

HORVÁTH AURÉL<sup>1</sup>, PETRÉNY ROLAND<sup>1</sup>, MÉSZÁROS LÁSZLÓ<sup>1,2</sup>, VAS LÁSZLÓ MIHÁLY<sup>1,2</sup>

# A SZÁLKÖTEGCELLA-ELMÉLET ALKALMAZÁSA SZÉNSZÁLLAL ÉS SZÉN NANOCŐVEL ERŐSÍTETT PLA KOMPOZITOK SZERKEZETI MODELLEZÉSÉRE

## APPLICATION OF FIBER BUNDLE CELL THEORY TO STRUCTURAL MODELING OF CARBON FIBER AND CARBON NANOTUBE REINFORCED PLA COMPOSITES

Munkánk során szén nanocsővel és szénszállal erősített hibridkompozitok húzási tulajdonságait modelleztük szálkötegcella-modell segítségével. A korábbi jellemző alkalmazásoktól eltérően a modellparamétereket kísérleti úton határoztuk meg, és azokat rögzítve, csak az egyes szerkezeti egységek térfogatarányát változtatva állítottuk fel a modellt. A modellillesztés alapján megállapítottuk, hogy a rideg amorf határfázis elsősorban a szakítógörbe kezdeti meredekségét növeli meg, míg a nanocsövek hatására a tönkremeneteli folyamat lelassul és elnyúlik, így a végső tönkremenetel nagyobb deformációknál következik be.

In our work, we modelled the tensile properties of carbon nanotube and carbon fibre reinforced hybrid composites using a fibre bundle cell model. In contrast to previous typical applications, the model parameters were determined experimentally and fixed, while varying only the volume fraction of each structural unit. Based on the model fitting, we found that the rigid amorphous interphase mainly increases the initial slope of the tensile curve, while the nanotubes slow down the failure process and the final failure occurs at higher deformations.

### 1. BEVEZETÉS

A megújuló erőforrásból előállítható polimerek az utóbbi évtizedek egyik legtöbb lehetőséget rejtő anyagcsoportját képezik, amelyek közül felhasznált mennyiségét tekintve a politejsav (PLA) a legkiemelkedőbb, műszaki célú alkalmazása azonban jelenleg kevéssé elterjedt. Különböző típusú nanorészecskék hozzáadása révén azonban lehetséges a mechanikai és kémiai jellemzőik módosítása, olyan anyagi tulajdonságokat megteremtve ezzel, amelyek műszaki célokra is alkalmassá tehetik. Az elmúlt

években megjelent, nanotechnológiával foglalkozó publikációk alapján megállapítható, hogy napjaink egyik legnépszerűbb, legtöbbször foglalkoztató nanorészecskéje a szén nanocső (CNT). Kiváló szilárdsága, kis sűrűsége és vezetőképessége révén kompozitokban már kevesebb mint 1 m% alkalmazásával is jelentősen meg tudja változtatni a mátrixanyag tulajdonságait, ugyanakkor az aggregációs hajlama miatt nehezen elosztható. Az elosztatás alapvetően a feldolgozásakor ébredő nyíróerőkön múlik. Korábbi kutatásunk során kimutattuk, hogy ömledékes feldolgozásakor 30 m% mikroméretű szálal erősítőanyag jelenléte hatékonyan segíti a nanocsövek szétválasztását [1–4].

Az ilyen módon előállított, nano- és mikroméretű erősítőanyaggal is rendelkező hibridkompozit mikroszerkezete és mechanikai tulajdonságai között szoros kapcsolat van. Ennek megismerése és modellezése szükséges a nano- és hibridkompozitok tervezhetősége és ez által a széleskörű elterjedésük érdekében. Petrény és társai [4] már részletesen foglalkoztak CNT-vel és szálal erősítőanyaggal, esetükben szénszállal (CF) erősített polimer mátrixú hibridkompozit mikro- és fázisszerkezetének vizsgálatával. Rámutattak, hogy a hozzáadott nanoméretű CNT és mikroméretű CF körül is kialakul egy mátrixanyagot meghaladó moduluszal rendelkező háromdimenziós határfázis.

Amorf polimereknél az erősítőanyaggal érintkező határfázis gátolt mozgású molekulákból áll, melyet rideg amorf fázisnak (RAF) nevezünk. A CNT nagy felület-térfogat arányának köszönhetően a határfázis térfogata, ezzel együtt makroszkopikus mechanikai tulajdonságokra gyakorolt hatása is jelentős. A mátrixanyagban meglévő, erősítőanyagtól független részecskékben a molekulák mozgása kevésbé gátolt, úgynevezett mobil amorf fázist (MAF) alkotnak [4].

Az imént ismertetett szerkezettel rendelkező anyag viselkedésének leírásához olyan anyagszerkezeti modellre van szükség, amely képes figyelembe venni a különböző nano- és mikroméretű fázisok együttes hatását. A Vas és társai [5] által megalkotott szálköteg elméleten alapuló szálkötegcella-modellben idealizált szálkötegek soros és párhuzamos kapcsolása, illetve súlyozása révén írjuk le az anyag viselkedését. A szálkötegcella-modellt

<sup>1</sup> Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar, Polimertechnika Tanszék

<sup>2</sup> ELKH-BME Kompozittechnológiai Kutatócsoport

(FBC modell) a szakítóvizsgálatok alapján kapott, átlagolt erő-elmozdulás görbékre illesztve és a modellfüggvény paramétereit vizsgálva következtethetünk az anyag szerkezeti felépítésére, azaz az egyes szálkötegek megfeleltethetők az anyag egyes szerkezeti egységének, például a RAF-nak, MAF-nak, illetve az erősítőanyagoknak.

Jelen munkánk során célunk volt felhasználni a korábbi vizsgálatainkkal kimutatott, a PLA mátrixú nano- és hibridkompozitok szerkezeti felépítésére és a szerkezeti egységek saját tulajdonságaira vonatkozó ismereteinket. Ezáltal a modell számos paramétere rögzíteni lehet, a többi illesztett modellparaméter alapján pedig alaposabban feltárható az egyes szerkezeti egységek teherviselésben és tönkremenetelben betöltött szerepe.

## 2. FELHASZNÁLT ALAPANYAGOK, ELŐÁLLÍTÁSI ÉS VIZSGÁLATI MÓDSZEREK

Hőre lágyuló mátrixanyagként a NatureWorks LLC PLA 4043D granulátumát használtuk, amelynek sűrűsége  $1,24 \text{ g/cm}^3$ , üveges átmeneti hőmérséklete  $55\text{--}60 \text{ }^\circ\text{C}$ . Az alkalmazott CNT a Nanocyl S. A. NANOCYL NC7000 típusú terméke volt, amely többfalú, átmérője  $9,5 \text{ nm}$ , hossza  $1,5 \text{ }\mu\text{m}$ , fajlagos felülete pedig  $250\text{--}300 \text{ m}^2/\text{g}$ . Szálas erősítőanyagként a Zoltek Zrt. Panex 35 Chopped Pellet 95 termékét használtuk fel. A szál átmérője  $8,3 \text{ }\mu\text{m}$ , hossza  $6 \text{ mm}$ , sűrűsége  $1,81 \text{ g/cm}^3$ .

A PLA granulátum feldolgozást megelőző szárítására egy Faithful WGLL-125 BE szárítószekrényt használtunk, amelyben 4 órán át  $80 \text{ }^\circ\text{C}$ -on száradt a PLA granulátum a gyártó ajánlásának megfelelően.

A kompozitok előállítását a Labtech Engineering Co., Ltd. LTE 26-44 típusú ikercsigás extruderén  $25 \text{ 1/perces}$  fordulatszám és  $180\text{--}200 \text{ }^\circ\text{C}$ -os zónahőmérsékletek mellett végeztük. Az 1. táblázatban feltüntetett erősítőanyag tartalommal rendelkező szárazkeverékekből indultunk ki.

1. táblázat: A gyártott minták erősítőanyag tartalma és megnevezése

CNT [tömeg%]	0	0,25	0,5	0,75	1,00	0	0,25	0,5	0,75	1,00
CF [tömeg%]	0	0	0	0	0	30	30	30	30	30
Minták jelölése	PLA	PLA+0,25CNT	PLA+0,5CNT	PLA+0,75CNT	PLA+1CNT	PLA+30CF	PLA+30CF+0,25CNT	PLA+30CF+0,5CNT	PLA+30CF+0,75CNT	PLA+30CF+1CNT

A kompaundálással kapott folytonos szálaból egy LZ-120/VS típusú granuláló berendezéssel  $4 \text{ mm}$  hosszúságú granulátumot állítottunk elő. Ezt a további feldolgozás előtt ismét szárítottuk a korábbiakban ismertetett paraméterek szerint.

Az MSZ EN ISO 527-2:1999 szabvány szerinti próbatetek fröccsöntését egy Arburg Allrounder Advance 270S 400-170 fröccsöntő gépen végeztük  $25 \text{ }^\circ\text{C}$ -os szerszámhőmérséklet és  $1200 \text{ bar}$  fröccsnyomás mellett. Ezt követően az elkészült próbatesteket  $23 \text{ }^\circ\text{C}$  hőmérsékleten és  $50\%$  relatív páratartalom alatt kondicionáltuk egy exszikkátorban négy héten keresztül.

A próbatetek szakítóvizsgálatát két különböző gépen végeztük az erősítőanyag függvényében. A csak CNT-t tartalmazó

nanokompozitokat egy Zwick Z005, a CNT-t és CF-t egyaránt tartalmazó hibridkompozitokat egy Zwick Z020 típusú szakítógéppel szakítottuk. A méréseket satus kialakítású befogással,  $2 \text{ mm/perces}$  szakítósebességgel öt-öt próbatesten végeztük el.

A szálkötegcella-modell paramétereinek meghatározásához szükséges volt a kompozitok rideg amorf és mobil amorf fázis arányának megismerése. Ennek érdekében modulált differenciált pásztázó kalorimetriás (MDSC) vizsgálatot végeztünk egy TA Instruments Q2000 típusú DSC berendezésen. A vizsgálat hőtartomány  $0\text{--}100 \text{ }^\circ\text{C}$ , a fűtési sebessége  $5 \text{ }^\circ\text{C/perc}$  volt. Az alkalmazott moduláció amplitúdója  $1 \text{ }^\circ\text{C}$  volt  $60 \text{ másodperces}$  periódusidő mellett. A mérést  $50 \text{ ml/perc}$  térfogatárammal áramló nitrogén gázzal fenntartott inert atmoszférában végeztük. A felhasznált minták tömege  $10\text{--}15 \text{ mg}$  közötti volt.

Amorf mátrixanyag esetén a rideg amorf (RAF) és mobil amorf (MAF) fázis mennyisége meghatározható az üveges átmenetnél fellépő fajhőnövekményből az alábbi képletekkel:

$$MAF = \frac{\Delta c_p}{\Delta c_{p0}} \cdot 100 \text{ (\%)} \quad (1)$$

$$RAF = 1 - MAF \text{ (\%)} \quad (2)$$

ahol MAF a mobil amorf, RAF a rideg amorf fázis mennyisége térfogatszázalékban,  $\Delta c_p$  a mért,  $\Delta c_{p0}$  a teljesen amorf referencia minta, esetünkben erősítetlen PLA fajhőnövekménye. A kompozitok vizsgálatánál az erősítőanyag térfogatarányával korrigáltunk [6].

## 3. EREDMÉNYEK

### 3.1. A SZÁLKÖTEGCELLA-MODELL ALAPJAI

Kutatásunk során az általunk előállított nano- és hibridkompozitok húzási tulajdonságait modelleztük szálkötegcella-modell segítségével. Utóbbi felállításához minden vizsgált minta esetében annyi köteget használtunk, ahányféle fázist az adott anyag tartalmazott. A szálkötegcellák sztochasztikus paraméterekkel is rendelkeznek, így húzóigénybevételre adott válaszuk is egy sztochasztikus folyamat. Ezt egy várhatóérték folyamattal jellemezhetjük. Esetünkben a szálkötegcellák eredő húzóerő-függvénye az alábbi alakban írható fel [7–9]:

$$f_{\text{mért}}(u) \approx f_{\text{modell}}(u) = \sum_{i=1}^n p_i f_i(u) = \sum_{i=1}^n p_i k_i(u) R_i(u) \quad (3)$$

ahol  $u$  a vezérelt szálkötegnyúlás, a szálkötegek száma  $i=1\dots n$ ,  $p_i$  az  $i$ -edik szálköteg súlya,  $f_i(u)$  a húzóerő függvénye,  $k_i(u)$  a húzókarakterisztikája,  $R_i(u)$  pedig a megbízhatósági függvénye. Utóbbiak az alábbi alakban fejezhetők ki [6–8]:

$$k_i(u) = a_i(1 - e^{-b_i u}) + c_i u \quad (4)$$

$$R_i(u) = 1 - Q_i(u; E_i, D_i^2) \quad (5)$$

A (4) egyenlet a Standard-Solid modell szakítóvizsgálat során is alkalmazott sebességugrás gerjesztésre adott válasza. Ebben a paraméter a köteget alkotó szálak előfeszített állapotát veszi figyelembe, amely a húzóerő görbe felfutó szakaszának karakterisztikáját befolyásolja. Amennyiben  $a < 0$ , a szálak lazák és

hullámosak, így csak a kiegyenesedésüket követően vesznek részt a terhelésvételben, ekkor a görbe alulról konvex. Amennyiben  $a=0$ , a szálak nem előfeszítettek, ekkor a görbe lineáris, míg  $a>0$  esetén a szálak megfeszített állapotúak, ekkor a görbe alulról konkáv karakterisztikájú. A  $b$  paraméter az anyag viszkoeasztikus viselkedését veszi figyelembe, ami a görbe felfutó szakaszán a görbület nagyságában nyilvánul meg. A  $c$  paraméter a szálak húzómerevségét adja meg, ami a felfutó szakasz meredekségét befolyásolja. Az eredő húzóerő akkor nem negatív, ha minden  $i$ -edik szálköteg kezdeti húzómerevsége is nem negatív [8,9].

Az (5) összefüggés az  $i$ -edik köteg megbízhatósági függvénye, amely a szálak szakítónyúlásának komplementer eloszlásfüggvénye, ahol  $Q_i(u; E_i, D_i^2)$  konstans paraméterű normális eloszlásfüggvény, ahol az  $i$ -edik köteg várható értéke a szálak várható szakadási nyúlása  $E_i$ , négyzetes szórása  $D_i^2$  [9].

Egy adott anyag esetében a felállított modell és a szakítógörbe összehasonlítására, ezzel együtt a modellillesztés jellemzésére a relatív átlagos négyzetes hibát (RÁNH) használjuk, ami az átlagos négyzetes hiba és a mért maximális erőérték aránya [8]:

$$RÁNH = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H^2(n, p, \alpha, \beta)}}{\max_{1 \leq j \leq N} f_{mért}(u_j)} \quad (6)$$

$$H^2(n, p, \alpha, \beta) = \sum_{j=1}^N [f_{mért}(u_j) - \sum_{i=1}^N p_i k_i(u_j; \alpha_i) R_i(u_j; \beta_i)]^2 \rightarrow \min \quad (7)$$

ahol  $N$  a mintavételezett adatok száma,  $\alpha = (a, b, c)^T$  és  $\beta = (m, s)^T$  a paraméterek vektorai. A modellillesztés során a cél a 6% alatti RÁNH volt.

### 3.2. A MODELLPARAMÉTEREK MEGHATÁROZÁSA

A szálkötegcella-modellt alkotó, párhuzamosan kapcsolt szálkötegek  $p$  súlyát minden esetben az adott szálköteg által reprezentált fázis térfogataránya alapján számítottuk. Míg a RAF és MAF esetében a DSC mérés eredményeit vettük alapul, addig a hozzáadott CNT és CF térfogatarányát azok tömegarányából számítottuk. Az egyes fázisok térfogathányadát minden esetben a teljes kompozit térfogatra vonatkoztatva számítottuk.

2. táblázat: A kompozitokat alkotó fázisok térfogataránya

Minta	CNT (térf%)	CF (térf%)	MAF (térf%)	RAF (térf%)
PLA	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000
PLA0,25CNT	0,0018	0,0000	0,9232	0,0750
PLA0,5CNT	0,0036	0,0000	0,8464	0,1500
PLA0,75CNT	0,0055	0,0000	0,7745	0,2200
PLA1CNT	0,0073	0,0000	0,6927	0,3000
PLA30CF	0,0000	0,2100	0,5300	0,2600
PLA30CF0,25CNT	0,0018	0,2100	0,4482	0,3400
PLA30CF0,5CNT	0,0037	0,2100	0,3763	0,4100
PLA30CF0,75CNT	0,0055	0,2100	0,2945	0,4900
PLA30CF1CNT	0,0073	0,2100	0,2227	0,5600

A szálkötegek húzókarakterisztikáját leíró  $a$  és  $b$  paraméterek meghatározásánál a húzóvizsgálattal kapott, pontonként átlagolt szakítógörbékre történő minél pontosabb modellillesztés volt a célunk. A paramétereket úgy határoztuk meg, hogy azok erősítőanyag tartalomtól független állandók legyenek és csak a  $p_i$  súlyukat változtattuk a fázisarányokkal összhangban.

Az erősítőanyagok elhelyezkedését a mátrixban véletlenszerűnek tekintettük, ezért azok rugalmassági modulusz értékét egy  $f$  orientációs faktorról szükséges megszorozni. Amennyiben az orientáció eloszlását egyenletesnek tekintjük, úgy  $f$  értéke közelítően  $\frac{1}{5}$ . Ekkor:

$$E_{korr} = f \cdot E \left( \frac{N}{mm} \right) \quad (8)$$

$$C_{korr} = E_{korr} \cdot \frac{A_0}{l_0} \left( \frac{N}{mm} \right) \quad (9)$$

A próbatetek gyártásához felhasznált CNT és CF adatlapján található húzórugalmassági modulusz érték, a próbatetek geometriája, illetve a (8) és (9) összefüggés ismeretében számítható az erősítőanyagok korrigált húzómerevsége, ami az erősítőanyagokat reprezentáló kötegek esetében a  $c$  paramétert képezte a modellalkotás során.

3. táblázat: A CNT és a CF korrigált húzómerevsége

Erősítőanyag	E (GPa)	f (-)	$E_{korr}$ (GPa)	$C_{korr}$ (N/mm)
CNT	1000	0,211	211,00	76727
CF	242	0,211	51,06	18568

A tiszta PLA mátrixanyag egyetlen mobil amorf fázisból áll, amelyet két kötegre osztottunk, a K1 köteg a szakítógörbe kezdeti szakaszát és erőcsúcsát, míg a K4 köteg a szakítógörbe platószerű szakaszát írja le (*1/a ábra*). A K1 köteg lényegében egy szakadozó szálakból álló köteg, amely megfeleltethető a molekulaláncok közötti másodrendű kötések felszakadozásának. Az erőcsúcsot követően a próbatetekeken mikrorepedések megjelenése volt megfigyelhető. Ezekben jellemzően a repedésre merőlegesen orientált molekulaláncok vannak, így képesek terhelést felvenni, ez okozza a szakítógörbe platószerű szakaszát [10, 11]. Ezt a jelenséget matematikailag egy 0  $c$  paraméterű (csúszó) köteggel (K4 köteg) írtuk le. A csak CNT-t tartalmazó nanokompozitok esetében a modellezéshez minden esetben négy-négy párhuzamosan kapcsolt szálköteg-cellát alkalmaztunk (*1/b, c, d, e ábra*), amelyek sorra reprezentálják a minta mobil amorf (K1 és K4), a CNT (K2) és a rideg amorf (K3) fázisait. A nanocső esetében a  $c$  paramétert a (8) és (9) egyenlet alapján számítottuk, amit a modellillesztés során csökkenteni kellett, azaz az orientáció eloszlása feltételezhetően nem volt egyenletes. A mátrixanyag mobil amorf részét alkotó kötegek  $c$  paramétereit a tiszta PLA-nál meghatározott értékeken tartottuk, a rideg amorf fázist modellező köteg  $c$  paraméterét pedig korábbi mérési eredmények alapján ennél nagyobbak választottuk. Az egyes szálkötegek  $E(L)$  várható szakadási nyúlás értékének meghatározásakor abból a feltételezésből indultunk ki, amely szerint a tönkremenetel legkorábban a rideg és a mobil amorf fázis határán következik be, ezután a mobil amorf fázisban a molekulaláncok elszakadnak vagy megcsúsznak, ezt követi a CNT szálak elszakadása, végül pedig a mikrorepedésekben lévő orientált mobil amorf molekulaláncok szakadnak el.

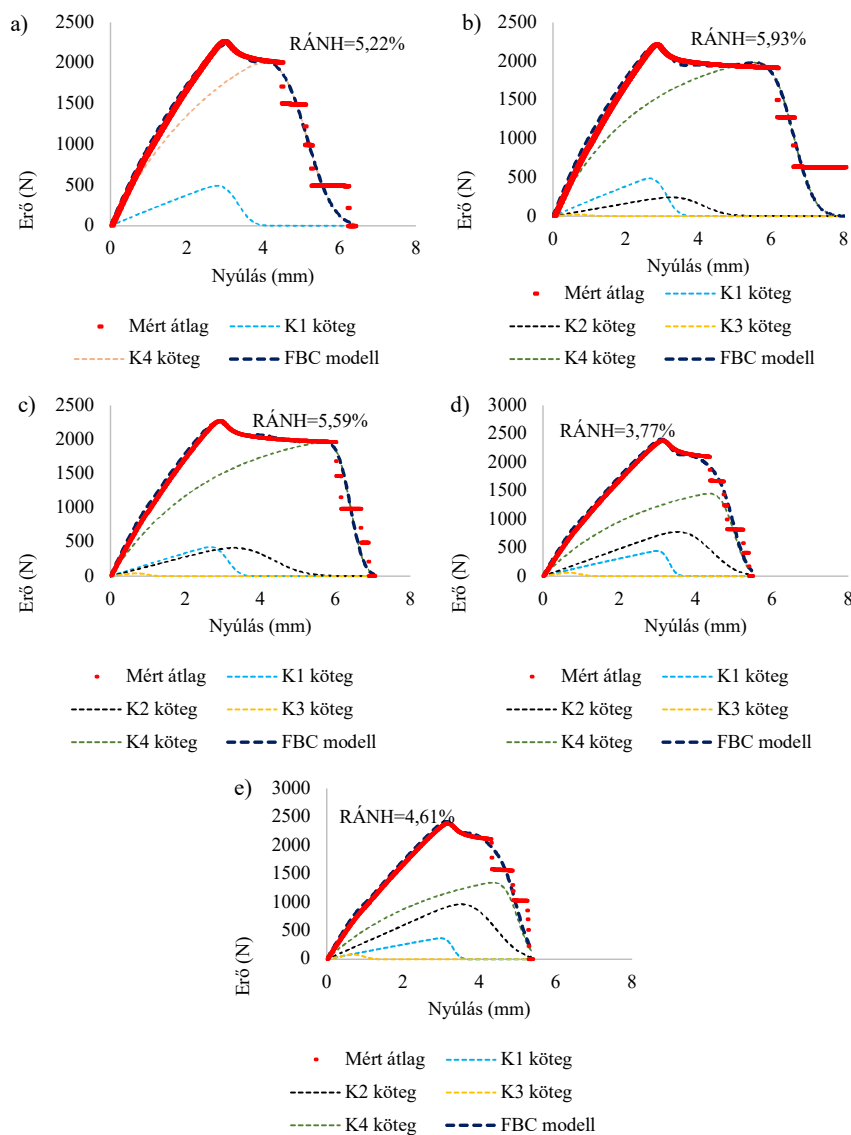
A rideg amorf fázis hatása elsősorban a szakítógörbe kezdeti szakaszán figyelhető meg, különösen a nagyobb nanocső tartalmak esetén a görbe kezdeti meredeksége nagyobb, ezután a görbe kis mértékben megtörik és a meredeksége csökken. Ez annak köszönhető, hogy a rideg és a mobil amorf fázis merevsége nagymértékben eltér, ezért a közöttük lévő határfázis megcsúszik.

A nanokompozitok szakítógörbéinek platószerű szakasza jóval elnyújtottabb a tiszta PLA-hoz képest, ami a K4 köteg nanocső tartalommal növekvő  $E(L)$  paraméterében is megmutatkozik (4. táblázat). Ez feltételezhetően annak köszönhető, hogy a kialakuló mikrorepedéseket nanocsövek hidalják át, amelyek egy ideig még képesek terhelést felvenni.

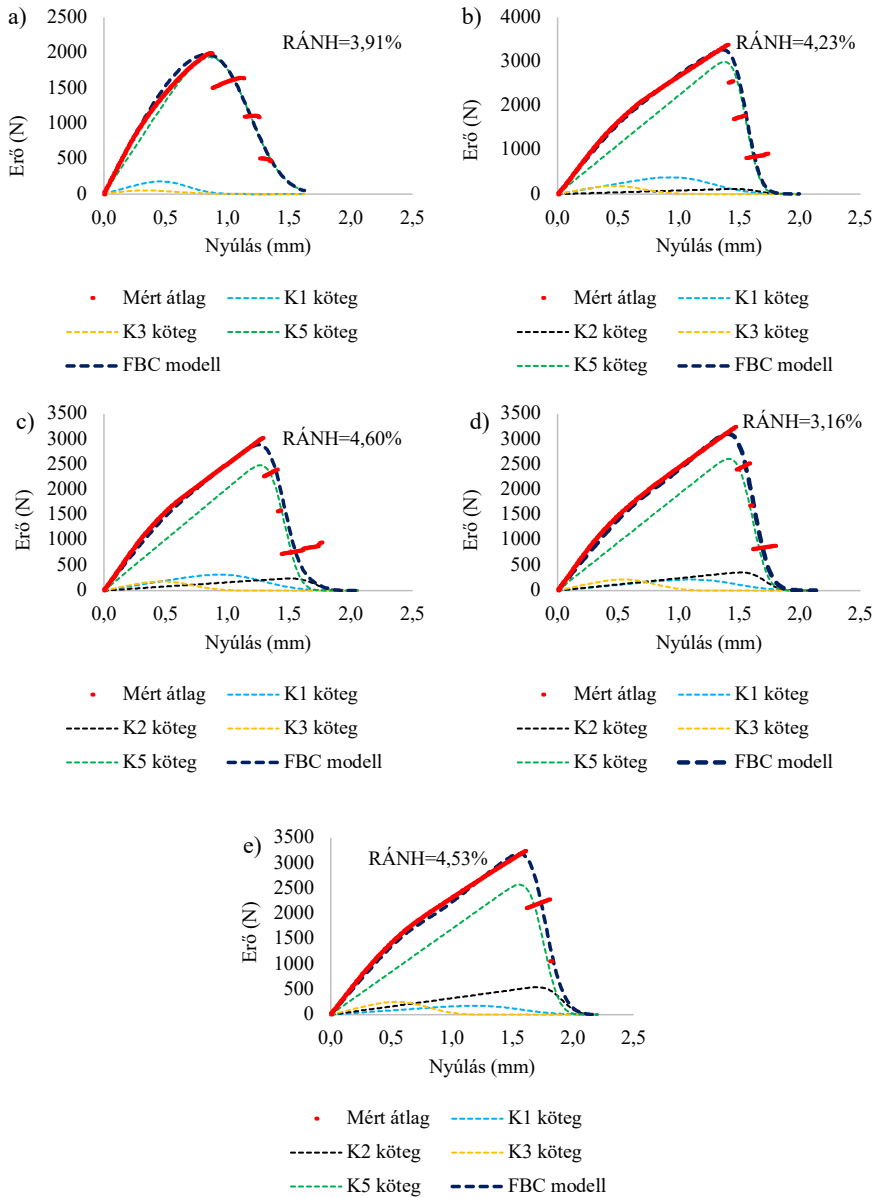
A nanokompozitokhoz hasonlóan, a hibridkompozitok modellezéséhez is négy-négy szálköteg-cellát alkalmaztunk, amelyek a minták mobil amorf (K1), CNT (K2), rideg amorf (K3) és CF (K5) fázisait reprezentálják (2. ábra). A K1, K2 és K3 kötegek  $a$ ,  $b$ , és  $c$  paraméterei megegyeznek a nanokompozitok modellezése során alkalmazottakkal. A CF-t reprezentáló K5 köteget lineárisan rugalmasnak tekintettük, vagyis  $a$  és  $b$  paraméter értéke egyaránt zérus. A nanocsövekhez hasonlóan a CF esetében is csökkenteni kellett a  $c$  paramétert a (8) és (9) egyenlet alapján számítható képest, azaz az orientáció eloszlása feltételezhetően itt sem volt egyenletes. Mivel a szálerősített anyagok tönkremenetele a nanokompozitokéhoz képest jóval kisebb nyúlást követően következett be, és így a mikrorepedésekben nem alakulhattak ki erősen orientált molekularészek, a K4 köteget elhagytuk. A modellillesztés alapján azt feltételeztük, hogy a nanokompozitokhoz hasonlóan először itt is a rideg amorf fázis

4. táblázat: A tiszta PLA, illetve a nanokompozitok szálköteg-modell paraméterei

Anyag	Köteg	p	a	b	c	$E(L)$	$D(L)$
PLA	K1:	0,65	540	0,2	200	3,3	0,3
	K4:	0,35	8000	0,33	0	5,11	0,55
PLA+0,25CNT	K1:	0,5687	540	0,2	250	3,1	0,25
	K2:	0,0018	-1000	0,3	44727	4	0,55
	K3:	0,07947	640	0,1	400	0,9	0,2
	K4:	0,35	6400	0,4	0	6,62	0,45
PLA+0,5CNT	K1:	0,5465	540	0,2	220	3,1	0,25
	K2:	0,0037	-1000	0,3	38727	4,14	0,7
	K3:	0,14988	640	0,1	400	0,9	0,2
	K4:	0,3	7500	0,37	0	6,4	0,28
PLA+0,75CNT	K1:	0,4697	540	0,2	240	3,3	0,15
	K2:	0,0055	-1000	0,3	43727	4,3	0,55
	K3:	0,22481	640	0,1	400	0,9	0,2
	K4:	0,3	6100	0,37	0	5	0,28
PLA+1CNT	K1:	0,3929	540	0,2	240	3,3	0,15
	K2:	0,0073	-1000	0,3	40727	4,3	0,55
	K3:	0,29975	640	0,1	400	0,9	0,2
	K4:	0,3	5800	0,35	0	5	0,28



1. ábra: A tiszta PLA és a nanokompozitok szakítógörbéire illesztett szálköteg-modell, a) PLA, b) PLA+0,25CNT, c) PLA+0,5CNT, d) PLA+0,75CNT, e) PLA+1CNT



◁ 2. ábra: A csak szénszálas PLA és a hibridkompozitok szakítógörbéire illesztett szálköteg-modell, a) PLA+30CF, b) PLA+30CF+0,25CNT, c) PLA+30CF+0,5CNT, d) PLA+30CF+0,75CNT, e) PLA+30CF+1CNT

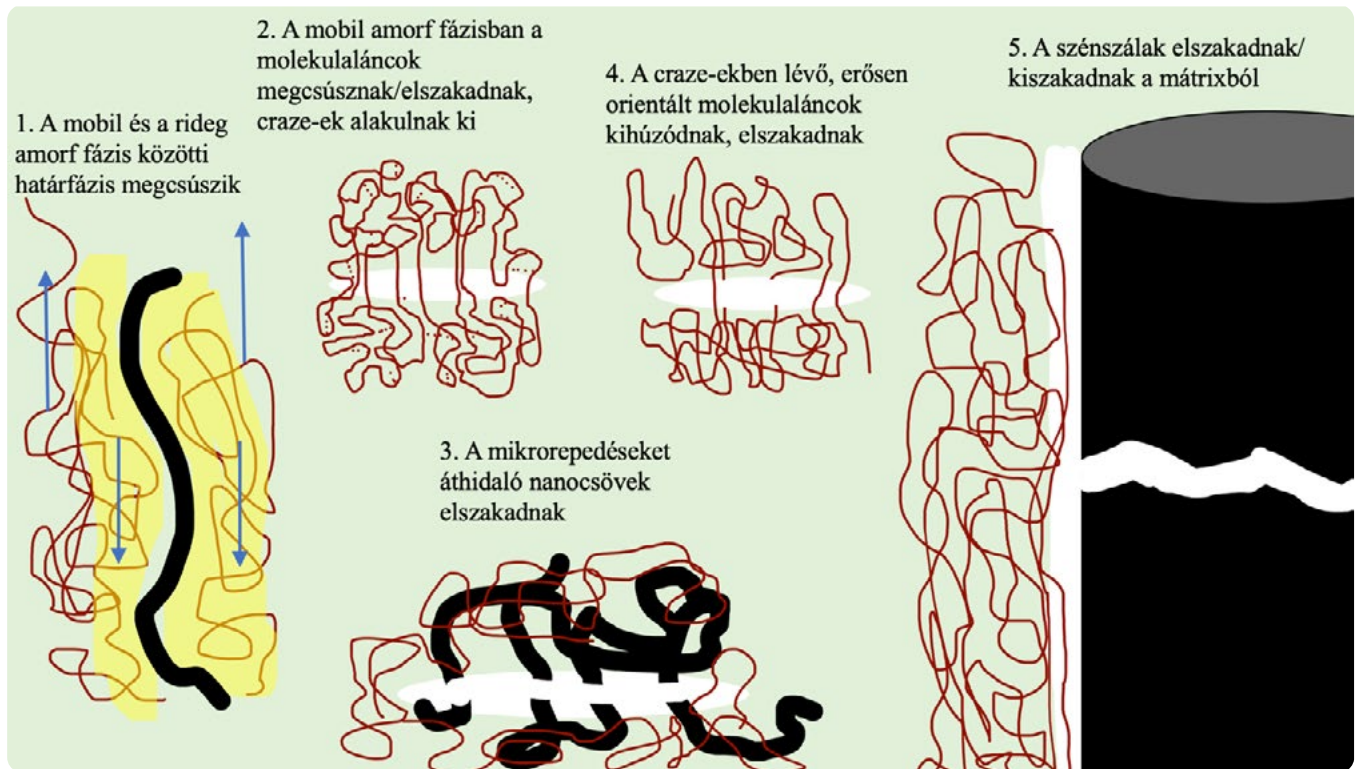
5. táblázat: A tiszta PLA, illetve a nanokompozitok szálkötegmodell paraméterei

Anyag	Köteg	p	a	b	c	E(L)	D(L)
PLA+30CF	K1:	0,4557	840	0,5	700	0,6	0,17
	K2:	0	-1000	0,3	76727	0,3	0,1
	K3:	0,33882	840	0,3	750	0,3	0,3
	K5:	0,20553	0	0	12868	1,1	0,23
PLA+30CF+0,25CNT	K1:	0,4538	540	0,2	950	1,2	0,25
	K2:	0,0018	-1000	0,3	44727	1,65	0,1
	K3:	0,33882	640	0,1	1500	0,6	0,2
	K5:	0,20553	0	0	10868	1,55	0,09
PLA+30CF+0,5CNT	K1:	0,377	540	0,2	950	1,2	0,25
	K2:	0,0037	-1000	0,3	44727	1,7	0,1
	K3:	0,41376	640	0,1	1200	0,6	0,2
	K5:	0,20553	0	0	9868	1,45	0,1
PLA+30CF+0,75CNT	K1:	0,3003	540	0,2	650	1,4	0,25
	K2:	0,0055	-1000	0,3	44727	1,7	0,1
	K3:	0,4887	640	0,1	1000	0,7	0,2
	K5:	0,20553	0	0	9268	1,6	0,1

Anyag	Köteg	p	a	b	c	E(L)	D(L)
PLA+30CF+1CNT	K1:	0,2235	540	0,2	650	1,5	0,25
	K2:	0,0073	-1000	0,3	44727	1,9	0,1
	K3:	0,56363	640	0,1	1000	0,7	0,2
	K5:	0,20553	0	0	8268	1,75	0,1

mobil amorftól való elválása következik be, majd a mobil amorf fázis molekulái szakadnak el vagy csúsznak meg, ezután a szénszálak szakadnak el vagy szakadnak ki a mátrixból, végül pedig a nanocsövek szakadnak el.

A modellezés alapján megállapítható, hogy a rideg amorf fázis elsősorban a szakítógörbe kezdeti merevedését növeli meg, míg a nanocsövek hatására a tönkremeneteli folyamat lelassul és a végső tönkremenetel nagyobb deformációknál következik be.



△ 3. ábra: A tönkremenetel feltételezett folyamata

## 4. ÖSSZEFOGLALÁS

Kutatásunk során hőre lágyuló, amorf PLA mátrixú, szénszállal és szén nanocsővel erősített nano- és hibridkompozitok húzási tulajdonságait modelleztük szálkötegcella-modell segítségével. A szakirodalomban jellemzően fellelhető alkalmazásoktól eltérően, a modell felállításához szükséges paramétereket a vizsgált minták szerkezetének kísérleti úton meghatározott jellemzőihez kötöttük.

Ezen paraméterek ismeretében modellgörbékét illesztettünk az egyes minták átlagolt szakítógörbéire. A modell és a szakítógörbe összehasonlítására, továbbá az illeszkedés jellemzésére a relatív átlagos négyzetes hiba értéke szolgált, amelynek 3,16%-5,93% közötti értéke alapján a modellgörbék minden esetben kellő pontossággal írták le a minták átlagolt szakítógörbéit.

Az illesztett szálköteg-modellek információt adtak az egyes fázisok mechanikai viselkedésben betöltött szerepéről is. A rideg amorf fázis elsősorban a szakítógörbék kezdeti meredekségét növelte meg, ami különösen a hibridkompozitokban, nagy rideg amorf részarány esetén volt jelentős. A nanocsövek jelenlétében általában növekedett mind a mobil amorf, mind a nanocső fázisokat reprezentáló kötegek szakadási nyúlás értéke, a nanocső tartalom hatása különösen az alapvetően ridegen viselkedő szál-erősített kompozitok lassabb és elnyújtottabb tönkremenetelében mutatkozott meg.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-5 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával, valamint az MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

### IRODALOMJEGYZÉK

- [1] Murariu, M.; Dubois, P.: PLA composites: From production to properties, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 107, 17–46 (2016).
- [2] Zhou, Y.; Lei, L.; Yang, B.; Li, J.; Ren, J.: Preparation and characterization of polylactic acid (PLA) carbon nanotube nanocomposites, *Polymer Testing*, 68, 34–38 (2018).
- [3] Chazot, C. A. C.; Hart, A. J.: Understanding and control of interactions between carbon nanotubes and polymers for manufacturing of high-performance composite materials, *Composites Science and Technology*, 183, 107795 (2019).
- [4] Petrényi, R.; Almásy, L.; Mészáros, L.: Investigation of the interphase structure in polyamide 6–matrix, multi-scale composites, *Composites Science and Technology*, 225, 109489 (2022).
- [5] Vas, L. M.: Idealizált statisztikus szálköteg-cellák és alkalmazásuk, *GlobeEdit, OmniScriptum GmbH & Co. KG, Saarbrücken, Deutschland; Beau Bassin, Mauritius; ISBN ISBN 978-620-2-48604-0*
- [6] Chen, H.; Cebe, P.: Investigation of the rigid amorphous fraction in Nylon-6, *Journal of Thermal Analysis Calorimetry*, 89 (2007).
- [7] Vas, L. M.; Rácz, Z.: Modeling and Testing the Fracture Process of Impregnated Carbon-fiber Roving Specimens During Bending: Part I – Fiber Bundle Model, *Journal of Composite Materials*, 38, 1757–1785 (2004).
- [8] Virág, Á. D.; Kara, Y.; Vas, L. M.; Molnár, K.: Single Polymer Composites Made of Melt-blown PP Mats and the Modelling of the Uniaxial Tensile Behaviour by the Fibre Bundle Cells Method, *Fibers and Polymers* (2021).
- [9] Vas, L. M.; Kocsis, Z.; Czigány, T.; Tamás, P.; Romhány, G.: Novel evaluation method of acoustic emission data based on statistical fiber bundle cells, *Journal of Composite Materials*, 53, 2429–2446 (2019).
- [10] Van Krevelen, D. W.; Te Nijenhuis, K.: Chapter 13 – Mechanical Properties of Solid Polymers, in: D. W. Van Krevelen, K.B.T.-P. of P. (Fourth E., Te Nijenhuis (Eds.), Elsevier, Amsterdam, 383–503 (2009).
- [11] Rosato, D.; Rosato, D.: 3 - DESIGN PARAMETER, in: D. Rosato, D.B.T.-PE.PD. Rosato (Eds.), Elsevier Science, Amsterdam, 161–197 (2003).