



تعیین آستانه گذر الکتریکی دزیمر مبتنی بر نانوکامپوزیت پلی استایرن-نانولوله کربنی چند

دیواره: مقایسه تجربی و شبیه‌سازی

آرمین مسیبی*، شهریار ملکی، فرهود ضیائی

پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها

چکیده

نانوساختارهای کربنی با افزوده شدن در بستر پلیمری، ضمن ارتقای خواص الکتریکی، مکانیکی و اپتیکی نانوکامپوزیت، دارای کاربردهای فراوانی در صنعت، پزشکی و کشاورزی هستند. نویسندگان حاضر، پژوهشهای متعددی بر نوع جدیدی از دزیمرهای تابشی گاما مبتنی بر ماده نانوکامپوزیت پلیمر-نانو ساختارهای کربنی ارائه نموده‌اند. در این تحقیق، در ابتدا آستانه گذر الکتریکی نانوکامپوزیت پلی استایرن-نانولوله کربنی چند دیواره (PS/MWCNT) در کسرهای وزنی مختلف به روش المان محدود شبیه سازی و سپس، در مرحله تجربی، نانوکامپوزیتهای مختلف در درصدهای وزنی مختلف شامل ۰٫۰۳، ۰٫۰۵، ۰٫۱۵، ۰٫۲ و ۰٫۲۹ به روش ترکیب محلولی ساخته شد. در ادامه هدایت الکتریکی این نمونه‌ها در دمای اتاق اندازه‌گیری شد. در نهایت آستانه گذر الکتریکی نانوکامپوزیت‌های مذکور با استفاده از نتایج شبیه سازی المان محدود و تجربی با یکدیگر مقایسه گردید که مقدار آن در حالت شبیه‌سازی برابر ۰٫۲۸ درصد وزنی و مقدار آن در حالت تجربی برابر ۰٫۱ درصد وزنی برآورد گردید. نتایج این پژوهش نشان داد که روش ترکیب محلولی باعث پخش بهتر نانولوله های کربنی در بستر پلیمر می‌باشد که این عامل باعث می‌شود نانوکامپوزیت در درصدهای وزنی پایین‌تری به آستانه گذر الکتریکی برسد.

کلمات کلیدی: نانوکامپوزیت، پلی استایرن، نانو ساختارهای کربنی، آستانه گذر الکتریکی، هدایت الکتریکی

مقدمه

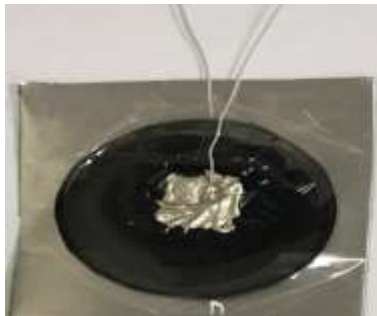
آشکارسازی و دزیمری تابشهای یونساز یک موضوع بسیار مهم در صنعت هسته‌ای محسوب می‌شود [۱]. از آنجایی که با افزودن فاز سخت نظیر نانوساختارهای کربنی به بستر پلیمری، خواص فیزیکی و الکتریکی نانوکامپوزیتها افزایش زیادی پیدا کرده و با توجه به کاربردهای فراوان نانوکامپوزیت‌ها در زمینه‌های مختلفی از قبیل سلول های خورشیدی، دستگاه‌های آنتی استاتیک، حفاظ سازی امواج الکترومغناطیس و تابشهای یونساز، سنسورهای پیزوالکتریک، سنسورهای تابشی و دزیمری، موجب شده تا توجه بسیاری از پژوهشگران را در این زمینه به خود معطوف نماید [۱]. نانوکامپوزیت‌های پلیمری به خاطر سبکی، دارا بودن چگالی معادل بافت بدن، سهولت در فرآوری و هزینه نسبتاً پایین، قابلیت بهره‌گیری در سیستمهای آشکارسازی و دزیمری را دارا هستند. مواد نانو ساختار کربنی نظیر نانو لوله های کربنی به خاطر نسبت طول به قطر بالا، پس از ترکیب با پلیمرها در کسر وزنی خاصی موسوم به آستانه گذر الکتریکی (EPT)، از طریق تشکیل نانوکامپوزیت پلیمر-نانو لوله کربن، منجر به افزایش چند

*Electrical Percolation Threshold

مرتب‌ه‌ای رسانندگی الکتریکی پلیمرها می‌شوند. فرآیند رسانش الکترون در نانوکامپوزیت پلیمر-نانو لوله کربن اصولاً از سه طریق صورت می‌گیرد: رسانش ذاتی نانو لوله های کربن، انتقال از طریق تماس مستقیم نانو لوله های کربن با یکدیگر، رسانندگی از طریق تونل زنی یا ترابرد جهشی آلترونها بین نانو لوله های کربنی که به اندازه کافی به هم نزدیکند [۱]. نویسندگان در پژوهشهای پیشین، اثر پرتو گاما بر خواص الکتریکی دزیمتر مبتنی بر ماده نانوکامپوزیت پلیمر-نانوساختار کربنی را بررسی نمودند [۲-۱۴]. در این پژوهش، ابتدا با استفاده از نرم افزار کامسول به محاسبه آستانه گذر الکتریکی (EPT) نانوکامپوزیت PS/MWCNT پرداخته می‌شود، سپس در فاز تجربی با بهره‌گیری از روش ترکیب محلولی به ساخت نانوکامپوزیتهای مذکور خواهیم پرداخت. در نهایت اعتبارسنجی روش المان محدود در پیش‌بینی مقدار آستانه گذر نانوکامپوزیت پلی استایرن-نانولوله کربنی با نتایج تجربی مورد بررسی و مقایسه قرار خواهد گرفت.

مواد و روشها

در ابتدا PS با گرید ۱۵۴۰ و چگالی 1.05 g/cm^3 از پتروشیمی تبریز به صورت گرانول تهیه شد. سپس MWCNT با درصد خلوص بیش از ۹۸٪ از شرکت US-Nano خریداری شده، تولوئن و دی کلرومتان به عنوان حلالهای مناسب برای پلی استایرن و پخش کننده خوب برای نانو لوله کربن از شرکت Merck آلمان تهیه شد و همچنین به منظور ساخت الکتروود روی فیلم نازک، چسب نقره از شرکت امریکایی Chemtronics تهیه شد. در ابتدا نانولوله کربنی چند دیواره در حلال دی کلرومتان پخش شده و سپس با دستگاه همزن اولتراسونیک UP200H به مدت دو ساعت فراصوت دهی شد. همزمان در ظرف دیگری پلی استایرن به مدت ۳۰ دقیقه در حلال تولوئن، به کمک همزن مغناطیسی همزده شد، تا اینکه کاملاً با حلال ترکیب گردید. در نهایت این دو ظرف با یکدیگر مخلوط شده، درون پتری دیش ریخته شد، سپس در قالب‌های سیلیکونی به مدت دو ساعت قرار گرفت تا حلال کاملاً خارج شده، پس از آن نمونه‌های نهایی مطابق شکل ۱ ساخته شدند که به منظور اندازه‌گیری هدایت الکتریکی نمونه‌های مذکور توسط اهم‌متر از چسب نقره به عنوان الکتروود روی سطوح نمونه‌ها استفاده شد.



شکل ۱: نمایی از نانوکامپوزیت PS/MWCNT ساخته شده به روش محلولی.

^۱Quantum Tunneling

^۲Hopping

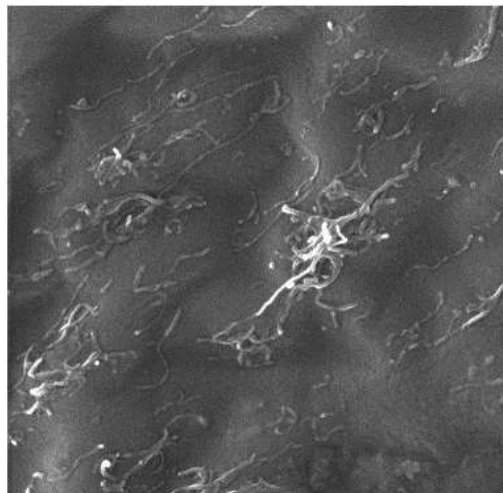
نتایج

به منظور شبیه سازی خواص الکتریکی نانوکامپوزیت PS/MWCNT از نرم افزار COMSOL بر مبنای روش المان محدود بهره گیری شد. با استناد به ابعاد نانولوله های کربنی چند جداره مطابق آنالیز SEM، در ابتدا در نرم افزار Matlab برنامه ای برای تولید اعداد تصادفی مربوط به نحوه توزیع نانولوله های کربنی در بستر پلیمر نوشته شد. شایان ذکر است که در توزیع نانولوله های کربنی از رهیافت حجم مستثنی بهره گیری شد. همچنین از نظریه محیط مؤثر (EMT) به منظور حل مسأله در مقیاس میکرو و تعمیم آن به ابعاد بزرگتر استفاده گردید. در ادامه اعداد تصادفی تولید شده به نرم افزار کامسول وارد شد و خواص دو ماده PS و MWCNT مطابق جدول ۱ در نظر گرفته شد.

جدول ۱- خواص فیزیکی مواد مورد استفاده در شبیه سازی.

ماده	ϵ_r	σ (S/m)	ρ (g/cm ³)
MWCNT	۲۰۰	1×10^4	۲٫۱
PS	۲٫۶	1×10^{-16}	۱٫۰۵

در مرحله تجربی نانوکامپوزیتهای مختلف در درصدهای وزن ۰٫۳، ۰٫۰۵، ۰٫۱۵، ۰٫۲ و ۰٫۲۹ به روش ترکیب محلولی ساخته شد. به منظور اطمینان از پخش مناسب و یکنواخت نانولوله های کربن در بستر پلیمری، از آزمون^۶ SEM بهره گیری گردید (شکل ۲). چنانچه ملاحظه می شود نانولوله های کربن در بستر پلیمر به خوبی پراکنده شده . شکل مذکور یکنواختی را نشان می - دهند.



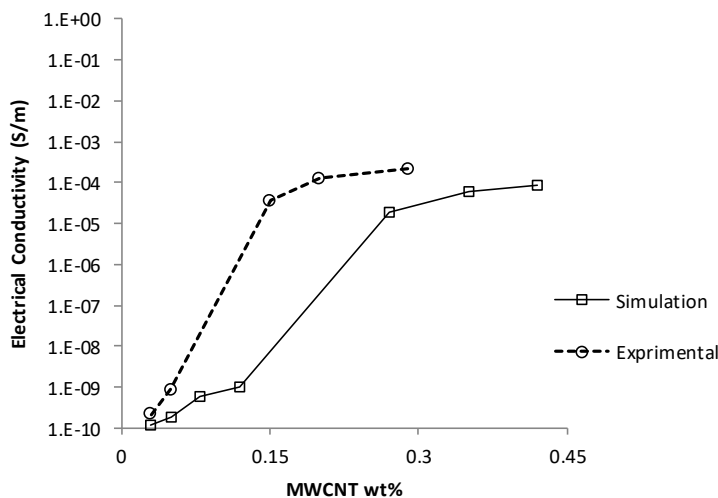
^۴Excluded Volume Approach

^۵Effective Medium Theory

^۶ Scanning Electron Microscope

شکل ۲: تصویر SEM از نانوکامپوزیت PS/MWCNT

شکل ۳، هدایت الکتریکی نمونه های نانوکامپوزیتی به دو روش تجربی و شبیه سازی را به تصویر کشیده است. همانطوری که از شکل پیداست، مقدار آستانه گذر الکتریکی در حالت شبیه سازی برابر ۰/۲۸ درصد وزنی و در حالت تجربی برابر ۰/۱۰ درصد وزنی بدست آمده است.



شکل ۳: هدایت الکتریکی نمونه های نانوکامپوزیتی PS/MWCNT به دو روش تجربی و شبیه سازی.

یکی از مهم ترین دلایل اختلاف بین نتایج تجربی و شبیه سازی در نحوه ی ساخت نانوکامپوزیت ها در مرحله تجربی می باشد. در مرحله تجربی از روش ترکیب محلولی استفاده شده است. روش ترکیب محلولی به این صورت است که پس از حل شدن کامل پلیمر در داخل حلال تولوئن و بالا رفتن ویسکوزیته برای ساخت نانوکامپوزیت با درصد وزنی معین مقداری از حلال مادر (مخلوط نانولوله کربنی و حلال دی کلرومتان) را داخل محلول (پلیمر و تولوئن) اضافه می گردد. با توجه به اختلاف نقطه جوش دو حلال دی کلرو متان (نقطه جوش $39/6^{\circ}\text{C}$) و تولوئن (نقطه جوش 111°C) مشاهده شد که هنگام اضافه شدن حلال مادر در دمای 95°C دی کلرومتان داخل حلال مادر شروع به بخار شدن کرده که باعث ایجاد کاواک ها یا حباب هایی در محلول ترکیبی شده و این عمل باعث شکستن کلوخه های نانو لوله های کربنی و در نهایت پخش بهتر و یکنواخت تر این ذرات درون بستر پلیمری می گردد. این روش ترکیب محلولی باعث می شود که نمونه نانوکامپوزیت در مرحله تجربی در درصد وزنی پایین تری نسبت به مرحله شبیه سازی به آستانه گذر الکتریکی برسد.

بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش، ابتدا با استفاده از روش المان محدود، آستانه گذر الکتریکی نانوکامپوزیت پلی استایرن- نانولوله کربنی چند دیواره (PS/MWCNT) به عنوان یک دزیمتر برخط قابل استفاده در ناحیه تراپی در کسرهای وزنی مختلف محاسبه گردید. در



ادامه به صورت تجربی آستانه گذر الکتریکی نانوکامپوزیت مذکور به روش ترکیب محلولی در دمای اتاق اندازه‌گیری و با مقدار شبیه‌سازی مقایسه گردید. مقدار آستانه گذر الکتریکی برای نانوکامپوزیت PS/MWCNT در فاز شبیه‌سازی برابر ۰/۲۸ درصد وزنی و در فاز تجربی ۰/۱ درصد وزنی بدست آمده است. نشان داده شد که روش ترکیب محلولی باعث پخش بهتر نانولوله‌های کربنی در بستر پلیمر می‌باشد که این عامل باعث کاهش مقدار درصد وزنی نانوکامپوزیت در رسیدن به آستانه گذر الکتریکی می‌باشد.

مراجع

- [1] W.S. Bao, S.A. Meguid, Z.H. Zhu, Y. Pan, G.J. Wengc, A novel approach to predict the electrical conductivity of multifunctional nanocomposites, *Mechanics of Materials*, 46 (2012) 129-138.
- [2] A. Mosayebi, S. Malekie, F. Ziaie, Effect of added guard electrode on electric field uniformity of a real-time dosimeter based on polymer-nanotube nanocomposite using finite element method, in: E. Tel, I.H. Sarpun, H. Ozdogan, M. Sekerci (Eds.) 5th International Conference on Theoretical and Experimental Studies in Nuclear Applications and Technology (TESNAT), Amasya University, Amasya, Turkey, 2019, pp. 264-266.
- [3] A. Mosayebi, F. Ziaie, S. Malekie, A. Rahimi, Fabrication of low electrical percolation threshold Polystyrene/Multi-Walled Carbon Nanotube nanocomposites via a mixed solution method with dosimetry purposes, in: E. Tel, I.H. Sarpun, H. Ozdogan, M. Sekerci (Eds.) 5th International Conference on Theoretical and Experimental Studies in Nuclear Applications and Technology (TESNAT), Amasya University, Amasya, Turkey, 2019, pp. 258-263.
- [4] S. Malekie, F. Ziaie, S. Feizi, A. Esmaeli, Dosimetry characteristics of HDPE-SWCNT nanocomposite for real time application, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 833 (2016) 127-133.
- [5] S. Malekie, F. Ziaie, A. Esmaeli, Study on dosimetry characteristics of polymer-CNT nanocomposites: Effect of polymer matrix, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 816 (2016) 101-105.
- [6] S. Malekie, F. Ziaie, A two-dimensional simulation to predict the electrical behavior of carbon nanotube/polymer composites, *polyeng*, 37 (2017) 205-210.
- [7] S. Malekie, F. Ziaie, Study on a novel dosimeter based on polyethylene-carbon nanotube composite, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 791 (2015) 1-5.
- [8] S. Malekie, B. Salehpour, Evaluation of gamma radiation response of electrolyte, MKP and MKT capacitors in various frequencies, *Radiochimica Acta*, 105 (2017) 577-581.
- [9] A. Mosayebi, S. Malekie, F. Ziaie, A feasibility study of polystyrene/CNT nano-composite as a dosimeter for diagnostic and therapeutic purposes, *Journal of Instrumentation*, 12 (2017) P05012.



- [10] F. Ziaie, S. Malekie, Study of electrical properties of a novel dosimeter based on polymer-carbon nanotube nano-composite, Iranian Journal of Radiation Safety and Measurement, 2 (2014) 17-20.
- [11] A. Mosayebi, S. Malekie, F. Ziaie, M. Ataei Naeini, Experimental investigation of dosimetry response of nanocomposite of polystyrene-multiwall carbon nanotube in gamma radiation field %J Iranian Journal of Radiation Safety and Measurement, 7 (2019) 21-26.
- [12] A. Mosayebi, S. Malekie, F. Ziaie, H. Daneshvar, Linearity response characterization of Polystyrene/ Graphene oxide nanocomposite as real-time dosimeter for therapeutic purposes, Iranian Journal of Medical Physics, 15 (2018) 391-391.
- [13] A. Mosayebi, S. Malekie, F. Ziaie, H. Daneshvar, Experimental evaluation of thermal stability of PS- MWCNT nanocomposite as a real-time dosimeter Iranian Journal of Medical Physics, 15 (2018) 14-14.
- [14] A. Mosayebi, S. Malekie, A. Rahimi, F. Ziaie, Experimental study on polystyrene-MWCNT nanocomposite as a radiation dosimeter, Radiation Physics and Chemistry, (2019) 108362.