای فاز تقویت‌کننده اینکونل (50 درصد وزنی)، کلوخه شدن این ذرات در زمینه تفلون صورت می‌پذیرد که می‌تواند سبب بروز تخلخل در نمونه شود. افزودن مواد سخت سبب افزایش خواص سختی زمینه تفلون می‌شود، با این وجود، در درصد‌های بالای فاز تقویت‌کننده، کلوخه شدن ذرات تقویت‌کننده رخ می‌دهد که می‌تواند سبب کاهش سختی کامپوزیت تفلون شود [25]. در نتیجه به سبب کلوخه شدن ذرات فاز تقویت‌کننده و تخلخل، با افزایش درصد وزنی اینکونل از 25 به 50 سختی نمونه به مقدار بسیار کمی کاهش می‌یابد. در نتیجه برای رسیدن به بالاترین سختی برای نمونه کامپوزیت تفلون/اینکونل 625، درصد بهینه‌ای از فاز تقویت‌کننده (در این مطالعه 25 درصد وزنی) می‌توان استفاده نمود.

جدول 1 نتایج آزمون‌های سختی و تخلخل تفلون و کامپوزیت‌های تفلون/اینکونل 625

Table 1 Results of hardness and porosity tests of PTFE and PTFE / Inconel 625 composites.

درصد وزنی اینکونل 625	تخلخل (%)	سختی (Shore D)
0	1.1	55
10	1.8	66
25	2.1	71
50	3.6	70

در نتیجه، ترکیبات پر شده از تفلون مقاومت کششی کمتری نسبت به تفلون خالص نشان می‌دهند، زیرا تنش‌ها نمی‌توانند به‌طور مؤثر از پلیمر به پرکننده‌ها منتقل شوند؛ بنابراین، تمرکز تنش در گوشه‌های تیز این نواحی خالی که ترک‌ها شروع می‌شوند، رخ می‌دهد و منجر به شکست مواد می‌شود. تحقیقات برای مواد تقویت کننده میکرونی نشان داده است، ترکیبات پر شده تفلون نسبت به تفلون خالص مدول یانگ بالاتر اما استحکام کششی کمتری دارند [5].

مشاهده شد که در نمونه‌ها با افزایش مقدار پرکننده به مقدار 50 درصد وزنی، استحکام نهایی حداکثر تا 36 درصد کاهش یافت. با توجه به مقادیر مدول یانگ، واضح است که این مقادیر نیز تابعی از مقدار است. با مقایسه نمونه‌های می‌توان استنباط کرد که مقادیر مدول یانگ کامپوزیت‌ها با افزایش مقدار پرکننده افزایش می‌یابد زیرا سختی پرکننده‌ها بسیار بیشتر از تفلون است. با این حال، باید توجه داشت که درصد وزنی بیشتر پرکننده به معنای فصل مشترک‌های بیشتر بین زمینه و تقویت کننده است. از آنجایی که پیوندهای بین پرکننده‌ها و زمینه در کامپوزیت‌ها فیزیکی است، این فصل مشترک‌ها به مکان‌هایی برای شروع ترک تبدیل می‌شوند که منجر به کاهش استحکام نهایی نسبت به زمینه تفلون می‌شود.

2- اضافه نمودن اینکونل 625 به تفلون سبب افزایش سختی زمینه می‌شود. با این وجود، افزایش تخلخل نمونه‌ها تأثیر کمی بر روی مقدار سختی دارد. در درصد‌های بالای فاز تقویت کننده، کلوخه شدن ذرات تقویت کننده رخ می‌دهد که می‌تواند سبب کاهش سختی کامپوزیت تفلون شود. در نتیجه به سبب کلوخه شدن ذرات فاز تقویت کننده و تخلخل، با افزایش درصد وزنی اینکونل از 25 به 50، سختی نمونه به مقدار بسیار کمی کاهش می‌یابد. در نتیجه برای رسیدن به بالاترین سختی برای نمونه کامپوزیت تفلون/اینکونل 625، درصد بهینه‌ای از فاز تقویت کننده وجود دارد.

3- کامپوزیت‌های تفلون پر شده دارای استحکام کششی کمتری نسبت به تفلون خالص هستند. دلیل این امر این است که پیوند بین پرکننده‌ها و تفلون کاملاً فیزیکی است تا شیمیایی به طوری که چسبندگی قوی در فصل مشترک‌ها وجود ندارد. در نتیجه تنش‌ها نمی‌توانند به‌طور مؤثر از پلیمر به پرکننده‌ها منتقل شوند.

5- مراجع

- [1] Jisheng, E., and Gawne, D. T., "Tribological performance of bronze-filled PTFE facings for machine tool slideways," *Wear*, Vol. 176, pp. 195-205, 1994.
- [2] Unal, H., Sen, U., and Mimaroglu, A., "An approach to friction and wear properties of polytetrafluoroethylene composite," *Materials & design*, Vol. 27, pp. 694-699, 2006.
- [3] Sawyer, W. G., Freudenberg, K. D., Bhimaraj, P., and Schadler, L. S., "A study on the friction and wear behavior of PTFE filled with alumina nanoparticles," *Wear*, Vol. 254, No. 5-6, pp. 573-580, 2003.
- [4] Tevruz, T., "Tribological behaviours of bronze-filled polytetrafluoroethylene dry journal bearings," *Wear*, Vol. 230, No. 1, pp. 61-69, 1999.
- [5] Khoddanzadeh, A., Liu, R., and Wu, X., "Novel polytetrafluoroethylene (PTFE) composites with newly developed Triballoy alloy additive for sliding bearings," *Wear*, Vol. 266, No. 7-8, pp. 646-657, 2009.
- [6] Wang, Y., and Yan, F., "A study on tribological behaviour of transfer films of PTFE/bronze composites," *Wear*, Vol. 262, No. 7-8, pp. 876-882, 2007.
- [7] Tanaka, K., and Kawakami, S., "Effect of various fillers on the friction and wear of polytetrafluoroethylene-based composites," *Wear*, Vol. 79, No. 2, pp. 221-234, 1982.
- [8] Bahadur, S., and Tabor, D., "The wear of filled polytetrafluoroethylene," *Wear*, Vol. 98, pp. 1-13, 1984.
- [9] Qian-qian, S., and Xian-hua, C., "On the friction and wear behavior of PTFE composite filled with rare earths treated carbon fibers under oil-lubricated condition," *Wear*, Vol. 260, No. 11-12, pp. 1243-1247, 2006.
- [10] Trabelsi, M., Kharat, M., and Dammak, M., "On the friction and wear behaviors of PTFE based composites filled with MoS₂ and/or bronze particles," *Transactions of the Indian Institute of Metals*, Vol. 69, No. 5, pp. 1119-1128, 2016.
- [11] Xian-Hua, C., Xue, Y. J., and Xie, C. Y., "Friction and wear of rare-earth modified glass-fiber filled PTFE composites in dry reciprocating sliding motion with impact loads," *Wear*, Vol. 253, No. 7-8, pp. 869-877, 2002.
- [12] Nak-Ho, S., and Suh, N. P., "Effect of fiber orientation on friction and wear of fiber reinforced polymeric composites," *Wear*, Vol. 53, No. 1, pp. 129-141, 1979.

شکل 11 منحنی‌های تنش-کرنش تفلون و کامپوزیت‌های تفلون/اینکونل 625

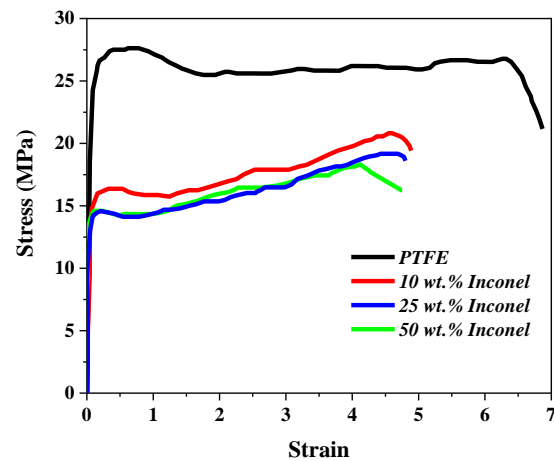


Fig. 11 Stress-strain curves of PTFE and PTFE / Inconel 625 composites.

جدول 2 نتایج آزمون کشش تفلون و کامپوزیت‌های تفلون/اینکونل 625

Table 2 Tensile test results PTFE and PTFE / Inconel 625 composites.

مدول یانگ (گیگاپاسکال)	کرنش تسلیم (%)	تنش تسلیم (مگاپاسکال)	درصد وزنی اینکونل 625
0.65	667	27.63	0
1.01	488	20.82	10
1.23	480	19.17	25
1.35	427	18.31	50

4- نتیجه‌گیری

در این مطالعه، آبدند کامپوزیتی زمینه تفلون تقویت شده با ذرات اینکونل 625 ساخته شده است که قابلیت استفاده در شرایط خاص کاری را دارد. نتایج این مقاله به شرح زیر است:

1- افزودن اینکونل 625 به‌طور قابل توجهی مقاومت سایش تفلون را بهبود می‌بخشد. افزودن فاز تقویت کننده اینکونل 625 به زمینه تفلون سبب تغییر ساز و کار سایش تفلون از نوع خستگی به نوع چسبندگی می‌شود. با بررسی‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مشخص شد که علت این امر به سبب انرژی

- [13] Li, F., Hu, K. A., Li, J. L., and Zhao, B. Y., "The friction and wear characteristics of nanometer ZnO filled polytetrafluoroethylene," *Wear* Vol. 249, pp. 877-882(2001).
- [14] Beckford, S., Wang, Y. A., and Zou, M., "Wear-resistant PTFE/SiO₂ nanoparticle composite films," *Tribology Transactions*, Vol. 54, No. 6, pp. 849-858, 2011.
- [15] Sole, B. M., and Ball, A., "On the abrasive wear behaviour of mineral filled polypropylene," *Tribology International*, Vol. 29, No. 6, pp. 457-465, 1996.
- [16] Cho, M. H., and Bahadur, S., "Study of the tribological synergistic effects in nano CuO-filled and fiber-reinforced polyphenylene sulfide composites," *Wear*, Vol. 258, No. 5-6, pp. 835-845, 2005.
- [17] Jiang, Q., Tallury, S. S., Qiu, Y., and Pasquinelli, M. A., "Molecular dynamics simulations of the effect of the volume fraction on unidirectional polyimide-carbon nanotube nanocomposites," *Carbon*, Vol. 67, pp. 440-448, 2014.
- [18] Li, Y., Wang, S., Arash, B., and Wang, Q., "A study on tribology of nitrile-butadiene rubber composites by incorporation of carbon nanotubes: Molecular dynamics simulations," *Carbon*, Vol. 100, pp. 145-150, 2016.
- [19] Yang, Z., Guo, Z., Yuan, C., and Bai, X., "Tribological behaviors of composites reinforced by different functionalized carbon nanotube using molecular dynamic simulation," *Wear*, Vol. 476, pp. 203669, 2021.
- [20] ASTM Standard Committee, G 99-05, Standard Test Method for Wear Testing with a Pin-on-Disk Apparatus, ASTM International, USA, 2005.
- [21] ASTM Standard Committee, D2240, Standard Test Method for Rubber Property-Durometer Hardness, ASTM International, USA, 2005.
- [22] ASTM Standard Committee, D4894, Standard Specification for Polytetrafluoroethylene (PTFE) Granular Molding and Ram Extrusion Materials, ASTM International, USA, 2007.
- [23] ASTM Standard Committee, D792, Standard Test Methods for Density and Specific Gravity (Relative Density) of Plastics by Displacement, ASTM International, USA, 2013.
- [24] Pan D., Fan, B., Qi, X., Yang, Y., and Hao, X., "Investigation of PTFE tribological properties using molecular dynamics simulation," *Tribology Letters*, Vol. 67, No. 1, pp. 1-10, 2019.
- [25] Mollazadeh, M., and Arghavani, R., "Study of the zirconia particles incorporation effects on the wear resistance and hardness of polytetrafluoroethylene," In *Persian, Journal of Science and Technology of Composites* Vol. 6, pp.649-656, 2020.
- [26] Sujuan, Y. and Xingrong, Z., "Tribological properties of PTFE and PTFE composites at different temperatures," *Tribology Transactions*, Vol. 57, pp. 382-386, 2014.
- [27] Song, J., Lei, H. and Zhao, G., "Improved mechanical and tribological properties of polytetrafluoroethylene reinforced by carbon nanotubes: A molecular dynamics study," *Computational Materials Science*, 168, pp.131-136, 2019.