

Kompozit Malzemelerin Ara Fazlarının DIGIMAT FE Modülü ile Modellenmesi ve Analizi

HAZIRLAYAN	ONAYLAYAN
DOĞUKAN KAYMAK <i>Aday Mühendis</i>	ERKİN BARIŞ GÜNGÖR <i>Kd. Yapısal Analiz Mühendisi</i>

Tarih: 29/05/2023

ARA FAZ

Malzeme içeriğine ve takviye miktarlarına bağlı olarak mekanik özelliklerinin özelleştirilebilmesi sayesinde kompozit malzemeler endüstride yaygın olarak kullanılmaktadır. Kompozitlerin performanslarını ve dayanıklılıklarını etkileyen önemli faktörlerden biri ara fazlardır. Ara fazlar takviye fazı ile matris arasındaki etkili yük transferini sağlar ve kompozitin mekanik performansını artırır. DIGIMAT, kompozit malzemelerin mekanik davranışlarının analiz edilmesini ve optimize edilmesini sağlayan gelişmiş bir simülasyon aracıdır. Kompozit malzemelerin daha iyi performans ve dayanıklılık sağlaması için ara faz tasarımı ve özellikleri DIGIMAT kullanılarak optimize edilebilir.

Bu yazıda, teorik olarak mekanik özellikleri elde edilen kompozit ara fazının DIGIMAT FE (Finite Element) modülü kullanılarak modellenmesi ve kompozitin dayanımına etkisini inceleme üzerine bir akış paylaşılacaktır.

ARA FAZ ÖZELLİKLERİNİN ELDE EDİLMESİ

Ara faz özelliklerini belirlemek için kullanılacak birkaç test vardır:

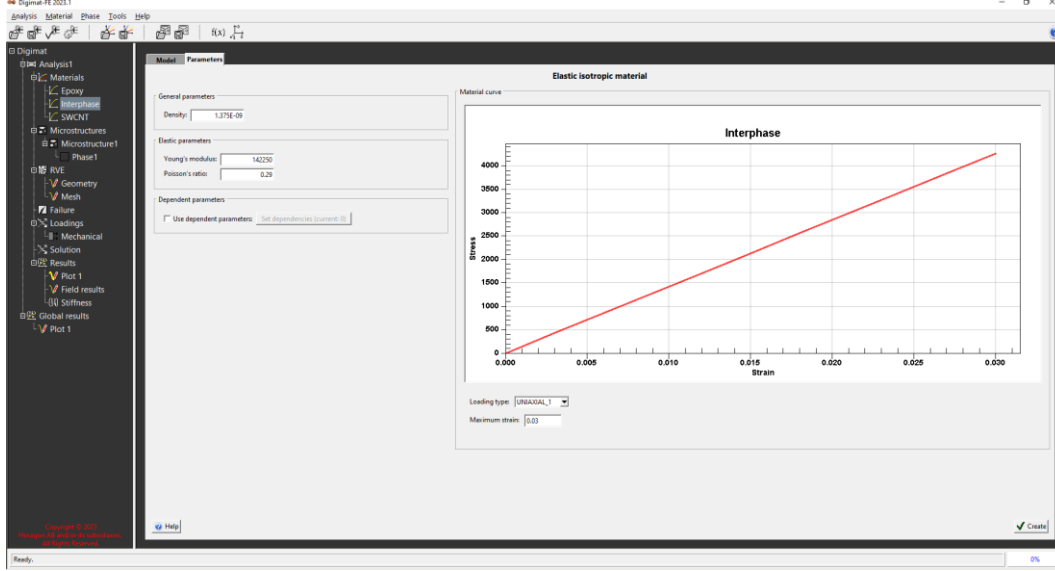
- Ara yüzey kayma mukavemeti (Interfacial Shear Strength, IFSS) testi:** Bu test, liflerin matristen ayrılması için gereken kayma gerilimini ölçer. IFSS, maksimum yükü lifin kesit alanına bölünmesiyle hesaplanır. Yüksek bir IFSS, güçlü bir ara faz göstergesidir.
- Mikro-girinti (Micro-Indentation):** Bu test, kompozit malzemenin yüzeyine keskin bir prob kullanarak çentik açma yolu ile yapılır. Çentik derinliği ölçülerek, ara yüzey kalınlığı ve elastisite modülü belirlenir.
- Atomik kuvvet mikroskobu (Atomic Force Microscopy, AFM):** Bu teknik, kompozit malzemenin yüzeyinin keskin bir prob ile taranarak ara yüzeyin yüksek çözünürlüklü bir görüntüsünün elde edilmesiyle yapılır. Elastisite modülü ve kalınlık görüntüden elde edilir.
- Fourier dönüşümü kızılötesi spektroskopisi (Fourier-Transform Infrared Spectroscopy, FTIR):** Bu teknik, kompozit malzemeye kızılötesi ışık gönderilip emilim spektrumu ölçümü yapılarak gerçekleştirilir. Spektrumun analizi ile ara yüzeyin kimyasal bileşimi belirlenir.

Test seçimi, belirlenmesi gereken kompozit malzeme ve ara yüzey özelliklerine bağlıdır. Genelde, ara yüzey özelliklerini tam anlamıyla elde etmek için bir test kombinasyonu gerekir. Örneğin, bir ara yüzün kalınlığını ölçmek isterseniz Mikro-girinti testinin verileriyle elde edilen kalınlık bilgisinin, AFM' nin yüzey görüntüleri kullanılarak doğrulanması daha güvenilir bir sonuç sağlayabilir. Fakat bu testleri yapmak hiç de kolay değildir. Bu nedenle, analiz yöntemlerine geçilecek seviyede modelleme alt yapısına ulaşabilmek ve neticesinde bu şekilde inceleme yapmak bu tür kompozitleri değerlendirmenin en verimli yollarından biri olacaktır.

Testleri yapmak için, kompozit malzeme genellikle uygun bir boyut ve şekle sahip küçük numuneler halinde kesilir. Numuneler daha sonra testin belirli gereksinimlerine göre hazırlanır. Örneğin, IFSS testinde numune, lifleri bir reçine bloğuna gömerek ve ardından lifleri bloktan çekerek hazırlanabilir. Lifleri ayırmak için gereken yük ölçülür. Test sonuçları genellikle istatistiksel olarak analiz edilerek ara yüzey özelliklerinin daha doğru tahmin edilmesi sağlanır.

ARA FAZIN DIGIMAT FE İLE MODELLENMESİ

Digimat FE modülü açıldıktan sonra yeni bir analiz oluşturulur. Daha sonra kompozit bünyesinde bulunan malzemeler teker teker **Şekil 1'** de görüldüğü gibi oluşturulup malzeme özellikleri tanımlanır.



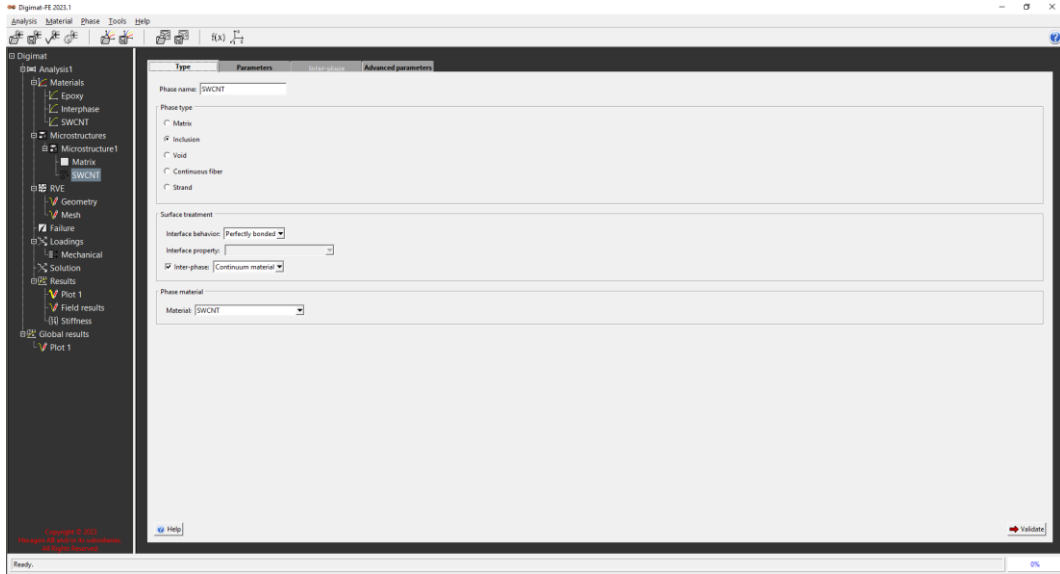
Şekil 1: Digimat FE Ara yüzü - Malzeme tanımlama.

Mohammed Ali Maghsoudlou ve arkadaşları tarafından, ara fazların kompozit malzemeler üzerindeki etkisinin incelendiği bir çalışma yapılmıştır. Bu çalışmada yapılan testlerden elde edilen **Tablo 1'** deki değerler kullanılarak malzemelerin tanımlanması yapılmıştır. Sonuçlar katılık değerleri üzerinden değerlendirileceğinden bu çalışmada malzemelerin sadece elastik bölge verileri ile tanımlanması yeterli görülmüştür.

Tablo 1: Modellemede kullanılan malzeme özellikleri.

Density (Kg/m3)	Poisson's Ratio	Elastic Modulus (GPa)	Phase
1200	0.4	2.75	Epoxy Resin
1375	0.29	142.25	Interphase
1550	0.17	1060	SWCNTs

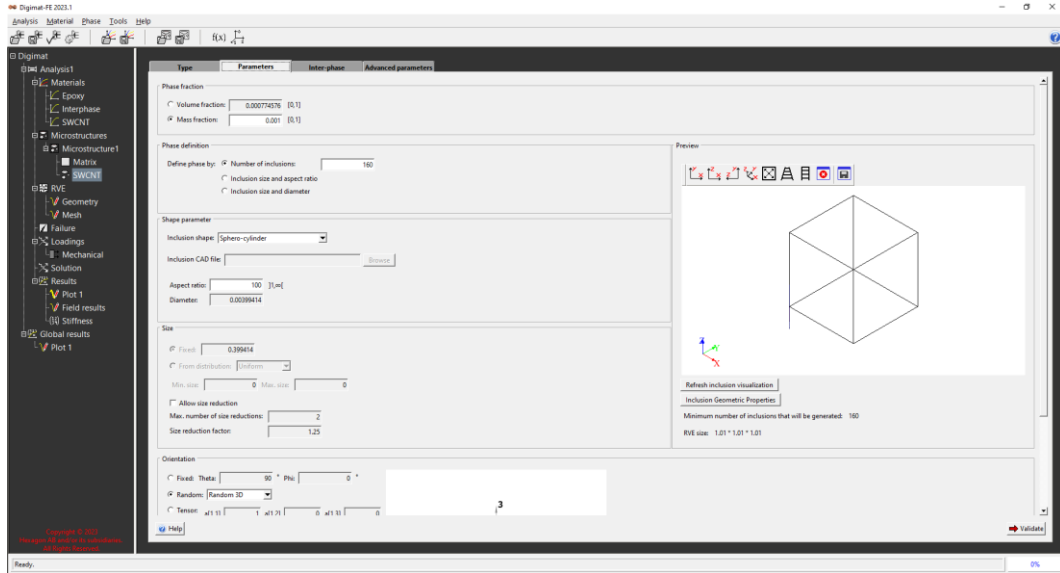
Malzemeler tanımlandıktan sonra gerekli fazlar tanımlanır. Burada önemli olan nokta, ara faz ayrı bir faz olarak değil güçlendirme fazı tanımlanması sırasında **Şekil 2'** de görüldüğü gibi tanımlanır. Burada ara faz, güçlendirme fazının üzerinde bulunan kaplama gibi düşünülebilir.



Şekil 2: Digimat Ara yüzü - Ara faz tanımlaması.

Bu çalışmada, ara fazın içerisinde yaşanan kırılmalar ve ara fazda gerçekleşen delaminasyonun incelenmeyecek olması neticesinde ara faz “Continuum Material” olarak modellendi (Şekil 2). Aynı zamanda, modelin delaminasyon parametrelerinin tanımlanması ile “Cohesive Material” olarak da tanımlanması mümkündür. “Cohesive” modeli kullanıldığı durumda ara fazda gerçekleşen delaminasyon da incelenebilmektedir.

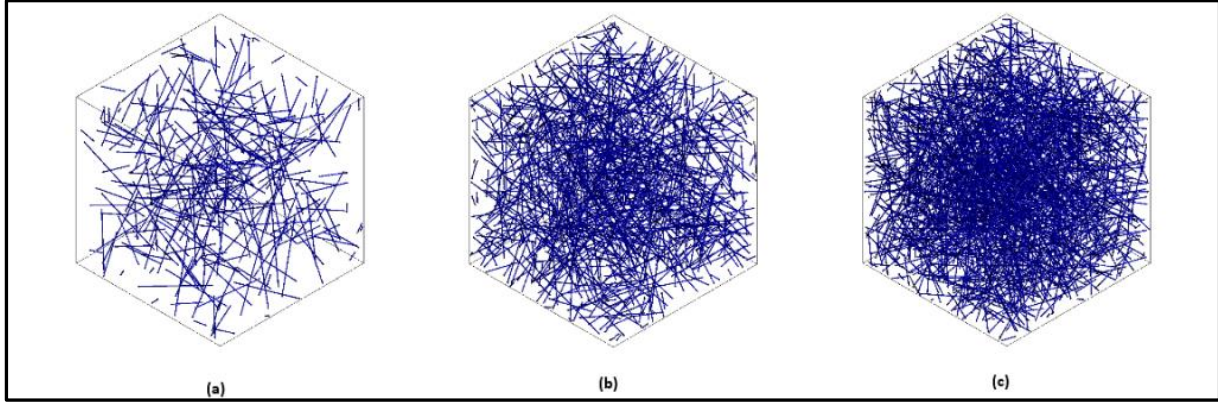
İlk olarak güçlendirme fazının parametreleri Şekil 3’ te görüldüğü gibi tanımlandı. Burada kullanılan parametreler, “Mass Fraction”, “Aspect Ratio” ve “Number of Inclusions” ’dir.



Şekil 3: Digimat Ara yüzü – Güçlendirme fazının parametrelerinin tanımlanması.

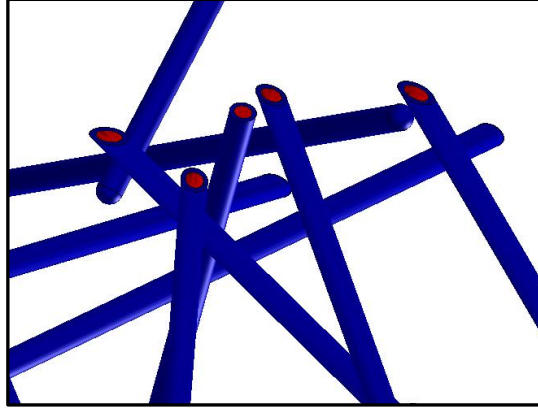
Sonrasında, ara faz parametrelili modele tanımlandı. Bu çalışmada takviye fazı ile ara faz kalınlıklarının birbirine göre tanımlanabilmesi için “Relative Thickness” parametresi kullanıldı ve “Aspect Ratio” her ikisi için de sabit olarak kabul edildi.

Bir sonraki aşamada “RVE (Representative Volume Element)” oluşturulur ve oluşan RVE üzerine “Mesh” örümü yapılır. Aşağıdaki şekilde 0.1, 0.3 ve 0.5 wt% SWCNT (Short Wire Carbon Nano-Tube) için oluşturulan RVE’ ler ayrı ayrı gösterilmiştir.



Şekil 4: Digimat Ara yüzü - (a) 0.1 (b) 0.3 (c) 0.5 wt % SWCNT kompozitler için oluşturulan RVE' ler.

Oluşturulan güçlendirme fazının yakından görünümü ise Şekil 5’ da gösterilmiştir.



Şekil 5: Digimat Ara yüzü - Güçlendirme fazının yakından görünümü.

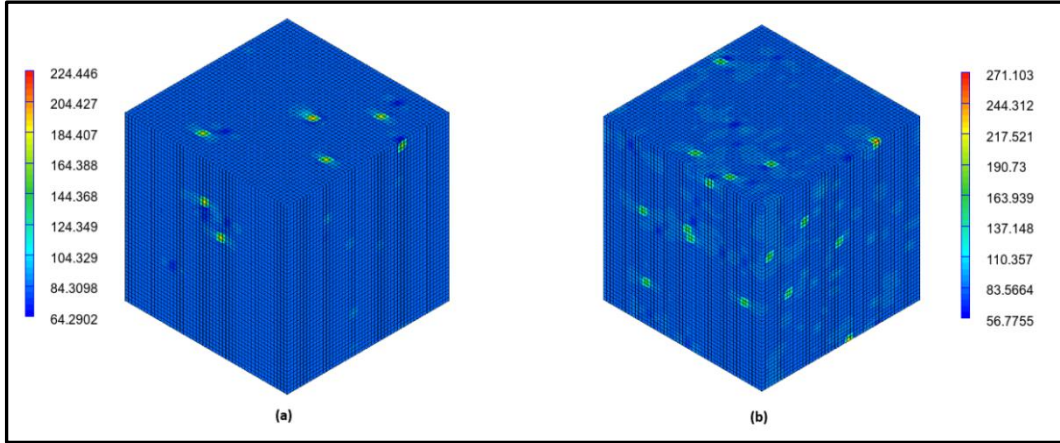
Son olarak kompozit üzerine uygulanacak yük “Loadings” bölümünden programa tanımlandı. Analiz sonunda x yönündeki mekanik özellikleri elde etmek istediğimiz için modele bu yönde tek eksenli gerilme yüklemesi yapıldı. Uç gerilme noktası 0.03 olarak kabul edildi. Bunun nedeni ise; malzemelerin özellikleri tanımlanırken bu gerilme değerine kadar olan kısmın özelliklerinin tanımlanmış olmasıdır.

Böylece model analize hazır duruma gelmiş bulunmaktadır. “Solution” kısmından analiz başlatılıp sonuçlar alınabilir.

ANALİZ SONUÇLARI

Ara fazın modellenmesinin sonuçlar üzerine etkisini incelemek amacıyla 0.1, 0.3 ve 0.5 wt % SWCNT kompozitler için ayrı ayrı ara fazın olduğu ve olmadığı analizler gerçekleştirildi ve çıkan sonuçlar aşağıda karşılaştırıldı.

0.1 wt % SWCNT kompoziti için yapılan analizlerde çıkan sonuçlar aşağıdaki şekillerde gösterilmiştir.

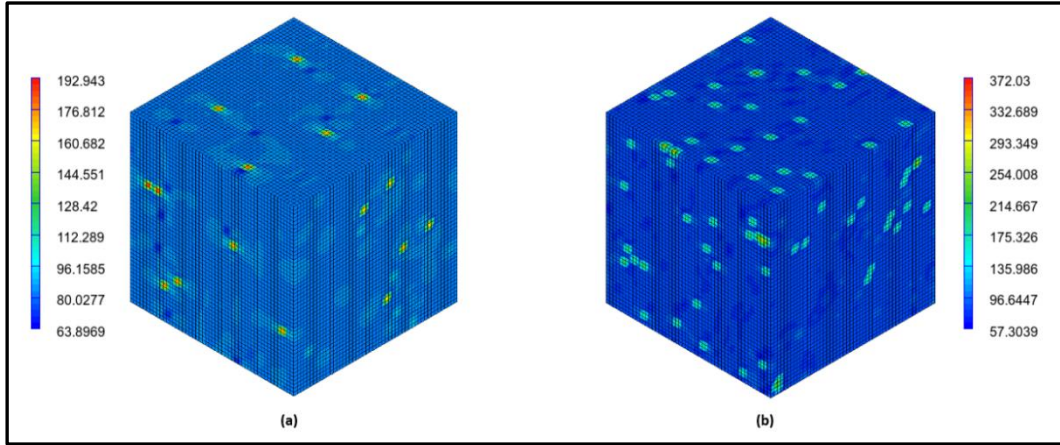


Şekil 6: 0.1 wt % SWCNT kompozitte ara fazın hesaba katılmadığı (a) ve katıldığı (b) sonuçlar - Equivalent von Mises.

Engineering constants		Engineering constants	
	Value		Value
E11	2894.3	E11	2957.7
E22	2894.3	E22	2957.7
E33	2894.3	E33	2957.7
nu12	0.39679	nu12	0.39549
nu21	0.39679	nu21	0.39549
nu13	0.39679	nu13	0.39549
nu31	0.39679	nu31	0.39549
nu23	0.39679	nu23	0.39549
nu32	0.39679	nu32	0.39549
G12	1036.1	G12	1059.7
G13	1036.1	G13	1059.7
G23	1036.1	G23	1059.7
Global density	1.2003E-09	Global density	1.2032E-09

Şekil 7: 0.1 wt % SWCNT kompozitte ara fazın hesaba katılmadığı (a) ve katıldığı (b) sonuçlar – Engineering Constants.

0.3 wt % SWCNT kompoziti için yapılan analizlerde çıkan sonuçlar aşağıdaki şekillerde gösterilmiştir.

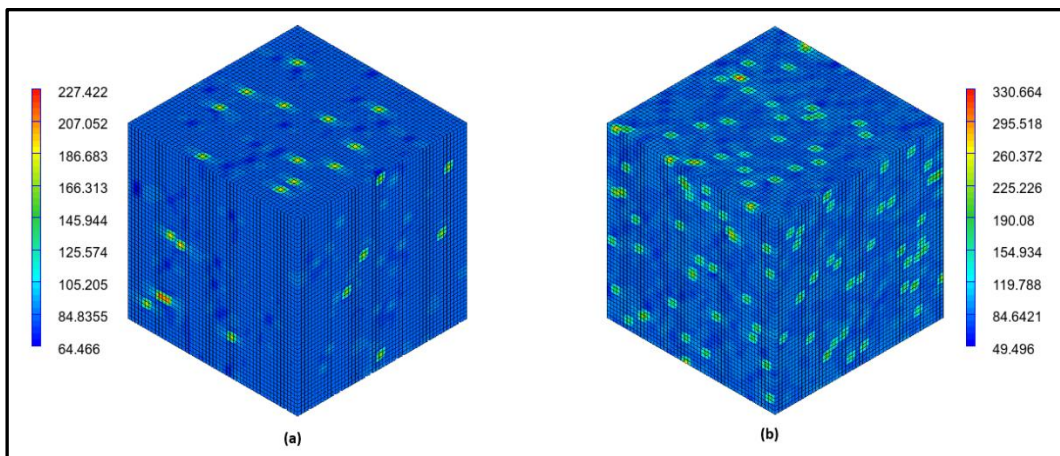


Şekil 8: 0.3 wt % SWCNT kompozitte ara fazın hesaba katılmadığı (a) ve katıldığı (b) sonuçlar – Equivalent von Mises.

Engineering constants		Engineering constants	
	Value		Value
E11	3182	E11	3370.4
E22	3182	E22	3370.4
E33	3182	E33	3370.4
nu12	0.39077	nu12	0.38728
nu21	0.39077	nu21	0.38728
nu13	0.39077	nu13	0.38728
nu31	0.39077	nu31	0.38728
nu23	0.39077	nu23	0.38728
nu32	0.39077	nu32	0.38728
G12	1144	G12	1214.8
G13	1144	G13	1214.8
G23	1144	G23	1214.8
Global density	1.2008E-09	Global density	1.2095E-09

Şekil 9: 0.3 wt % SWCNT kompozitte ara fazın hesaba katılmadığı (a) ve katıldığı (b) sonuçlar - Engineering Constants.

0.5 wt % SWCNT kompoziti için yapılan analizlerde çıkan sonuçlar aşağıdaki şekillerde gösterilmiştir.



Şekil 10: 0.5 wt % SWCNT kompozitte ara fazın hesaba katılmadığı (a) ve katıldığı (b) sonuçlar – Equivalent von Mises.

Engineering constants		Engineering constants	
	Value		Value
E11	3468.6	E11	3780.2
E22	3468.6	E22	3780.2
E33	3468.6	E33	3780.2
nu12	0.38522	nu12	0.37998
nu21	0.38522	nu21	0.37998
nu13	0.38522	nu13	0.37998
nu31	0.38522	nu31	0.37998
nu23	0.38522	nu23	0.37998
nu32	0.38522	nu32	0.37998
G12	1252	G12	1369.7
G13	1252	G13	1369.7
G23	1252	G23	1369.7
Global density	1.2014E-09	Global density	1.2159E-09

(a) (b)

Şekil 11: 0.5 wt % SWCNT kompozitte ara fazın hesaba katılmadığı (a) ve katıldığı (b) sonuçlar – Engineering Constants..

Yukarıdaki sonuçlardan da görülebileceği üzere ara fazın analize katılması durumunda çıkan sonuçlarda kayda değer değişimler olduğu görülmektedir.

Ayrıca, referans verilen çalışmadan, aşağıdaki tabloda görülen çekme testi verileri alındı ve analizin doğruluğu değerlendirildi. Hata hesabı aşağıda verilen formüle göre yapılmıştır.

$$Error \% = \frac{|(Test) - (Analysis)|}{Test} * 100$$

Tablo 2: Çekme testlerinden elde edilen elastisite modülü verileri.

Nano Kompozit Tipi	Ortalama Elastisite Modülü (MPa) - Test	X Yönündeki Elastisite Modülü (MPa) - DIGIMAT	Error
0.1 wt% SWCNTs	3107.47	2957.70	4.82
0.3 wt% SWCNTs	3125.43	3370.40	7.84
0.5 wt% SWCNTs	3071.56	3780.20	23.07

Tablo 2' den de görüldüğü üzere, 0,1 ve 0,3 için yapılan analizlerden elde edilen elastisite verileri testlerden elde edilen verilere oldukça yakın durumda iken 0,5 için yapılan analizden alınan elastisite sonucu test sonucuna göre oldukça farklı olduğu görülmüştür.

SONUÇ

DIGIMAT FE içerisinde ara faz tanımını yapabileceğiniz iki farklı ara faz modeli (Continuum Material ve Cohesive) bulunmaktadır. Yapılan analizlerde, farklı ağırlıklardaki SWCNT (Short Wire Carbon Nano-Tube) kompozitler için ara fazın olduğu ve olmadığı durumlar karşılaştırılmıştır. Sonuçlar, ara fazın analize katılmasıyla çıkan sonuçlarda kompozitin elastisite modülü değerlerinde 100 ila 300 MPa derecelerinde yükselmelerin olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca, ara faz ile yapılan analizlerin sonuçlarının çekme testinden elde edilmiş olan verilere oldukça yakın olduğu **Tablo 2'** de açıkça görülmektedir.

Bu çalışma, DIGIMAT FE modülünün kompozit malzemelerin ara fazlarının modellenmesi ve analizi için etkili bir araç olduğunu göstermektedir. Ara fazların doğru bir şekilde modellenmesi, kompozit malzemelerin mekanik davranışının daha iyi anlaşılmasına ve tasarım süreçlerinin geliştirilmesine katkı sağlayabilir.

REFERANSLAR

1. Digimat 2021.4 User's Manual
2. Effect of interphase, curvature, and agglomeration of SWCNTs on mechanical properties of polymer-based nanocomposites: Experimental and numerical investigations – Mohammad Ali Maghsoudlou, Reza Barbaz Isfahani, Saeed Saber-Samandari, Mojtaba Sadighi.