مجله سنجش و ایمنی پرتو، جلد ۸، شمارهٔ ٤، ویژه‌نامه پرتوهای یون‌ساز، ۱۳۹۹، صفحه ۲۹۵-۲۹۸
پنجمین کنفرانس ملی سنجش و ایمنی پرتوهای یون‌ساز و غیریون‌ساز (مهرماه ۱۳۹۷)
تاریخ دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۰٦/۰۱، تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۷/۰۷/۰۱

تعیین آستانه گذر الکتریکی دزیمتر مبتنی بر نانوکامپوزیت پلی استایرن-اکسید گرافن به روش‌های تجربی و شبیه‌سازی

آرمین مسیبی، شهریار ملکی* و فرهود ضیائی

پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران، ایران.
*تهران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها، کدپستی: ۳٤۸٦-۱۱۳٦٥
پست‌الکترونیکی: smaleki@aeoi.org.ir

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 دزیمترهای تابشی گاما مبتنی بر ماده نانوکامپوزیت پلیمر-نانو ساختارهای کربنی ارائه نموده‌اند. در این تحقیق، در ابتدا آستانه گذر الکتریکی نانوکامپوزیت پلی استایرن-اکسید گرافن(PS/GO) در کسرهای وزنی مختلف به روش المان محدود شبیه‌سازی شد. سپس، در مرحله تجربی، نانوکامپوزیت‌های مختلف در درصدهای وزنی مختلف شامل ۰٫۰۵، ۰٫۱، ۰٫۵، ۱، ۲، ۳ ، ۵ و ۸ 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 شبیه‌سازی المان محدود و تجربی با یکدیگر مقایسه شد که مقدار آن برابر ۲٫۵ درصد وزنی برآورد گردید. نتایج این پژوهش نشان داد که روش المان محدود ضمن هم‌خوانی قابل قبول با نتایج تجربی، یک ابزار قدرتمند در تعیین خواص الکتریکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری با اهداف دزیمتری به شمار می‌رود.

کلید واژگان: نانوکامپوزیت، پلی استایرن، نانوساختارهای کربنی، آستانه گذر الکتریکی، هدایت الکتریکی.

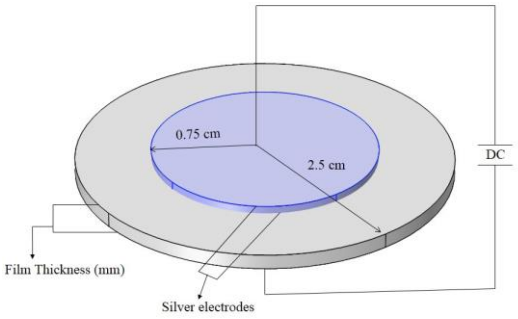
۱. مقدمه

آشکارسازی و دزیمتری 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 دستخوش تغییر شده و با توجه به کاربردهای فراوان نانوکامپوزیت‌ها در زمینه‌های مختلفی از قبیل سلول‌های خورشیدی، دستگاه‌های آنتی‌استاتیک، حفاظ‌سازی امواج الکترومغناطیس و تابش‌های یون‌ساز، سنسورهای پیزوالکتریک، سنسورهای تابشی و دزیمتری، 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 دزیمتری را دارا هستند. مواد نانوساختار کربنی نظیر گرافن به خاطر نسبت سطح به حجم بالا، پس از ترکیب با پلیمرها در کسر وزنی خاصی موسوم به آستانه گذر الکتریکی[1] (EPT)، از طریق تشکیل نانوکامپوزیت پلیمر-گرافن، منجر به افزایش چند مرتبه‌ای رسانندگی الکتریکی پلیمرها می‌شوند. فرآیند رسانش الکترون در نانوکامپوزیت پلیمر-گرافن اصولاً از سه طریق صورت می‌گیرد: رسانش ذاتی نانوصفحات گرافن، انتقال از طریق تماس مستقیم نانوصفحات گرافن با یک‌دیگر، رسانندگی از طریق تونل‌زنی[2] یا ترابرد جهشی[3] الکترون‌ها بین نانوصفحات گرافن‌هایی 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 [۲-۱۱]. در این پژوهش، ابتدا با استفاده از نرم‌افزار کامسول به محاسبه آستانه گذر الکتریکی (EPT) نانوکامپوزیت PS/GO پرداخته می‌شود، سپس در فاز تجربی با بهره‌گیری از روش اختلاط محلولی به ساخت نانوکامپوزیت‌های مذکور خواهیم پرداخت. در نهایت اعتبارسنجی روش المان محدود در پیش‌بینی مقدار آستانه گذر نانوکامپوزیت پلی استایرن-نانو اکساید با نتایج تجربی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۲. روش کار

در ابتدا PS با گرید ۱۵۴۰ و چگالی $1{,}05\ g/cm^3$ از پتروشیمی تبریز به صورت گرانول تهیه شد. سپس GO با درصد خلوص بیش از ۹۹ % از شرکت US-Nano خریداری شده، تولوئن و دی کلرومتان به عنوان حلال‌های مناسب برای پلی استایرن و پخش‌کننده خوب برای گرافن از شرکت Merck آلمان تهیه شد و هم‌چنین به منظور ساخت الکترود روی فیلم نازک، چسب نقره از شرکت امریکاییChemtronics تهیه شد. در ابتدا GO در محلول دی کلرومتان پخش شده، با دستگاه همزن اولتراسونیک UP200H به مدت دو ساعت فراصوت‌دهی شد. هم‌زمان در ظرف دیگری PS به مدت ۳۰ دقیقه در محلول تولوئن، به کمک همزن مغناطیسی هم زده شد، تا این‌که کاملا در محلول حل 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 کاملا خارج شده، پس از آن نمونه‌های نهایی مطابق شکل‌های ۱ و ۲ ساخته شدند که به منظور اندازه‌گیری هدایت الکتریکی نمونه‌های مذکور توسط اهم‌متر، از چسب نقره به عنوان الکترود روی سطوح نمونه‌ها استفاده شد.



شکل۱- طراحی نانوکامپوزیت PS/GO به منظور دزیمتری.

شکل۲- نمایی از نانوکامپوزیت(۰٫۱ wt%) PS/GO ساخته شده به روش محلولی.

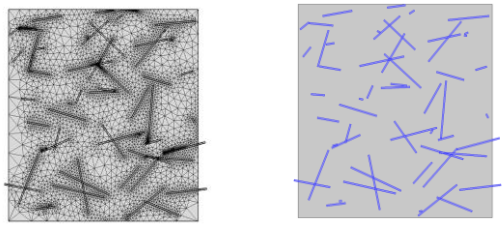
[1]Electrical Percolation Threshold
[2]Quantum Tunneling
[3]Hopping

۱،۲. روش شبیه‌سازی

به منظور شبیه‌سازی خواص الکتریکی نانوکامپوزیت PS/GO از نرم افزار COMSOL بر مبنای روش المان محدود بهره‌گیری شد. با استناد به ابعاد اکسید گرافن مطابق آنالیز SEM، در ابتدا در نرم‌افزار Matlab برنامه‌ای برای تولید اعداد تصادفی مربوط به نحوه توزیع نانو صفحات اکسیدگرافن در بستر پلیمر نوشته شد. شایان ذکر است که در توزیع صفحات اکسیدگرافن از ره‌یافت حجم مستثنی[4] بهره‌گیری شد. هم‌چنین از نظریه محیط مؤثر (EMT)[5] به منظور حل مسأله در مقیاس میکرو و تعمیم آن به ابعاد بزرگ‌تر استفاده شد. در ادامه اعداد تصادفی تولید شده به نرم افزار کامسول وارد شد و خواص دو ماده PS و GO مطابق جدول۱ در نظر گرفته شد. با توجه به شبیه‌سازی دو بعدی، در واقع سطح مقطع نانوصفحات اکسید گرافن، مطابق شکل۳-الف به صورت مستطیل‌هایی باریک به عرض ۳ nm و طول متغیر از ۳-۲۰۰ nm، یعنی سایز واقعی GOs مطابق SEM در نظر گرفته شد. در مرحله مش زدن، مطابق شکل۳-ب از مش Normal بهره گیری شد.

جدول۱- خواص فیزیکی مواد مورد استفاده در شبیه‌سازی [۱۴-۱۲].

ماده	ε_r	σ (S/m)	ρ(g/cm^3)
GO	۹۱۵	۲٫۵	۱
PS	۲٫۶	۱×۱۰$^{-۱۶}$	۱٫۰۵

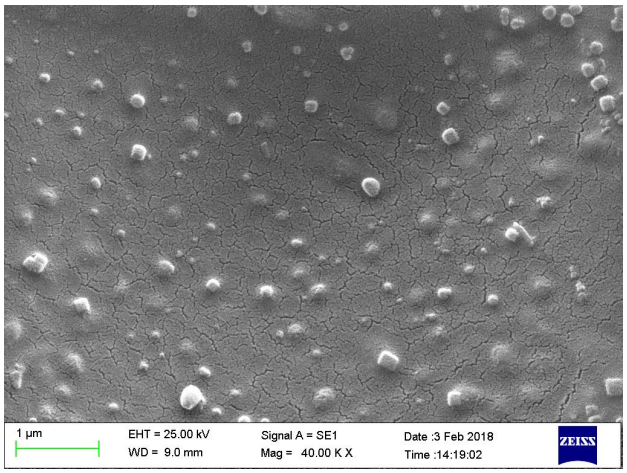


(ب) (الف)

شکل۳- نمایی از الف) مدل دو بعدی شبیه‌سازی اکسید گرافن در بستر پلیمر و ب) نحوه مِش زدن در هندسه مسأله.

۲،۲. روش تجربی

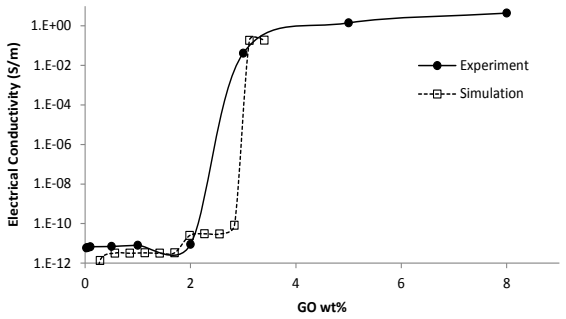
در مرحله تجربی، نانوکامپوزیت‌های مختلف در درصدهای وزنی ۰٫۰۵، ۰٫۱، ۰٫۵، ۱، ۲، ۳، ۵ و ۸ به روش اختلاط محلولی ساخته شد. نتایج SEM برای نمونه ٪ ۰٫۱ مطابق شکل٤ به تصویر کشیده شده است. مطابق شکل ابعاد تقریبی نانوصفحات اکسیدگرافن در بستر پلی استایرن حدود ۲۰۰nm × ۲۰۰ nm و ضخامت این ذرات مطابق مشخصات کاتالوگی در حدود ۳nm در نظر گرفته شد.



شکل۴- تصویر SEM مربوط به نانوکامپوزیت 0.1 wt% PS/GO.

۳. نتایج

در شکل۵، هدایت الکتریکی نمونه‌های نانوکامپوزیتی به دو روش تجربی و شبیه‌سازی به تصویر کشیده شده است. همان‌طوری که از شکل پیداست، مقدار آستانه گذر الکتریکی در دو حالت تجربی و شبیه‌سازی برابر ۲٫۵ درصد وزنی بدست آمده که توافق بسیار خوبی با یکدیگر نشان می دهند.



شکل۵- هدایت الکتریکی نمونه‌های نانوکامپوزیتی PS/GO به دو روش تجربی و شبیه‌سازی.

[4]Excluded Volume Approach
[5]Effective Medium Theory

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، نانوکامپوزیت پلی استایرن- نانواکسید گرافن (PS/GO) در کسرهای وزنی مختلف سنتز شد. هدایت الکتریکی این نمونه‌ها در دمای اتاق اندازه‌گیری شد. در ادامه با استفاده از روش المان محدود، آستانه گذر الکتریکی نانوکامپوزیت‌های مذکور محاسبه شده و با مقدار تجربی مقایسه گردید. مقدار آستانه گذر الکتریکی برای نانوکامپوزیت PS/GO در دو فاز تجربی و نظری برابر ۲/۵ wt% بدست آمد که نتایج شبیه‌سازی و تجربی هم‌خوانی خوبی با یک‌دیگر نشان دادند و بر معتبر بودن روش المان محدود در پیش بینی خواص الکتریکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری با اهداف دزیمتری صحه‌گذاری می‌کند.

۷. مراجع

[1] W. S. Bao, S. A. Meguid, Z. H. Zhu, Y. Pan and G. J. Wengc. Mechanics of Materials, 46 (2012) 129-138.

[2] S. Feizi, S. Malekie, R. Rahighi, A. Tayyebi and F. Ziaie. Evaluation of dosimetric characteristics of graphene oxide/PVC nanocomposite for gamma radiation applications. Radiochimica Acta, 105 (2017) 161-170.

[3] S. Malekie, and 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.

[4] S. Malekie, and F. Ziaie. A two-dimensional simulation to predict the electrical behavior of carbon nanotube/polymer composites. Journal of Polymer Engineering, 37 **(**2017) 205-210.

[5] S. Malekie, F. Ziaie and 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, S. Feizi and 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.

[7] S. Malekie, F. Ziaie, and M.A. Naeini. Simulation of polycarbonate-CNT nanocomposite dosimeter based on electrical characteristics. Kerntechnik, 81 **(**2016) 647-650.

[8] A. Mosayebi, S. Malekie, and F. Ziaie. A feasibility study of polystyrene/CNT nano-composite as a dosimeter for diagnostic and therapeutic purposes. Journal of Instrumentation, 12 (2017) P05012.

[۹] سلیمی احمدآباد، فائزه. ملکی، شهریار. ضیائی، فرهود. مطالعه اثر توزیع فاز سخت بر رسانندگی الکتریکی کامپوزیت پلیمر- نانو لوله کربن به عنوان دزیمتر پرتو با بهره گیری از روش مونت کارلو. مجله سنجش و ایمنی پرتو، ۳ (٤)، (۱۳۹۵) ۵۵- ٤۹.

[۱۰] ملکی، شهریار. ضیائی، فرهود. مطالعه خواص الکتریکی یک دزیمتر جدید بر پایه نانو کامپوزیت پلیمر-نانو لوله کربن. مجله سنجش و ایمنی پرتو، ۲ (۳)، (۱۳۹۳) ۲۰-۱۷.

[۱۱] ملکی، شهریار. ضیائی، فرهود. مجتدزاده لاریجانی، مجید. شبیه‌سازی یک دزیمتر جدید بر پایه ویژگی های الکتریکی کامپوزیت پلی متیل متاکریلات-نانولوله‌کربن. مجله علوم و فنون هسته‌ای، ۷۹، (۱۳۹٦) ٦۲-۵۳.

[12] W.D. Callister. Fundamentals of Materials Science and Engineering. fifth ed. John Wiley & Sons Inc, The University of Utah, (2001).

[13] J. Fang, W.G. Vandenberghe and M.V. Fischetti. Microscopic dielectric permittivities of graphene nanoribbons and graphene. Physical Review B, 94 (2016) 045318.

[14] X. Hong, W. Yu and D. Chung. Electric permittivity of reduced graphite oxide. Carbon, 111 (2017) 182-190.