



مدل توسعه یافته میکرومکانیکی برای پیش‌بینی خواص الکتریکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله‌های کربنی

مجتبی مظاهری¹، جواد پاینده‌پیمان^{2*}

1- استادیار، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی همدان، همدان، ایران.
2- استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی همدان، همدان، ایران.
* همدان، صندوق پستی 3733-1-65169، j.payandeh@hut.ac.ir

چکیده:

اطلاعات مقاله:

در این مقاله، یک مدل توسعه یافته میکرومکانیکی برای پیش‌بینی رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله‌های کربنی ارائه شده است. این مدل بر اساس نظریه میدان میانگین و با در نظر گرفتن پدیده تونل‌زنی کوانتومی الکترون‌ها بین نانو پرکننده‌ها ایجاد شده است. نانولوله‌های کربنی به شکل استوانه فرض شده‌اند که یک لایه بین فازی آن‌ها را پوشش داده است. نانولوله‌های کربنی به صورت تصادفی در مکان‌های مختلف در داخل ماتریس پلیمری و با جهت‌گیری تصادفی توزیع شده‌اند. تأثیر پارامترهای گوناگون نظیر ابعاد هندسی نانولوله‌های کربنی، نسبت اندازه آن‌ها، ضخامت لایه بین فازی، تونل‌زنی کوانتومی الکترون‌ها، رسانایی ماتریس پلیمری، رسانایی نانولوله‌های کربنی و رسانایی لایه بین فازی بر روی رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت در مدل نظری در نظر گرفته شده‌اند. مدل ارائه شده رفتارهای الکتریکی نانوکامپوزیت‌ها را در ناحیه عایق، ناحیه پرکولاسیون و ناحیه فلزی و همچنین گذار تیز رسانایی یا آغاز پرکولاسیون و ناحیه فلزی در کسر حجمی‌های بالا را به خوبی بازتولید می‌کند. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش اندازه نانولوله‌های کربنی در نانوکامپوزیت، آستانه پرکولاسیون کاهش می‌یابد. مقدار رسانایی پرکننده و ماتریس به ترتیب تنها بر ناحیه فلزی و عایق اثرگذار هستند. به منظور صحت‌سنجی، نتایج آزمایشگاهی موجود در مطالعات قبلی با مدل حاضر پیش‌بینی شده است که مدل ارائه شده به خوبی این نتایج تجربی را پیش‌بینی می‌کند.

دریافت: 1401/07/26

پذیرش: 1401/10/10

کلیدواژگان

نانوکامپوزیت پلیمری، رسانا، نانولوله کربنی، فاز میانی، آستانه پرکولاسیون، مدل میکرومکانیکی

A developed micromechanical model to predict electrical properties of polymer nanocomposites containing carbon nanotubes

Mojtaba Mazaheri¹, Javad Payandehpeyman^{2*}

1- Department of Basic Science, Hamedan University of Technology, Hamedan, Iran.
2- Department of Mechanical Engineering, Hamedan University of Technology, Hamedan, Iran.
* P.O.B. 65169-1-3733, Hamedan, Iran, j.payandeh@hut.ac.ir

Keywords

Conductive polymer nanocomposite, Carbon nanotube, Interphase, Percolation threshold, Micromechanical model

Abstract

In this paper, a developed micromechanical model to predict the effective electrical conductivity of polymer nanocomposites containing carbon nanotubes was presented. This model was based on mean field theory and considering the quantum tunneling phenomenon of electrons between nanofillers. Carbon nanotube was assumed to be cylindrical, which was covered by an interphase layer. Carbon nanotubes were randomly distributed and oriented inside the polymer matrix. The effect of various parameters such as the geometric dimensions of carbon nanotubes, their aspect ratio, the thickness of the interphase layer, the quantum tunneling of electrons, the conductivity of the polymer matrix, the conductivity of carbon nanotubes and the conductivity of the interphase layer on the effective conductivity of the nanocomposite were considered in the theoretical model. The presented model reproduced the electrical behavior of nanocomposites in the insulating region, the percolation region, and the metal region, as well as the sharp transition of conductivity or the beginning of percolation and the metal region in high volume fractions. The results showed that by increasing the size of carbon nanotubes in nanocomposite, the percolation threshold decreased. The conductivity values of the filler and the matrix, respectively, only affected the metal and insulation areas. Finally, the present model was used to reproduce the experimental reported data that the predicted results were in good agreement with the experimental data.

Please cite this article using:

برای ارجاع به مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Mazaheri, M., Payandehpeyman, J., "A developed micromechanical model to predict electrical properties of polymer nanocomposites containing carbon nanotubes," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 9, No. 2, pp. 1961-1969, 2023.
https://doi.org/10.22068/JSTC.2022.563716.1805

1- مقدمه

روش‌های محاسباتی عددی پر هزینه و طولانی هستند و فرمول‌بندی دقیق ندارند. مدل‌سازی‌های گوناگون هم ارائه شده‌اند که در هر یک از آن‌ها تعدادی از ویژگی‌های پرکننده‌ها، لایه بین فاز و ماتریس را در نظر گرفته‌اند [15]. به طور مثال، در مدل‌های بر اساس مدل کلاسیکی پرکولاسیون، رفتارهای قانون توان برای رسانایی در نظر می‌گیرند. این مدل‌ها، تنها رفتار سیستم در نزدیکی آستانه گذار را می‌توانند پیش‌بینی کنند و رفتارهای بخش رسانا و عایق را به خوبی پیش‌بینی نمی‌کنند. در این مدل‌های کلاسیک، سازوکار تونل‌زنی کوانتومی الکترونی و ویژگی‌های لایه بین فاز در نظر گرفته نمی‌شود [16]. مدل‌های ریاضی و پدیده‌شناسی هم ارائه شده‌اند که در آن‌ها همه پارامترهای فیزیکی و هندسی بخش‌های سیستم در نظر گرفته نمی‌شوند. یک مدل همگن میدان مؤثر شلی-موری-تاناکا برای محاسبه رسانایی الکتریکی مؤثر RVE کامپوزیت حاوی نانولوله‌های کربنی با زمینه سیمانی ارائه شده است [17]. در این مدل [17] رسانایی مؤثر RVE شامل سه بخش رسانایی ماتریس، رسانایی ناشی از تونل‌زنی الکترون‌ها و رسانایی ناشی از رسانش بین نانولوله‌های کربنی است. سه بخش رسانایی ماتریس سیمانی، رسانایی ناشی از تونل‌زنی الکترون‌ها و رسانایی ناشی از رسانش بین نانولوله‌های کربنی به صورت جداگانه محاسبه و در پایان با هم جمع می‌شوند. مدل همگن میدان مؤثر اشلی-موری-تاناکا علی‌رغم پیش‌بینی مناسب رسانایی الکتریکی مؤثر RVE در ناحیه فلزی، یک شکستگی در ناحیه آغاز پرکولاسیون دارد و پیوستگی رفتار داده‌های تجربی را نمی‌تواند بازتولید کند [17].

در مقاله حاضر، یک مدل میکرومکانیکی توسعه یافته بر اساس نظریه میدان میانگین براگمن برای شبیه‌سازی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله‌های کربنی با فاز میانی ارائه شده است. در این مدل فیزیکی همه ویژگی‌های رسانایی ماتریس، رسانایی ناشی از تونل‌زنی الکترون‌ها، رسانایی پرکننده‌ها، رسانایی لایه‌های بین فاز، ابعاد هندسی پرکننده‌ها و فاز میانی و جهت‌گیری تصادفی پرکننده‌ها بر روی رسانایی مؤثر RVE تأثیر می‌گذارند. با استفاده از این مدل، رسانایی الکتریکی مؤثر RVE به عنوان تابعی از پارامترهای مختلف فیزیکی و هندسی بخش‌های ماتریس، پرکننده و فاز میانی به صورت تحلیلی به دست می‌آید. در مدل حاضر بر خلاف مدل ارائه شده در مرجع [17] که فرض کرده است ذرات نانولوله دارای انحنای شدید بوده و به صورت کلوخه‌ای در کل زمینه سیمانی پخش شده‌اند، فرض شده است که ذرات نانولوله ساختار میله‌ای بدون انحنای داشته و به صورت کاملاً یکنواخت و تصادفی در زمینه پلیمری پراکنده شده‌اند. به منظور بررسی توانایی و صحت‌سنجی مدل ارائه شده برای پیش‌بینی رفتار رسانایی کامپوزیت‌های پلیمری، از نتایج تجربی چهار نانوکامپوزیت حاوی نانولوله‌های کربنی با ماتریس‌های پلیمری استفاده شده است. این مدل توانایی بازتولید نتایج تجربی رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت در بازه گسترده‌ای از کسر پرکننده‌ها را دارد. رفتار رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت در ناحیه عایق، ناحیه گذار پرکولاسیون و ناحیه فلزی (رسانا) به دست می‌آید که با تغییرات پیوسته نتایج تجربی همخوانی دارد.

2- مبانی توسعه مدل

نحوه تغییرات رسانایی نانوکامپوزیت‌ها با افزایش پرکننده‌های رسانا در شکل 1 نشان داده شده است. نانوکامپوزیت‌ها با کسر حجمی بسیار کم از نانولوله‌های کربنی، فاصله بین نانولوله‌ها زیاد است و احتمال رسانش و تونل

استفاده از نانوکامپوزیت‌ها به دلیل خواص فوق‌العاده مختلف آن‌ها در سال‌های اخیر گسترش بسیار زیادی پیدا کرده است [1]. نانوکامپوزیت‌های زمینه پلیمری با توجه به وزن بسیار کم و مراحل ساخت ساده‌تر که منجر به کاهش هزینه‌های تولید آن‌ها می‌شود [2]، در حال جایگزینی سایر مواد در صنایع مختلف شده است [3]. در میان پرکننده‌های مختلف کامپوزیت‌ها، نانولوله‌های کربنی به دلیل استحکام بسیار بالا، رسانایی الکتریکی و گرمایی فوق‌العاده در کنار انعطاف بسیار زیاد آن، جایگاه ویژه‌ای در تولید نانوکامپوزیت‌ها پیدا کرده است [4, 5]. نانوکامپوزیت پلیمری رسانا¹ با پرکننده نانولوله‌های کربنی به دلیل ویژگی‌های الکتریکی، گرمایی و مکانیکی دارای کاربردهای زیادی در ابزارهای الکترونیکی قابل کشش² [6]، محافظت تداخل الکترومغناطیسی [7] و حسگرها هستند [8]. افزودن کسر حجمی مشخصی از نانولوله‌های کربنی به نانوکامپوزیت پلیمری منجر به افزایش ناگهانی رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت پلیمری می‌شود که به عنوان آستانه پرکولاسیون³ شناخته می‌شود [9].

رسانایی الکتریکی و نسبت اندازه نانولوله‌های کربنی از رسانایی الکتریکی و نسبت اندازه⁴ پرکننده‌های کربنی مانند کربن بلک⁵، گرافن و فیبرهای کربنی بیشتر است. در نتیجه نانوکامپوزیت‌های پلیمر حاوی نانولوله‌های کربنی آستانه پرکولاسیون در بازه $P_c = 0.017 - 0.021$ دارند که کمتر از آستانه پرکولاسیون نانوکامپوزیت‌های حاوی پرکننده‌های دیگر کربنی مانند کربن بلک [10]، گرافن و فیبرهای کربنی است [11]. نحوه توزیع مکانی و جهت‌گیری نانولوله‌های کربنی در داخل پلیمر منجر به تولید نانوکامپوزیت‌هایی با ساختار همگن⁶، ساختار تجمع‌یافته⁷ و ساختار جدا شده⁸ می‌گردد. رسانایی الکتریکی در نانوکامپوزیت‌ها بر اساس دو سازوکار شبکه رسانش در ماتریس و پدیده تونل زنی کوانتومی الکترون‌ها بین پرکننده‌ها رخ می‌دهد [10]. در سازوکار شبکه رسانش، نانولوله‌های کربنی رسانا هستند و با افزایش کسر حجمی یک شبکه اتصال رسانا در داخل ماتریس تشکیل می‌دهند. بنابراین، الکترون‌ها می‌توانند در داخل نانولوله‌های کربنی و بین آن‌ها از طریق اتصال‌ها حرکت کنند. در سازوکار تونل‌زنی کوانتومی، الکترون‌های رسانش می‌توانند در بین نانولوله‌هایی که در فاصله‌های نزدیک هستند تونل‌زنی کنند. وقتی نانولوله‌های کربنی در فاصله‌ای کمتر از طول تونل‌زنی⁹ از یکدیگر قرار می‌گیرند الکترون‌ها می‌توانند از داخل ماتریس و یا لایه بین فاز به صورت تونل‌زنی از یک نانولوله به نانولوله دیگر تونل بزنند. نانولوله‌های کربنی در کسر حجمی‌های کم در داخل ماتریس پخش می‌شوند و بنابراین احتمال اتصال آن‌ها به یکدیگر بسیار کم است و در نتیجه سازوکار تونل زنی سهم عمده‌ای در رسانش الکتریکی نانوکامپوزیت‌ها دارد [12].

رسانایی الکتریکی و پدیده پرکولاسیون در نانوکامپوزیت‌های پلیمر رسانا به ویژگی‌های فیزیکی و شکل هندسی نانولوله کربنی، ماتریس پلیمر، فاز میانی یا لایه بیرونی پرکننده‌ها در ماتریس، انرژی سد تونل‌زنی، فاصله تونل‌زنی بین نانولوله‌های کربنی و توزیع نانولوله‌ها و جهت‌گیری فضایی نانولوله‌ها در نانوکامپوزیت بستگی دارد [10]. برای پیش‌بینی رسانایی و آغاز پرکولاسیون نانوکامپوزیت‌های حاوی نانولوله کربنی از روش‌های محاسباتی از قبیل شبیه‌سازی مونت کارلو [13] و روش‌های المان محدود [14] استفاده شده است.

6 Homogeneous structure

7 Aggregated structure

8 Segregated structure

9 Tunneling distance

1 Conductive polymer nanocomposite

2 Stretchable electronic device

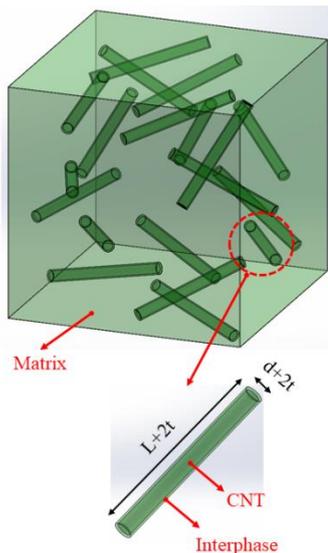
3 Percolation threshold

4 Aspect ratio

5 Carbon black

می‌توان برای توصیف رسانایی در نانوکامپوزیت‌های با توزیع ناهمگن با ساختار تجمیع شده و ساختار جدا شده استفاده کرد [20] اما در این مقاله نانوکامپوزیت با ساختار توزیع همگن در نظر گرفته شده است. همان‌طور که در شکل (الف-2) دیده می‌شود، نانولوله‌های کربنی به شکل استوانه با ارتفاع L و قطر d در نظر گرفته شده و فاز میانی با ضخامت t آن را پوشانده است. نسبت اندازه، نسبت طول به قطر، پرکننده‌های مجتمع استوانه‌ای شکل به صورت $M = \frac{L+2t}{d+2t}$ تعریف می‌شود.

(الف-ا)



(ب-ب)

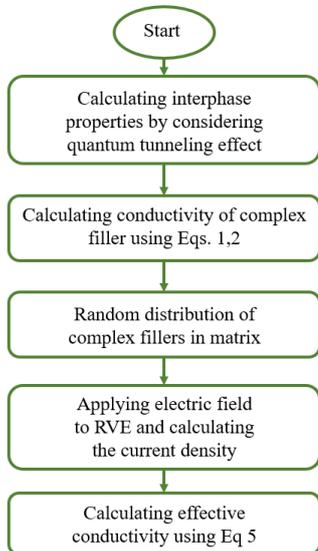


Fig. 2 (top) representative volume element (RVE) of a polymer nanocomposite containing carbon nanotubes, (bottom) composite filler containing a cylindrical carbon nanotube of diameter d and length L covered with an interfacial layer of thickness t . (b) Flow chart of the procedure for calculation of effective conductivity of nanocomposites.

شکل 2 (الف) (بالا) عنصر حجم نماینده (RVE) نانوکامپوزیت پلیمر حاوی نانولوله‌های کربنی، (پایین) پرکننده مجتمع حاوی نانولوله کربنی استوانه‌ای شکل با قطر d و طول L که با فاز میانی با ضخامت t پوشانده شده است. (ب) فلوجارت روند محاسبه رسانایی معادل نانوکامپوزیت

زنی الکترون‌ها بین نانولوله‌های کربنی بسیار کم است، در نتیجه نانوکامپوزیت رفتار عایق گونه دارد. با افزایش کسر حجمی نانولوله‌های کربنی در داخل ماتریس، احتمال اتصال نانولوله‌ها و در نتیجه رسانش و تونل‌زنی الکترون‌ها افزایش می‌یابد. در بازه مشخصی از کسر حجمی نانولوله‌های کربنی، رسانایی نانوکامپوزیت به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که ناحیه پرکولاسیون نامیده می‌شود و در شکل 1 دیده می‌شود. کسر حجمی که به ازای آن بیشترین تغییر در رسانایی نانوکامپوزیت رخ می‌دهد آغاز پرکولاسیون نامیده می‌شود. در کسر حجمی‌های بالاتر از آغاز پرکولاسیون، رسانایی نانوکامپوزیت به صورت مجانبی افزایش می‌یابد و به یک مقدار نهایی نزدیک می‌شود که ناحیه فلزی یا رسانا نامیده می‌شود. ناحیه عایق، ناحیه پرکولاسیون و ناحیه فلزی در شکل 1 دیده می‌شوند. با افزایش کسر حجمی نانولوله‌ها در داخل ماتریس که به صورت شماتیک در ناحیه‌های مختلف شکل 1 دیده می‌شود احتمال تشکیل شبکه رسانش در ماتریس افزایش می‌یابد و در نتیجه رسانایی نانوکامپوزیت افزایش می‌یابد [16].

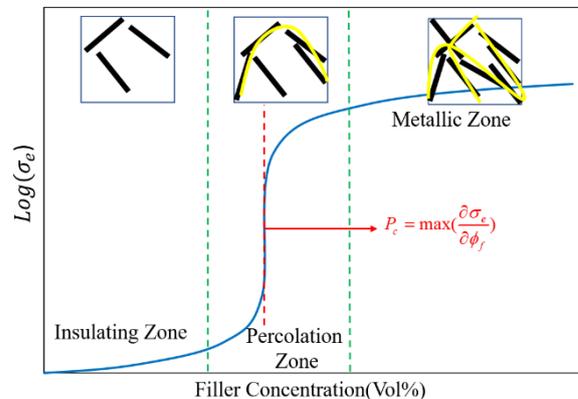


Fig. 1 Conductivity of nanocomposite versus volume fraction of conductive fillers. Insulating, percolation and metallic regions are shown. The conduction network formed by the fillers in each of these areas are specified.

شکل 1 رسانایی نانوکامپوزیت بر حسب کسر حجمی پرکننده‌های رسانا. ناحیه‌های عایق، پرکولاسیون و فلزی نشان داده شده‌اند. شبکه رسانش تشکیل شده توسط پرکننده‌ها در هر یک از این ناحیه‌ها مشخص شده‌اند.

در این بخش، مبانی تئوری یک مدل میکرومکانیکی توسعه یافته ارائه می‌شود تا با استفاده از آن رفتارهای رسانایی و پرکولاسیون نانوکامپوزیت‌های حاوی نانولوله‌های کربنی، که در شکل 1 دیده می‌شود، را توضیح داد. با استفاده از این رهیافت رسانایی الکتریکی و پرکولاسیون نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانو صفحه‌های گرافن [18] و ویژگی‌های الاستیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانو صفحه‌های خاک رس بررسی شده‌است [19]. روند کلی حل مسئله در شکل 2 نشان داده شده است. وقتی نانولوله‌های کربنی در داخل ماتریس پلیمر توزیع می‌شوند، فاز میانی سطح بیرونی پرکننده‌ها را پوشش می‌دهد. فاز میانی ویژگی‌های فیزیکی مابین ویژگی‌های فیزیکی نانولوله کربنی و ماتریس پلیمر دارد. نانولوله کربنی با فاز میانی به عنوان پرکننده مجتمع¹ شناخته می‌شود که در شکل 2(الف-a) دیده می‌شود. در شکل 2(الف-a)، عنصر حجم نماینده² (RVE) دیده می‌شود که پرکننده‌های مجتمع در داخل این حجم در مکان‌های تصادفی و با جهت‌گیری تصادفی توزیع شده‌اند. از این مدل

² Representative volume element

¹ Complex filler

$$\vec{E}_{in,m} = \sum_{k=x,y,z} \frac{1}{1+B_{m,k}(\sigma_{m,k}-\sigma_{e,k})/\sigma_{e,k}} \vec{E}_0 \quad (7)$$

که $B_{m,k}$ و $B_{com,k}$ به ترتیب ضریب واقطبش نانولوله‌های مجتمع و ضریب واقطبش ذره‌های پلیمر در راستای k ($k = x, y, z$) هستند که به شکل هندسی نانولوله‌های مجتمع و ذره‌های پلیمر وابسته هستند. با توجه به اینکه رسانایی نانولوله‌های مجتمع در راستاهای مختلف با یکدیگر تفاوت دارد، چگالی جریان الکتریکی در داخل نانولوله‌های کربنی مجتمع در راستاهای k به صورت زیر هستند:

$$J_{in,com,k} = \sigma_{com}^k E_{in,com,k} \quad (8)$$

اما رسانایی ذره‌های پلیمر در همه راستاها با یکدیگر برابر هستند. بنابراین چگالی جریان در داخل ذرات پلیمر به صورت زیر است:

$$J_{in,m} = \sigma_m E_{in,m} \quad (9)$$

با قرار دادن رابطه‌های (6) تا (9) در رابطه (5)، معادله رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت‌های نانولوله کربنی به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\sum_{k=x,y,z} (1 - \frac{\phi_f}{\alpha}) \frac{\sigma_{e,k} - \sigma_m}{\sigma_{e,k} + B_{m,k}(\sigma_m - \sigma_{e,k})} + \sum_{k=x,y,z} \frac{\phi_f}{\alpha} \frac{\sigma_{e,k} - \sigma_{com}^k}{\sigma_{e,k} + B_{com,k}(\sigma_{com}^k - \sigma_{e,k})} = 0 \quad (10)$$

که ϕ_f کسر حجمی نانولوله‌های کربنی لخت داخل ماتریس است و $\alpha = \frac{\pi(\frac{d}{2})^2 L}{\pi(\frac{d+2t}{2})^2 (L+2t)}$ نسبت حجم نانولوله کربنی لخت به حجم نانولوله کربنی مجتمع است. بنابراین، $\frac{\phi_f}{\alpha}$ کسر حجمی نانولوله‌های کربنی مجتمع در ماتریس است.

بر اساس نظریه میدان میانگین، با توجه به توزیع تصادفی مولکول‌های پلیمر در جهات و زوایای مختلف که در واقع ماتریس را تشکیل داده‌اند، آن‌ها به صورت ذره‌های کروی شکل معادل در نظر گرفته می‌شوند. بنابراین، ضرایب واقطبش برای ذره‌های پلیمر در راستاهای مختلف k ($k = x, y, z$) با یکدیگر برابر هستند:

$$B_{m,k} = 1/3 \quad (11)$$

با توجه به اینکه نانولوله‌های کربنی به صورت استوانه‌های بلند در نظر گرفته شده‌اند، ضرایب واقطبش برای نانولوله‌های کربنی به صورت زیر هستند:

$$B_{com,x} = B_{com,y} = \frac{1-B_{com,z}}{2} \quad (12)$$

با جایگذاری رابطه‌های (11) و (12) در رابطه (10)، عبارت زیر برای معادله رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت به دست می‌آید:

$$3 \left(1 - \frac{\phi_f}{\alpha} \right) \frac{\sigma_e - \sigma_m}{2\sigma_e + \sigma_m} + \frac{\phi_f}{3\alpha} \left[\frac{\sigma_e - \sigma_{com}^z}{\sigma_e + B_{com,z}(\sigma_{com}^z - \sigma_e)} + 4 \frac{\sigma_e - \sigma_{com}^x}{2\sigma_e + (1 - B_{com,z})(\sigma_{com}^x - \sigma_e)} \right] \quad (13)$$

با توجه به اینکه نسبت اندازه نانولوله‌های کربنی بسیار بزرگ است، $M = \frac{L+2t}{d+2t} \gg 1$ ضریب واقطبش در راستای محور استوانه به صورت زیر نوشته می‌شود:

برای به دست آوردن رسانایی الکتریکی عنصر حجم نماینده این نانوکامپوزیت در شکل (الف-2)، ابتدا رسانایی الکتریکی یک پرکننده مجتمع به دست می‌آید. دستگاه مختصات موضعی را برای پرکننده مجتمع در پایین شکل 2 به صورتی در نظر می‌گیریم که محور Z در راستای طول استوانه و محورهای X و Y در راستای عمود بر طول استوانه باشند. بنابراین رسانایی پرکننده مجتمع باید در راستاهای X و Y و Z به دست آید. با توجه به مقطع دایروی استوانه و ضخامت یکسان لایه بین‌فازی، رسانایی پرکننده مجتمع در راستاهای X و Y با یکدیگر برابر هستند [21]. بنابراین، دو رسانایی در امتداد محور استوانه و در راستای عمود بر محور استوانه به نام‌های رسانایی طولی، σ_{com}^z ، در راستای محور Z و رسانایی عرضی، σ_{com}^x ، در راستای محورهای X و Y برای پرکننده مجتمع در نظر گرفته می‌شود. پرکننده مجتمع در راستای محور Z شامل 4 قسمت است. این قسمت‌ها شامل الف-استوانه نانولوله کربنی لخت با قطر d و طول L در مرکز، ب-پوسته جانبی استوانه‌ای به قطر داخلی d ، قطر خارجی $d + 2t$ و طول L ، ج و د-پوسته‌های به شکل استوانه کوتاه در دو انتهای نانولوله با قطر $d + 2t$ ضخامت t هستند. با استفاده از قاعده مقاومت‌های موازی و قاعده مقاومت‌های متوالی، رسانایی معادل پرکننده مجتمع در راستای طولی یا محور Z به صورت زیر به دست می‌آید [22]:

$$\sigma_{com}^z = \frac{\sigma_{int}(L+2t)[\sigma_f d^2 + \sigma_{int}[(d+2t)^2 - d^2]]}{\sigma_{int}L(d+2t)^2 + 2t[\sigma_f d^2 + \sigma_{int}[(d+2t)^2 - d^2]]} \quad (1)$$

رسانایی عرضی پرکننده مجتمع در راستای X (Y) از حل معادله لاپلاس برای پرکننده مجتمع [16] به صورت زیر به دست می‌آید [23]:

$$\sigma_{com}^x = \frac{\sigma_{int}}{L+2t} \left[L \frac{2\sigma_f d^2 + (\sigma_f + \sigma_{int})[(d+2t)^2 - d^2]}{2\sigma_{int}d^2 + (\sigma_f + \sigma_{int})[(d+2t)^2 - d^2]} + 2t \right] \quad (2)$$

برای به دست آوردن رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت فرض می‌کنیم که نانولوله‌های کربنی مجتمع به صورت تصادفی در ماتریس توزیع شده‌اند. میدان الکتریکی و جریان الکتریکی به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V \quad (3)$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (4)$$

با توجه به اینکه نانولوله‌های کربنی مجتمع در مکان‌های کاتوره‌ای و با جهت‌گیری کاتوره‌ای در داخل ماتریس توزیع شده‌اند، رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت در جهت‌های X ، Y و Z با یکدیگر برابر هستند. بنابراین، با استفاده از نظریه قطبش میانگین، رسانایی الکتریکی نانوکامپوزیت حاوی نانولوله‌های کربنی (σ_e) با میانگین‌گیری بر روی عنصر حجم نماینده به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\langle \vec{J} \rangle = \sigma_e \langle \vec{E} \rangle \quad (5)$$

وقتی یک میدان الکتریکی خارجی (\vec{E}_0) به نانوکامپوزیت اعمال می‌شود، در داخل نانولوله‌های مجتمع و ذره‌های پلیمر میدان الکتریکی و چگالی جریان الکتریکی ایجاد می‌گردد. با استفاده از توزیع این میدان‌ها و چگالی جریان الکتریکی رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت به دست می‌آید. میدان الکتریکی داخل نانولوله‌های مجتمع و ذره‌های پلیمر که بر روی همه جهت‌ها میانگین‌گیری شده به صورت زیر به دست می‌آیند [24]:

$$\vec{E}_{in,com} = \sum_{k=x,y,z} \frac{1}{1+B_{com,k}(\sigma_{com,k}-\sigma_{e,k})/\sigma_{e,k}} \vec{E}_0 \quad (6)$$

3- ارائه نتایج و بحث

در این قسمت، به منظور بررسی اثر پارامترهای هندسی و فیزیکی نانولوله‌های کربنی و ماتریس بر روی رفتار الکتریکی نانوکامپوزیت، منحنی نیمه‌لگاریتمی رسانایی کامپوزیت بر حسب درصد حجمی پرکننده مورد بحث و بررسی قرار گرفته‌است. از آنجا که باید پارامترهای مختلفی مورد بررسی قرار گیرد، در هر مرحله یک پارامتر را تغییر داده و بقیه را طبق جدول 1 ثابت در نظر می‌گیریم. این پارامترها بر اساس مقادیر معمول گزارش شده در مقالات مختلف تعیین شده‌است.

جدول 1 پارامترهای استفاده شده در مدل‌سازی

Table 1 Parameters used in modeling

$\sigma_m \left(\frac{S}{m}\right)$	$\sigma_f \left(\frac{S}{m}\right)$	$d(nm)$	$\lambda(e)$	M	$t(nm)$
10^{-12}	10^6	10	1	100	1

در ابتدا به بررسی اثرات پارامترهای کوانتومی λ و d_c بر روی شکل‌گیری شبکه رسانایی در نانوکامپوزیت‌های پلیمری رسانا در شکل 4 پرداخته شده‌است. رسانایی نانوکامپوزیت بر حسب درصد پرکننده به ازای λ های مختلف در شکل 4(الف-a) رسم شده‌است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، افزایش λ باعث کاهش رسانایی در ناحیه فلزی می‌شود. دلیل این مسئله این است که با توجه به قسمت تئوری (شکل 3)، افزایش λ به معنی افزایش انرژی لازم برای تونل‌زنی می‌باشد. در واقع با افزایش λ الکترون‌ها به انرژی بیشتری برای پرش بین ذرات پرکننده نیاز دارند و این مسئله باعث کاهش رسانایی ناحیه بین‌فازی می‌شود. در نتیجه، با کاهش رسانایی ناحیه بین‌فازی، رسانایی نهایی کامپوزیت معادل هم کاهش پیدا می‌کند. نکته دیگر اینکه، λ اثری بر روی آستانه پرکولاسیون (شکل 1) ندارد. به بیان دیگر با توجه به نواحی شرح داده شده در شکل 1، تغییرات λ باعث جابجایی ناحیه آستانه پرکولاسیون و در نتیجه درصد پرکولاسیون نشده‌است. با توجه به موارد فوق می‌توانیم نتیجه بگیریم که تغییرات λ باعث تغییر سطح رسانایی فقط در ناحیه فلزی شده و در نواحی پرکولاسیون و عایق اثر محسوسی ندارد.

در شکل 4(ب-b)، رسانایی نانوکامپوزیت بر حسب درصد پرکننده به ازای d_c های مختلف رسم شده‌است. افزایش d_c به معنی افزایش فاصله تونل‌زنی می‌باشد که باعث می‌شود الکترون‌ها به راحتی از بین ذرات منتقل نشوند. بنابراین همان‌طور که انتظار می‌رود، افزایش d_c باعث کاهش رسانایی نانوکامپوزیت در قسمت فلزی می‌شود. البته اگر این فاصله زیاد شود، باعث کاهش بسیار زیاد رسانایی می‌شود که ممکن است حتی در ناحیه فلزی هم کامپوزیت رسانایی کافی را نداشته باشد. اثر d_c در قسمت‌های پرکولیشن و عایق شبیه تغییرات λ می‌باشد و عملاً اثر قابل محسوسی بر این نواحی و در نتیجه آستانه پرکولاسیون ندارد. نتایج مشابهی از اثرات پارامترهای کوانتومی بر روی کامپوزیت‌های رسانا با پرکننده‌های نانو صفحه‌های گرافن تخت [18]، نانو صفحه‌های گرافن فیلت شده [16] و نانوذره‌های کروی کربن بلک [21] گزارش شده‌است که نتایج مقاله حاضر را تأیید می‌کند. در مقالات مختلفی به اثر بسیار مهم هندسه ذرات و ناحیه بین‌فازی در رسانایی و آستانه پرکولاسیون کامپوزیت‌های رسانا اشاره شده‌است. این اثرات در شکل 5 مورد بررسی قرار گرفته‌است. در شکل 5(الف-a) تغییرات رسانایی بر حسب افزایش پرکننده به ازای قطرهای 1-20 nm نانولوله کربنی رسم شده‌است.

$$B_{com}^Z = 1 - \frac{M}{(M^2-1)^{\frac{3}{2}}} \left[M(M^2-1)^{\frac{1}{2}} - \text{ArcCosh } M \right]. \quad (14)$$

با استفاده از رابطه (13) رسانایی نانوکامپوزیت را می‌توانیم محاسبه کنیم. برای مدل‌سازی فاز میانی به صورت زیر عمل می‌کنیم. در ساز و کار تونل‌زنی کوانتومی الکترونی، الکترون‌ها می‌توانند بین نانولوله‌های مختلف از منطقه بین فازی تونل بزنند و باعث رسانش تونل‌زنی و در نتیجه افزایش رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت شوند [18]. وقتی دو نانولوله کربنی در فاصله d_c از یکدیگر قرار دارند الکترون‌ها می‌توانند از سطح مقطع تماس S بین نانولوله‌ها تونل زنی کنند. در واقع این تونل زنی در ناحیه لایه‌های بین فازی که پوشش نانولوله‌های کربنی هستند رخ می‌دهد. بنابراین، مقاومت الکتریکی ناشی از تونل زنی بین این دو نانولوله کربنی به صورت زیر نوشته می‌شود [25]:

$$R_{int} = \frac{d_c \hbar^2}{Se^2(2m\lambda)^{1/2}} \exp\left(\frac{4\pi d_c}{\hbar}(2m\lambda)^{1/2}\right) \quad (15)$$

که m و e به ترتیب جرم و بار الکتریکی الکترون و \hbar ثابت پلانک است. λ و d_c به ترتیب انرژی سد تونل‌زنی و فاصله تونل‌زنی هستند. در ادامه رابطه (15) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$R_{int} = \frac{d_c}{\sigma_{int} S} \quad (16)$$

بنابراین، با استفاده از رابطه‌های (15) و (16) رسانایی ناحیه بین فازی که ناشی از تونل زنی الکترون‌ها می‌باشد، به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{int} = \frac{e^2(2m\lambda)^{1/2}}{\hbar^2} \exp\left(-\frac{4\pi d_c}{\hbar}(2m\lambda)^{1/2}\right) \quad (17)$$

در این مدل مقدار فاصله تونل‌زنی به صورت $d_c = 2t$ فرض شده است. در شکل 3، رسانایی لایه بین فازی بر حسب انرژی سد تونل زنی به ازای مقادیر مختلف فاصله تونل زنی رسم شده‌است. رسانایی لایه بین فازی به ازای مقادیر کم انرژی سد تونل زنی مقادیر بالاتری دارد و با افزایش انرژی سد تونل زنی مقدار آن کاهش می‌یابد. همچنین در شکل 3 دیده می‌شود که فاصله تونل زنی هم تأثیر بزرگی بر روی رسانایی لایه بین‌فازی دارد در مقادیر کم فاصله تونل‌زنی، رسانندگی مقادیر زیادی دارد اما با افزایش فاصله تونل‌زنی، رسانایی کاهش می‌یابد. فلوجارت حل مسئله در (ب-b) 2 نشان داده شده است.

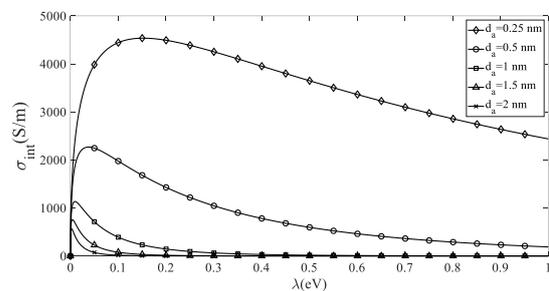


Fig. 3 (top) representative volume element (RVE) of a polymer nanocomposite containing carbon nanotubes, (bottom) composite filler containing a cylindrical carbon nanotube of diameter d and length L covered with an interfacial layer of thickness t .

شکل 3 رسانایی لایه بین‌فازی بر حسب تغییرات انرژی سد تونل‌زنی (λ) به ازای مقادیر مختلف فاصله تونل‌زنی (d_c).

خواص رسانایی کلی نانوکامپوزیت را افزایش دهند. نتایج مشابهی در منابع گزارش شده است که افزایش نسبت طول در ذرات رسانا با هندسه‌های مختلف صفحه‌ای و میله‌ای باعث بهبود فوق‌العاده خواص رسانایی کامپوزیت‌های پلیمری رسانا شده‌است [10].

در شکل 5 (ج-ج)، رسانایی نانوکامپوزیت بر حسب درصد پرکننده به ازای ضخامت ناحیه بین فازی مختلف رسم شده‌است. همان‌طور که از شکل 5 (ج-ج) مشهود می‌باشد، افزایش ضخامت ناحیه بین فازی از 1 nm تا 10 nm باعث کاهش آستانه پرکولاسیون از حدود 0.0045 تا 0.0005 و افزایش رسانایی در نواحی عایق و پرکولاسیون شده‌است. دلیل این مسئله می‌تواند افزایش حجم ناحیه بین فازی به دلیل افزایش ضخامت این ناحیه باشد. بنابراین از آنجا که رسانایی ناحیه بین فازی از ماتریس بیشتر می‌باشد، افزایش این حجم به معنی افزایش کلی رسانایی می‌باشد. نکته دیگر اینکه با توجه به عدم تغییرات رسانایی در ناحیه فلزی می‌توان نتیجه گرفته که ضخامت ناحیه بین‌فازی اثر محسوسی در رسانایی کامپوزیت بعد از رسانا شدن ندارد.

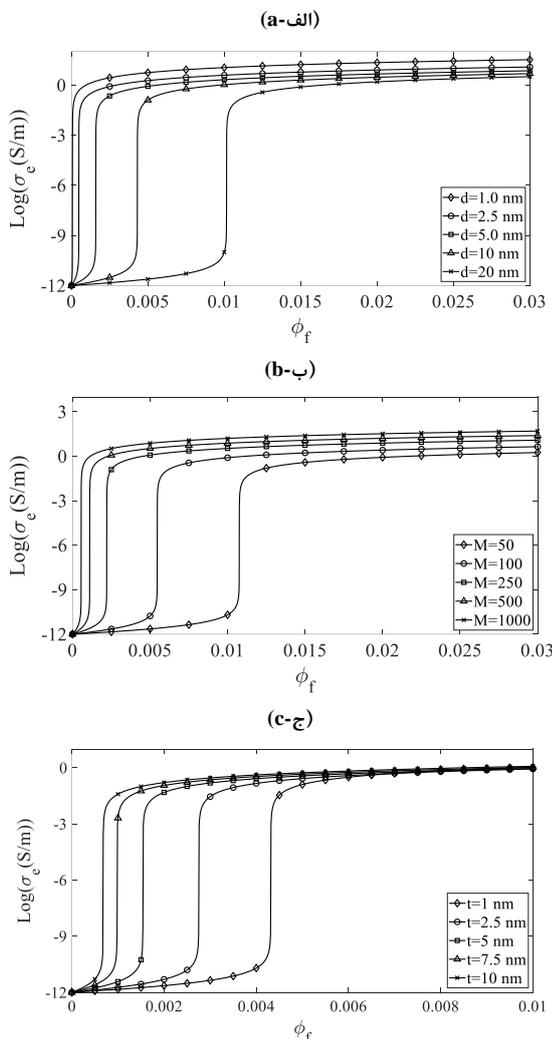


Fig. 5 Effective electrical conductivity of nanocomposite in terms of volume fraction of carbon nanotubes for different values of (a) nanofiller diameter (d), (b) aspect ratio (M), and interphase layer thickness (t).

شکل 5 رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت بر حسب کسر حجمی نانولوله‌های کربنی به ازای مقادیر مختلف (الف) قطر نانوذره‌ها (d), (ب) نسبت اندازه (M) و (ج) ضخامت لایه بین فازی (t).

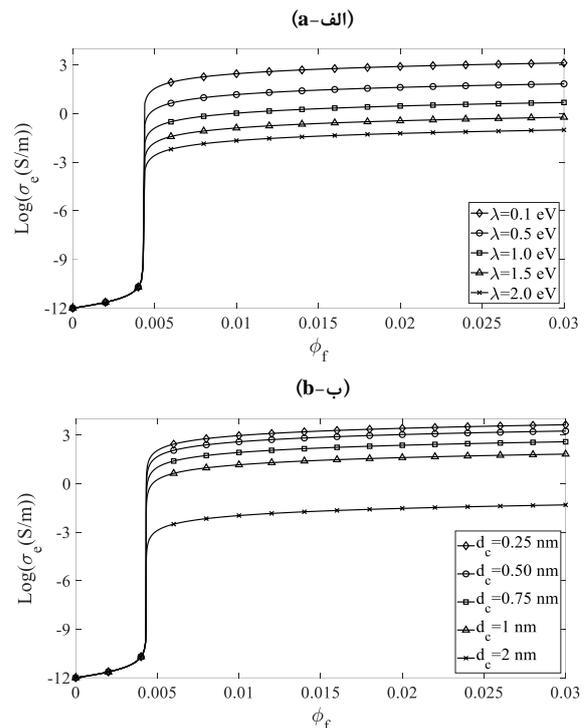


Fig. 4 (a) Effective electrical conductivity of nanocomposite in terms of volume fraction of carbon nanotubes for different values of tunneling barrier energy (λ) and (b) Effective electrical conductivity of nanocomposite in terms of volume fraction of carbon nanotubes for different values of tunneling distance (d_c).

شکل 4 رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت بر حسب کسر حجمی نانولوله‌های کربنی به ازای مقادیر مختلف انرژی سد تونل زنی (λ) و (ب) رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت بر حسب کسر حجمی نانولوله‌های کربنی به ازای مقادیر مختلف فاصله تونل زنی (d_c).

همان‌طور که در شکل 5 (الف-ا) مشاهده می‌شود، کاهش قطر نانولوله دو اثر بسیار مهم بر روی خواص الکتریکی نانوکامپوزیت رسانا گذاشته‌است. اولین اثر افزایش قابل توجه رسانایی نانوکامپوزیت در هر سه ناحیه عایق، پرکولاسیون و فلزی می‌باشد. اثر دوم کاهش بسیار زیاد آستانه پرکولاسیون به دلیل کاهش قطر نانولوله می‌باشد که از نظر طراحی اهمیت بسیار زیادی دارد. دلیل این مسئله می‌تواند افزایش تعداد نانولوله‌ها (پرکننده‌های میله‌ای شکل) با کاهش قطر آن‌ها در یک درصد پرکننده ثابت باشد که باعث افزایش احتمال برخورد ذرات به یکدیگر و در نتیجه تشکیل شبکه سه بعدی رسانایی در داخل ماتریس باشد که در منابع نیز به آن اشاره شده است [10]. در شکل 5 (الف-ا) دیده می‌شود که با کاهش قطر از 20 nm به 1 nm، آستانه رسانایی از 0.010 به 7×10^{-5} کاهش پیدا کرده است. پارامتر مؤثر دیگر هندسی طول نانولوله می‌باشد که برای این منظور، قطر نانولوله $d = 10$ nm در نظر گرفته و نسبت طول از 50 تا 1000 افزایش داده و نتایج به صورت تغییرات رسانایی در درصدهای مختلف پرکننده در شکل 5 (ب-ب) نشان داده شده است.

همان‌طور که مشاهده می‌شود، افزایش طول اثری مشابه کاهش قطر (شکل 5 (الف-ا)) داشته است. در واقع با افزایش نسبت طول نانولوله از 50 به 1000، رسانایی کامپوزیت بیش از 200 برابر که مقدار چشمگیری می‌باشد، افزایش یافته است و هم‌زمان آستانه پرکولاسیون را از 0.01 به 6×10^{-4} کاهش داده است. در واقع با افزایش طول پرکننده‌ها، احتمال برخورد آن‌ها افزایش یافته و در نتیجه الکترون‌ها راحت‌تر می‌توانند بین ذرات رسانا حرکت کرده و در نتیجه

به منظور بررسی توانایی و صحت‌سنجی مدل ارائه شده برای پیش‌بینی رفتار رسانایی کامپوزیت‌های پلیمری، از نتایج تجربی چهار نانوکامپوزیت حاوی نانولوله‌های کربنی با ماتریس‌های پلیمری PVDF [26]، TPU [27]، PC, ABS [28] و UHMWPE [29] استفاده شده‌است. به منظور برآزش مدل بر روی نتایج تجربی، پارامترهای فیزیکی از قبیل رسانایی ماتریس، رسانایی نانولوله‌های کربنی، قطر و طول نانولوله‌های کربنی از منابع مربوطه استخراج شده و فاصله تونل‌زنی و ضخامت لایه بین‌فازی به عنوان پارامترهای متغیر استفاده شده‌است. ضرایب مورد استفاده در مدل حاضر و داده‌های اندازه‌گیری شده برای رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت‌های در جدول 2 نشان داده شده و پیش‌بینی مدل از نتایج تجربی در شکل 7 دیده می‌شود. همان‌طور که در شکل 7 مشاهده می‌شود، مدل حاضر به خوبی رفتار کامپوزیت‌های حاوی نانولوله‌های کربنی به نام‌های CNT/PVDF [26]، CNT/TPU [27]، CNT/PC, ABS [28] و CNT/UHMWPE [29] را در هر سه ناحیه عایق، ناحیه پرکولاسیون و ناحیه فلزی پیش‌بینی کرده‌است. مدل پیشنهادی رفتار رسانایی نانوکامپوزیت‌ها در ناحیه عایق و گذار پرکولاسیون را به خوبی بازتولید کرده‌است و شکستگی ندارد. در جدول 2 رسانایی ماتریس‌های پلیمر PVDF [26]، TPU [27]، PC, ABS [28] و UHMWPE [29] برابر 10^{-13} S/M و رسانایی نانولوله‌های کربنی برابر 10^6 S/M است که اختلاف آن‌ها برابر 19 مرتبه بزرگی است و این اختلاف زیاد بین مقادیر پارامترها منجر به ایجاد خطاهای بزرگ در انجام محاسبات می‌شود. علی‌رغم این اختلاف زیاد در مقادیر پارامترها، با استفاده از این مدل فیزیکی و روش‌های محاسبات عددی، رفتار رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت در قسمت عایق و در محدوده پرکولاسیون به صورت S شکل با منحنی پیوسته بازتولید شد. همچنین ضخامت ناحیه بین‌فازی و فاصله تونل‌زنی هرکدام به ترتیب در رنج 3-5 nm و 0.9-1.3 nm بدست آمده‌است که با نتایج تجربی تطابق خوبی دارد.

4- نتیجه‌گیری

مدل ارائه شده به خوبی رفتار رسانایی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله کربنی را پیش‌بینی کرده‌است. این مدل نشان می‌دهد که با افزایش طول یا کاهش قطر نانولوله، خواص رسانایی کامپوزیت بهبود می‌یابد. همچنین تغییر رسانایی ماتریس و پرکننده به ترتیب فقط ناحیه عایق و فلزی را تغییر می‌دهد و اثری بر روی سایر قسمت‌ها ندارد. در واقع رسانایی پرکننده و ماتریس آستانه رسانایی کامپوزیت را تغییر نمی‌دهد و این آستانه تنها به هندسه ذرات وابسته می‌باشد. کاهش قطر نانولوله‌های کربنی از 20 nm به 1 nm یا متناسب با آن افزایش نسبت اندازه نانولوله‌های کربنی از 50 تا 1000 منجر به کاهش آغاز پرکولاسیون نانوکامپوزیت از 0.01 به حدود 1×10^{-5} می‌شود. نتایج این مدل به خوبی رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت‌های حاوی نانولوله‌های کربنی با ماتریس‌های مختلف را پیش‌بینی می‌کند. نتایج مدل، آغاز پرکولاسیون تیز را برای نمونه‌های آزمایشگاهی به خوبی پیش‌بینی می‌کند و علاوه بر آن رسانایی الکتریکی مؤثر را در کسرهای حجمی بزرگ رفتار فلزی دارند را بازتولید می‌کند. مهم‌ترین دست‌آورد این مقاله این است که رفتار رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت در ناحیه عایق به صورت منحنی پیوسته و نرم بازتولید می‌شود و مقادیر رسانایی بسیار کم نانوکامپوزیت در ناحیه عایق را پیش‌بینی می‌کند. این مدل شامل تعداد زیادی از پارامترهای فیزیکی و هندسی تأثیرگذار است و از این مدل می‌توان برای طراحی نانوکامپوزیت‌های مورد نظر با ویژگی‌های مشخص استفاده کرد.

در شکل 6 اثرات رسانایی پرکننده و ماتریس بر روی خواص الکتریکی کامپوزیت‌های رسانا مورد بررسی قرار گرفته‌است. هر چند اکثر پلیمرها که به عنوان ماتریس استفاده می‌شوند، عایق محسوب می‌شوند اما رسانایی‌های آن‌ها با هم متفاوت است. برای بررسی این مسئله رسانایی زمینه را از 10^{-6} تا 10^{-14} مقدار تغییر داده و رسانایی کامپوزیت بر حسب درصد حجمی پرکننده به ازای ماتریس‌های مختلف در شکل 6 (ج-ب) رسم شده‌است. همان‌طور که کاملاً مشهود می‌باشد، افزایش رسانایی ماتریس فقط در ناحیه عایق باعث افزایش رسانایی کامپوزیت شده است و تأثیر محسوس در نواحی پرکولاسیون و فلزی ندارد. در واقع تغییر نوع پلیمر ماتریس، در درصد‌های بالاتر از آستانه پرکولاسیون، اثری بر روی رسانایی و آستانه پرکولاسیون ندارد. نکته دوم اینکه با افزایش رسانایی ماتریس، سطح رسانایی حالت عایق و فلزی به یکدیگر نزدیک شده‌است که از نظر فیزیکی قابل انتظار می‌باشد.

به منظور بررسی اثر رسانایی نانولوله بر روی خواص الکتریکی کامپوزیت، رسانایی پرکننده از 10^5 S/M تا 10^6 S/M تغییر داده شده‌است که در شکل 6 (ب) نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، افزایش رسانایی پرکننده در مقادیر پائین باعث افزایش رسانایی در ناحیه فلزی کامپوزیت شده است که البته برای مقادیر بالاتر رسانایی پرکننده به یک حالت اشباع رسیده (در بالاتر از 10^3) و تأثیر محسوس دیده نمی‌شود. نکته دوم اینکه تغییرات رسانایی پرکننده، اثر قابل مشاهده‌ای در نواحی عایق و پرکولاسیون ندارد و می‌توان نتیجه گرفت که آستانه پرکولاسیون مستقل از جنس پرکننده و ماتریس می‌باشد.

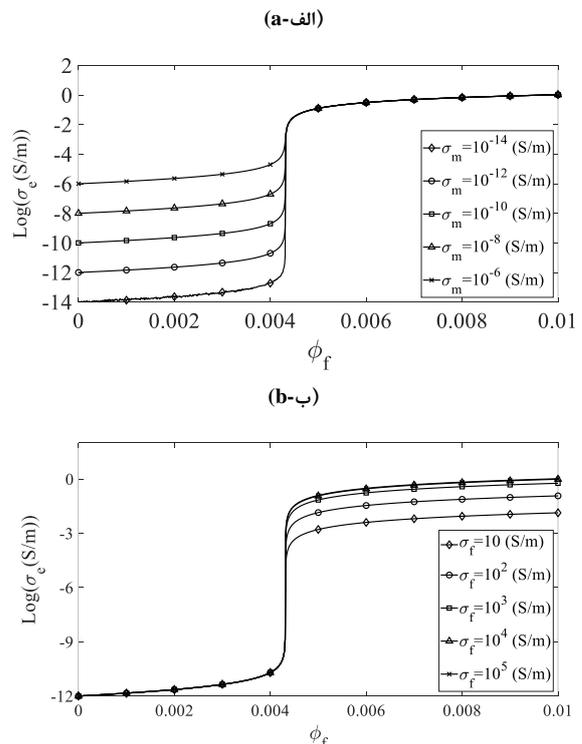


Fig. 6 Effective electrical conductivity of nanocomposite in terms of volume fraction of carbon nanotubes for different values of (a) nanofiller diameter (σ_m), and (b) aspect ratio (σ_f).

شکل 6 رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت بر حسب کسر حجمی نانولوله‌های کربنی به ازای مقادیر مختلف (الف) رسانایی ماتریس (σ_m) و (ب) رسانایی نانولوله‌های کربنی (σ_f).

"Piezoresistive performance characterization of strain sensitive multi-walled carbon nanotube-epoxy nanocomposites," *Sensors Actuators, A Phys.*, Vol. 254, No. 2017, pp. 61–68, 2017.

[9] Dietrich Stauffer, A.A., Dietrich Stauffer, Ammon Aharony - Introduction to percolation theory-CRC Press (1994).pdf, , pp. 192.

[10]Feng, C. and Jiang, L., "Micromechanics modeling of the electrical conductivity of carbon nanotube (CNT)-polymer nanocomposites," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, Vol. 47, No. 1, pp. 143–149, 2013.

[11]Tabatabaee, M., Taheri-Behrooz, F., Razavi, S.M., and Liaghat, G.H., "Electrical conductivity enhancement of Carbon/Epoxy composites using nanoparticles," *J. Sci. Technol. Compos.*, Vol. 5, No. 4, pp. 605–614, 2019.

[12]Mora, A., Han, F., and Lubineau, G., "Computational modeling of electrically conductive networks formed by graphene nanoplatelet-carbon nanotube hybrid particles," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 26, No. 3, 2018.

[13]Fang, C., Zhang, J., Chen, X., and Weng, G.J., "A Monte Carlo model with equipotential approximation and tunneling resistance for the electrical conductivity of carbon nanotube polymer composites," *Carbon N. Y.*, Vol. 146, pp. 125–138, 2019.

[14]Lu, X., Yvonnet, J., Detrez, F., and Bai, J., "Multiscale modeling of nonlinear electric conductivity in graphene-reinforced nanocomposites taking into account tunnelling effect," *J. Comput. Phys.*, Vol. 337, pp. 116–131, 2017.

[15]Taherian, R., "Experimental and analytical model for the electrical conductivity of polymer-based nanocomposites," *Compos. Sci. Technol.*, Vol. 123, pp. 17–31, 2016.

[16]Mazaheri, M., Payandehpeyman, J., and Khamehchi, M., "A developed theoretical model for effective electrical conductivity and percolation behavior of polymer-graphene nanocomposites with various exfoliated filleted nanoplatelets," *Carbon N. Y.*, Vol. 169, pp. 264–275, 2020.

[17]García-Macías, E., D'Alessandro, A., Castro-Triguero, R., Pérez-Mira, D., and Ubertini, F., "Micromechanics modeling of the electrical conductivity of carbon nanotube cement-matrix composites," *Compos. Part B Eng.*, Vol. 108, pp. 451–469, 2017.

[18]Payandehpeyman, J., Mazaheri, M., and Khamehchi, M., "Prediction of electrical conductivity of polymer-graphene nanocomposites by developing an analytical model considering interphase, tunneling and geometry effects," *Compos. Commun.*, Vol. 21, No. March, pp. 100364, 2020.

[19]Payandehpeyman, J. and Mazaheri, M., "Parametric investigation of effective elastic properties of exfoliated polymer/clay nanocomposites using a developed mean-field model," *Mech. Adv. Mater. Struct.*, Vol. 0, No. 0, pp. 1–12, 2021.

[20]Farhadpour, M., Jahanaray, B., Pircheraghi, G., and Bagheri, R., "Simultaneous use of physical and chemical dispersants for electrical conductivity enhancement in polyamide 6/carbon nanotube/conductive carbon black hybrid nanocomposites," *Polym. Technol. Mater.*, Vol. 00, No. 00, pp. 1–13, 2021.

[21]Mazaheri, M., Payandehpeyman, J., and Jamasb, S., "Modeling of Effective Electrical Conductivity and Percolation Behavior in Conductive-Polymer Nanocomposites Reinforced with Spherical Carbon Black," *Appl. Compos. Mater.*, No. 0123456789, 2021.

[22]Yan, K.Y., Xue, Q.Z., Zheng, Q.B., and Hao, L.Z., "The interface effect of the effective electrical conductivity of carbon nanotube composites," *Nanotechnology*, Vol. 18, pp. 6, 2007.

[23]Xue, Q., "The influence of particle shape and size on electric conductivity of metal-polymer composites," *Eur. Polym. J.*, Vol. 40, No. 2, pp. 323–327, 2004.

[24]J. Griffiths, D., "Introduction to Electrodynamics David J. Griffiths Fourth Edition," ISBN 9788578110796, 2013.

[25]Simmons, J.G., "Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film," *J.*

جدول 2 داده‌های تجربی مربوط به پارامترهای سیستم که از مقاله‌ها استخراج شده‌اند. از این داده‌های تجربی برای برازش مدل استفاده شده است.

Table 2 Experimental data related to system parameters that are extracted from articles. These experimental data have been used to fit the model.

نانوکامپوزیت و مرجع	σ_m ($\frac{S}{M}$)	σ_f ($\frac{S}{m}$)	d (nm)	dc (nm)	L (nm)	t (nm)
CNT/PVDF [26]	10^{-13}	10^6	9.5	0.9	1500	3
CNT/TPU [27]	10^{-12}	10^6	9.5	1.1	1500	5
CNT/PC,ABS [28]	2×10^{-12}	10^6	9.5	1.2	1500	3
CNT/UHMWPE [29]	10^{-13}	10^6	30	1.3	90000	3

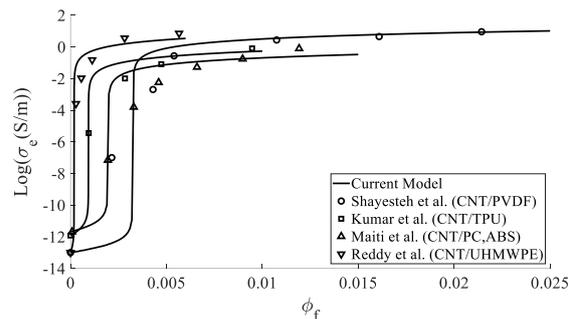


Fig. 7 Modeling results and measured data of effective electrical conductivity of nanocomposites in terms of volume fraction of carbon nanotubes based on laboratory results for CNT/PVDF [26], CNT/TPU [27], CNT/PC, ABS [28], and CNT/UHMWPE [29].

شکل 7 نتایج مدل‌سازی و داده‌های اندازه‌گیری شده رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت‌ها بر حسب کسر حجمی نانولوله‌های کربنی بر اساس نتایج آزمایشگاهی برای نانوکامپوزیت‌های [26] CNT/PVDF، [27] CNT/TPU، [28] CNT/PC,ABS و [29] CNT/UHMWPE

7- مراجع

[1] Payandehpeyman, J., Parvini, N., Moradi, K., and Hashemian, N., "Detection of SARS-CoV-2 Using Antibody-Antigen Interactions with Graphene-Based Nanomechanical Resonator Sensors," *ACS Appl. Nano Mater.*, Vol. 4, No. 6, pp. 6189–6200, 2021.

[2] Payandehpeyman, javad, Majzoobi, G., and Bagheri, R., "Deriving Parameters of Pressure-Dependent Yield Surface for Polymeric Composites Using Kriging-based Optimization Method," *Modares Mech. Eng.*, Vol. Inpress, 2015.

[3] Malek-mohammadi, H., Majzoobi, G., and Payandehpeyman, J., "Experimental and analytical study of the compression behavior of graphene oxide and nano-clay reinforced polycarbonate nanocomposites at low strain rates," Vol. 6, No. 3, pp. 427–434, 2019.

[4] Shokrieh, M.M. and Zeinedini, A., "Effect of CNTs debonding on mode I fracture toughness of polymeric nanocomposites," *JMADE*, Vol. 101, pp. 56–65, 2016.

[5] Zeinedini, A., Shokrieh, M.M., and Ebrahimi, A., "The effect of agglomeration on the fracture toughness of CNTs-reinforced nanocomposites," *Theor. Appl. Fract. Mech.*, Vol. 94, No. January, pp. 84–94, 2018.

[6] Wernik, J.M. and Meguid, S.A., "Recent developments in multifunctional nanocomposites using carbon nanotubes," *Appl. Mech. Rev.*, Vol. 63, No. 5, pp. 1–40, 2010.

[7] Verma, P., Saini, P., Malik, R.S., and Choudhary, V., "Excellent electromagnetic interference shielding and mechanical properties of high loading carbon-nanotubes/polymer composites designed using melt recirculation equipped twin-screw extruder," *Carbon N. Y.*, Vol. 89, pp. 308–317, 2015.

[8] Sanli, A., Benchirouf, A., Müller, C., and Kanoun, O.,

Appl. Phys. , Vol. 34, No. 6, pp. 1793–1803, 1963.

- [26]Shayesteh Zeraati, A. and Sundararaj, U., “Carbon nanotube/ZnO nanowire/polyvinylidene fluoride hybrid nanocomposites for enhanced electromagnetic interference shielding,” *Can. J. Chem. Eng.* , Vol. 98, No. 5, pp. 1036–1046, 2020.
- [27]Kumar, S., Gupta, T.K., and Varadarajan, K.M., “Strong, stretchable and ultrasensitive MWCNT/TPU nanocomposites for piezoresistive strain sensing,” *Compos. Part B Eng.* , Vol. 177, pp. 107285, 2019.
- [28]Maiti, S., Suin, S., Shrivastava, N.K., and Khatua, B.B., “Low percolation threshold in melt-blended PC/MWCNT nanocomposites in the presence of styrene acrylonitrile (SAN) copolymer: Preparation and characterizations,” *Synth. Met.* , Vol. 165, No. 1, pp. 40–50, 2013.
- [29]Reddy, S.K., Kumar, S., Varadarajan, K.M., Marpu, P.R., Gupta, T.K., and Choosri, M., “Strain and damage-sensing performance of biocompatible smart CNT/UHMWPE nanocomposites,” *Mater. Sci. Eng. C* , Vol. 92, No. June, pp. 957–968, 2018.