

# تحلیل غیرخطی عددی پاسخ محرکی کنسول کامپوزیت فلزپلیمریونی با در نظر گرفتن کوپل میدان‌های الکتریکی، شیمیایی و مکانیکی

محمدجواد محمودی<sup>۱\*</sup>، امیرحسین تقوی گنجی<sup>۲</sup>

۱- دانشکده مهندسی عمران، آب و محیط زیست، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران، mj\_mahmoudi@sbu.ac.ir

۲- دانشکده مهندسی عمران و محیط زیست، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران، a.taghaviganji@aut.ac.ir

## چکیده

محرک‌های کامپوزیت فلزپلیمریونی نوارهای ساندویچی بسیار نازک با یک پلیمر الکترواکتیو در وسط و دو الکتروود فلزی در طرفین هستند. اعمال ولتاژ به الکتروودها منجر به مهاجرت یونی در پلیمر و تغییر غلظت یون در ضخامت نوار می‌شود و با کوپل میدان‌های شیمیایی، الکتریکی و مکانیکی، تغییر شکل در نوار وجود می‌آید. در این مقاله، تحلیل غیرخطی کوپل الکتروشیمی مکانیکی پاسخ محرکی کنسول کامپوزیت فلزپلیمریونی انجام می‌گیرد. از کوپل میدان‌های شیمیایی و الکتریکی، معادله پاسخ الکتروشیمیایی با روش تفاضل محدود، و بهره‌گیری از روش نیوتن-رافسون حل می‌شود. با نوشتن معادله انتقال حلال و پاسخ الکتروشیمیایی، نرخ کرنش ویژه، و نرخ تغییرات لنگر خمشی محرک و در ادامه پاسخ جابجایی انتهای تیر با استخراج میزان آبیوشی در لایه مرزی کاند و آند بدست می‌آید. نتایج بدست آمده با مطالعات پیشین در دسترس مورد مقایسه و اعتبار سنجی قرار می‌گیرد. نتایج تفاسی بین پاسخ محرک و تحریک الکتریکی را بطور معقول نشان می‌دهد و تایید می‌کند که مدل ارائه شده پیش‌بینی پاسخ سریع نوار را فراهم می‌کند. تحت تحریک یک ولت، خیز حداکثر و پسماند انتهای کنسول بترتیب به اندازه ۰/۱۱ و ۰/۰۴ طول نوار بدست آمد، و غلظت کاتیون در ضخامت میانی نوار به اندازه ۱۱۵۰ مول بر مترمکعب محاسبه شد.

## کلمات کلیدی

کامپوزیت فلزپلیمریونی، پاسخ محرکی، مدل الکتروشیمی مکانیکی، روش تفاضل محدود، روش نیوتن-رافسون.

کامپوزیت‌های فلز پلیمر یونی (آی‌پی‌ام‌سی)<sup>۱</sup> از دسته مواد پلیمری الکترواکتیو محسوب می‌شوند که در کاربردهای پزشکی، روباتیک، ماشین‌های میکروالکترونیک سبک، و وسایل سرگرمی استفاده شده‌اند [۱-۶]. مواد پلیمری الکترواکتیو خود در دسته ژل‌های پلیمری الکترواکتیو قرار می‌گیرند. نافیون به کار رفته به عنوان پلیمر آی‌پی‌ام‌سی در مرجع [۲] به عنوان ژلی با ظرفیت حلال کم در نظر گرفته شده است. این ژل با نام ژل پلیمری یونی شناخته می‌شود، و به همین دلیل، مبانی تحلیل آی‌پی‌ام‌سی کارهای انجام شده بر روی این ژل‌ها است [۳]. آی‌پی‌ام‌سی تنها حسگر پلیمری است که تحت تنش ناشی از خمش، در الکترودهای خود به عنوان یک پلیمر الکترواکتیو بار الکتریکی قابل اندازه‌گیری تولید می‌کند [۴]. بررسی محققین در زمینه ساز و کار حسگرها و محرک‌هایی که از جنس آی‌پی‌ام‌سی ساخته شده‌اند، نشان داده است که در این حالت، با یک محرک که می‌تواند جابجایی‌ها و نیروهای بزرگتر تولید کند و یک حسگر که حساسیت بیشتری نسبت به اعمال تغییر شکل دارد، سر و کار دارند [۵]. بهبود در خصوصیات حسگری و محرکی مواد آی‌پی‌ام‌سی در گرو چگونگی اندازه‌گیری ویژگی‌های حسگری و محرکی این ماده و نیز وابسته به چگونگی مدل کردن این ماده است، چرا که چگونگی مدل‌سازی به فهمی از مکانیزم‌های حسگری و محرکی این ماده منجر می‌شود [۷-۱۲].

محرک‌های آی‌پی‌ام‌سی به دلیل ویژگی کوپل الکتروشیمیایی-مکانیکی آنها با دیدگاه‌ها و روش‌ها، و در کاربردهای متنوع مورد بررسی قرار گرفته است. مدل‌های مختلفی برای درک و پیش‌بینی رفتار محرک‌های آی‌پی‌ام‌سی پیشنهاد شده است. لیو و همکاران [۱۳] برنامه‌ای برای تجزیه و تحلیل همبستگی تصویر دیجیتال<sup>۲</sup> برای مطالعه پاسخ نوارهای کنسول آی‌پی‌ام‌سی تحت تحریک‌های جریان متناوب مدون کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که گستره خیز نوار کنسول آی‌پی‌ام‌سی بصورت خطی با افزایش ولتاژ تحریک افزایش می‌یابد. همچنین، تراور و همکاران [۱۴] دینامیک و کنترل یک ربات شناگر یوکاریوتی تاژک مصنوعی که قسمت‌هایی از آن از آی‌پی‌ام‌سی ساخته شده، را بررسی کرده و یک مدل دینامیکی بر اساس تجزیه و تحلیل پاسخ فرکانسی ارائه کردند. آنها با تحلیل این مدل نتیجه گرفتند که در فرکانس‌های پایین، جابجایی نوک یا هر نقطه محرک کامپوزیت فلز پلیمریونی با دینامیک یکسان تعیین می‌شود. سامپور و همکاران [۱۵] نیز یک مدل ویسکوالاستیک دینامیکی غیرخطی برای محرک‌های آی‌پی‌ام‌سی بر اساس معادله ساختاری ویسکوالاستیک و رویکرد متغیر مبتنی بر انرژی ارائه دادند. تابع انتقال بدست آمده از مدل پیشنهادی آنها، پیش‌بینی پاسخ فرکانسی را در مقایسه با نتایج تجربی فراهم می‌کند. این مدل همچنین می‌تواند برای به دست آوردن پاسخ مکانیکی و تحلیل ارتعاش سنسورهای آی‌پی‌ام‌سی مورد استفاده قرار گیرد. رائو و همکاران [۱۶] تأثیر سطح مشترک الکترو/بستر را بر عملکرد محرک‌های آی‌پی‌ام‌سی مطالعه کردند، و یک استراتژی طراحی مینیمالیستی را بر اساس ریخت‌شناسی سطح مشترک دنداندار ماکروسکوپی پیشنهاد کردند. بر این اساس، نشان داده شد برخلاف آنچه که تصور می‌شد هرچه سطح مشترک الکترو و بستر بزرگتر باشد، لزوماً تغییر شکل بهتری مشاهده نمی‌شود، و در درجه اول به افزایش حجم برش و در نتیجه کاهش ممان اینرسی خمشی نسبت داده می‌شود. علاوه بر این، یک فرآیند ساخت متناظر ایجاد شد، که به طور تجربی تأیید کرد که کامپوزیت‌های فلز پلیمریونی با یک رابط دنداندار ماکروسکوپی فوق‌العاده ساده می‌تواند عملکرد الکترواکتیو با کارایی بالا را ارائه دهد و یک استراتژی طراحی مینیمالیستی از ساختارهای پلیمری الکترواکتیو یونی ارائه دهد. گوپتا و مترجی [۱۷] نیز یک مدل دینامیکی الکترومکانیکی را برای یک باله روبانی بیومیمتیک بر اساس پره موج‌دار فعال شده توسط ماده آی‌پی‌ام‌سی پیشنهاد کردند. با اتصالات باله‌های گیرنده با لغزنده‌هایی که به صورت سری به هم متصل می‌شوند، ربات ماهی قادر به ایجاد شکل موج‌های دلخواه است.

در مدل‌های هیدرولیکی ارائه شده برای آی‌پی‌ام‌سی، مهاجرت آب بین توده‌های یونی در پلیمر علت تورم ماده و در نتیجه خمش آن است. اعمال ولتاژ باعث مهاجرت اجزای یونی می‌شود. اولین پدیده هیدرولیکی، حرکت مولکول‌های آب به همراه یون‌هایی که سخت در کنار خود گرفته‌اند (اثر الکترواسمزی)، می‌باشد. اثر هیدرولیکی دیگر، اثرات پتانسیل غلظتی است که ناشی از مهاجرت اولیه یون‌ها

<sup>1</sup> Ionic Polymer-Metal Composites (IPMCs)

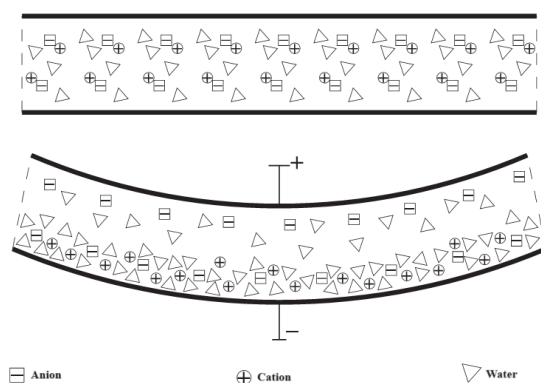
<sup>2</sup> Digital Image Correlation

است [۴]. در این حوزه، مرجع [۱۸] مدلی را معرفی کرد که گرادپان فشار آب را با میدان الکتریکی کلی توسط نیروهای الکتروترمودینامیکی به هم مربوط می‌گرداند. این نیروها تولید شاری از یون و آب می‌کنند. در این مدل‌سازی، معادلات جفت‌شده بر پایه روابط برگشت‌پذیر ترمودینامیکی برای تبیین رفتار آی‌پی‌ام‌سی ارائه شد. این مدل توصیفی از مبانی و اصول مبدلی و محرکی موجود در ذات آی‌پی‌ام‌سی با تعریف آن در رژیم خطی و شرایطی استاتیکی بود که بر اساس روابط آنسجر پایه‌گذاری شده بود. آساکا و اگورو [۱۹] نیز مدلی را ارائه کردند که در آن جریان آب ایجاد شده توسط گرادپان فشار و جریان الکترواسمزی باعث ایجاد تنش و تورم محرک می‌شود. همچنین، نعمت ناصر و لی [۶] مدلی را ارائه کردند که میدان الکتریکی و تغییر شکل الاستیک به همراه انتقال یون و آب، عامل خمش در آی‌پی‌ام‌سی می‌باشد. تاداگورا [۲۰] نیز مدلی برای رفتار محرکی این ماده بر اساس نظریه‌های شیمی-فیزیک ارائه کرد. علاوه بر این مدل‌های هیدرولیکی، نعمت ناصر مدلی هیبریدی را برای این ماده بررسی کرد که شامل اثرات الکترواستاتیکی، اسمزی و الاستیک بود، و نتایج مدل را با نتایج حاصل از کار آزمایشگاهی خودش مورد مقایسه قرار داد [۹].

در این مقاله، تحلیل عددی کوپل الکتروشیمی مکانیکی پاسخ سریع زمانی یک نوار کامپوزیت آی‌پی‌ام‌سی صورت می‌گیرد. این مدل با کوپل کردن میدان شیمیایی و میدان الکترواستاتیکی منجر به معادله توزیع غلظت یون و آب پس از اعمال ولتاژ الکتریکی می‌شود. ابتدا میدان‌ها شناخته شده و با یکدیگر ترکیب می‌شوند، سپس پاسخ آن وارد میدان مکانیکی شده، و خواص محرکی ماده شناسایی می‌شود. معادله توزیع یون در حوزه مکان و زمان با روش تفاضل محدود و به کمک روش غیرخطی نیوتن-رافسون حل می‌شود. توزیع غلظت برحسب میزان اختلاف پتانسیل بین الکترودها نوشته می‌شود که منجر به کرنش ویژه این ماده می‌شود. سپس، با استفاده از روابط تحلیلی بین نرخ کرنش ویژه و لنگر خمشی بر حسب زمان، پاسخ سریع کنسول آی‌پی‌ام‌سی بدست می‌آید. نتایج با تحقیقات پیشین در دسترس و همچنین شبیه‌سازی اجزای محدود در نرم‌افزار کامسول انجام شده مقاله حاضر مورد راستی‌آزمایی قرار می‌گیرد. پیش‌بینی پاسخ سریع زمانی نوار کامپوزیت آی‌پی‌ام‌سی با استفاده از مدل‌سازی چندمقیاسی که در هر مقیاس با استفاده از تئوری‌های مربوطه از تحقیقات پیشین مرور، تدوین و انسجام یافته، نوآوری اصلی این مقاله را شامل می‌شود. همچنین دستیابی به روش حلی آسان و سریع در پیش‌بینی پاسخ نوار کنسول کامپوزیت فلز پلیمر یونی یکی از دلایل ادامه تحقیق است. خیز پسماند نرمال شده انتهای نوار آی‌پی‌ام‌سی تحت پتانسیل یک ولت با استفاده از حل تفاضل محدود ارائه شده  $0.04$  بدست آمده که این مقدار با نتایج تجربی کمتر از  $10$  درصد تفاوت دارد. همچنین تغییرات غلظت کاتیون در ضخامت نوار، در وسط نوار به اندازه  $1150$  مول بر متر مکعب محاسبه شد.

## ۲- مدل‌سازی و تحلیل عددی

شکل ۱ بطور شماتیک، پدیده‌های ریزساختاری است که منجر به ایجاد خمش در آی‌پی‌ام‌سی می‌شود، را نشان می‌دهد. تغییرات در غلظت یون بواسطه اعمال ولتاژ در ضخامت نوار آی‌پی‌ام‌سی، باعث بر هم خوردن تعادل الکتریکی در توده‌های یونی، و منجر به ایجاد نیروهای الکترواستاتیکی در توده‌های یونی می‌شود که به صورت فشار داخلی در یونومر، مولکول‌های آب را جابجا می‌کند [۱].



شکل ۱: شماتیک پدیده‌های ریزساختاری که باعث خمش در نوار آی‌پی‌ام‌سی می‌شود [۱].

Fig. 1. Schematic of the microstructural phenomena leading to bending in the IPMC strip [1].

برای توضیح ریاضی این پدیده‌ها نیاز به کوپل کردن میدان‌های الکتریکی، شیمیایی و مکانیکی است.

### ۲-۱- میدان شیمیایی

میدان شیمیایی برای کاتیون بیانگر بقاء اجزای شیمیایی است، و به واسطه ثابت بودن آنیون، تنها نیاز به بررسی این میدان برای کاتیون و مولکول‌های آب است. شار کاتیون  $J^+$  به علت تغییر غلظت موضعی  $C^+$  در زمان  $t$  مطابق معادله (۱) تغییر می‌کند [۲۱].

$$\dot{C}^+ + \nabla \cdot J^+ = 0 \quad (1)$$

غلظت موضعی  $C^+$  به صورت مول کاتیون بر حجم آی‌پی‌ام‌سی آبیوشی تعریف می‌شود. شار کاتیون به علت وجود گرادیان پتانسیل الکتروشیمیایی  $\mu^+$  و جریان جابجایی سیال مطابق معادله (۲) بیان می‌شود [۲۱].

$$J^+ = -\frac{D^+ C^+}{RT} \frac{\partial \mu^+}{\partial x} + C^+ v \quad (2)$$

که  $R$  و  $T$  به ترتیب ثابت گازها و دما هستند.  $D^+$  ثابت نفوذ و  $\mu^+$  پتانسیل الکتروشیمیایی است، و  $v$  سرعت سیال را نشان می‌دهد. به دلیل کوچک بودن سرعت، جمله جابجایی حذف می‌شود [۲۱-۲۳].

میدان شیمیایی برای حلال علاوه بر کاتیون تنها حلال (در اینجا آب) می‌تواند در یونومر حرکت کند. با فرض چگالی ثابت  $\rho_L$  برای حلال، قانون بقا جرم و معادله پیوستگی به صورت معادله (۳) نوشته می‌شود:

$$\frac{\dot{w}}{w+1} + w \nabla \cdot v = 0 \quad (3)$$

که در آن،  $w$  میزان آبیوشی است، و برابر حجم موضعی آب جذب شده بر حجم آی‌پی‌ام‌سی خشک است.

### ۲-۲- میدان الکتریکی

میدان الکتریکی بیانگر برهم‌کنش پتانسیل الکتریکی  $\phi$  (که کاربر به الکترودهای آی‌پی‌ام‌سی وارد می‌کند) و ذرات باردار آنیون ثابت و کاتیون متحرک است. معادله (۴) مربوط به این میدان به معادله پواسون معروف است [۲۳].

$$\Delta \phi = -\frac{F}{\kappa} (z^+ C^+ - C^-) \quad (4)$$

که در آن،  $z^+$  ظرفیت الکتریکی یون مثبت است. در حالی که، ظرفیت الکتریکی آنیون منفی یک است و غلظت  $C^-$  به علت ثابت بودن آنیون با زمان و مکان تغییر نمی‌کند و تنها  $C^+$  و  $\phi$  متغیر هستند.  $F$  ثابت فارادی و  $\kappa$  ثابت دی‌الکتریک معادل ماده یونومر است.

### ۲-۳- میدان مکانیکی

میدان مکانیکی بیانگر معادله نیروهایی است که به ماده وارد می‌شود. بر اساس مدل توده یونی، نیروها بر سطح توده وارد می‌شود، و حجم توده را کم یا زیاد می‌کنند و با ایجاد تغییر شکل با نیروی خارجی وارد بر کامپوزیت به تعادل می‌رسد این نیروها به عنوان فشار توده  $p_{Cluster}$  شناخته می‌شود [۲۴]. این فشار با در نظر گرفتن ریخت‌شناسی توده‌ها و نیروهای الکترواستاتیکی توده در بخش‌های بعدی به دست می‌آید.

### ۲-۴- تلفیق میدان‌های موثر در مدل

این میدان‌ها تنها در صورت کوپل شدن قابل حل هستند چرا که حل یکی از آن‌ها بستگی به حل بقیه میدان‌ها دارد. برای استخراج  $C^+$  از حل همزمان میدان شیمیایی معادله (۱) و (۲)، و برای بدست آوردن میدان الکتریکی، معادله (۴) استفاده می‌شود، و البته پتانسیل شیمیایی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu^+ = \mu_0^+ + RT \ln(k^+ C^+) + z^+ \phi F \quad (5)$$

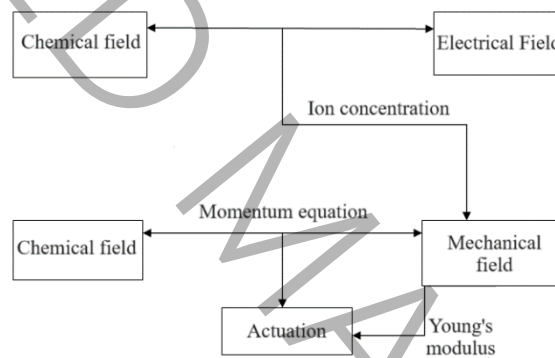
که دو جمله اول سمت راست تساوی، پتانسیل شیمیایی و جمله آخر پتانسیل الکتریکی است.  $\mu_0^+$  پتانسیل شیمیایی استاندارد است.  $k^+$  ضریب بی بعد اکتیویته است که برای حالت ایده آل برابر ۱ اتخاذ می شود [۲۱]. با حل سیستم معادلات بیان شده غلظت یون در ضخامت نوار به دست می آید.

برای به دست آوردن میزان آبیوشی رابطه ای نیاز است که فشار توده را در نظر داشته باشد. برای این منظور از معادله منتم (معادله اوپلر) بصورت معادله (۶) استفاده می شود [۲۳]:

$$\dot{v} + (v \cdot \nabla)v + \frac{1}{\rho_L} \nabla p_{cluster} = 0 \quad (6)$$

فشار توده روابطی بر حسب میزان آبیوشی دارد که بسط داده خواهد شد. معادله (۶) با معادله (۳) کوپل است و با حل همزمان آن ها میزان آبیوشی  $w$  در زمان و مکان به دست خواهد آمد.

در شکل ۲، مراحل مدل سازی و کوپل میدان های شیمیایی، الکتریکی و مکانیکی نشان داده شده است. چنانچه در این شکل مشاهده می شود، معادلات ابتدا در میدان های شیمیایی و الکتریکی همزمان بدست آمده، سپس معادلات این دو میدان بر حسب غلظت یون نوشته شده و با هم حل می شوند. جواب بدست آمده از این دو رابطه به میدان شیمیایی وارد می شود. با نوشتن معادلات در میدان های مکانیکی و شیمیایی و پیوند این دو معادله و با استفاده از مشخصات مصالح خواص عملگری ماده بدست می آید.

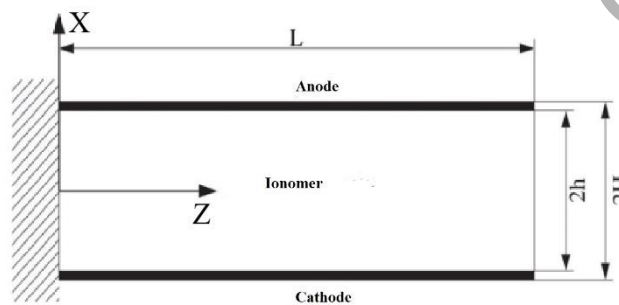


شکل ۲: مراحل مدل سازی و حل محرکی آی پی ام سی

Fig. 2. The IPMC actuation modeling and solution steps

### ۲-۵- حل تفاضل محدود معادلات کوپل غلظت یون

در شکل ۳، طرح شماتیک یک کنسول آی پی ام سی شامل بخش های الکترودها و پلیمر، به همراه دستگاه مختصات انتخابی جهت تحلیل نشان داده شده است. حوزه تحلیل مورد بررسی ضخامت تیر در راستای  $x$  می باشد.



شکل ۳: طرح شماتیک آی پی ام سی [۹]

Fig. 3. Schematic of the IPMC

با جایگذاری معادله (۵) در معادله (۲) و حذف جمله جابجایی، رابطه (۷) بدست می‌آید.

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{z D C F}{RT} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (7)$$

این رابطه در جهت ضخامت  $x$  نوشته شده است، و از نوشتن بالانویس + (به معنای کاتیون) نیز صرف نظر شده است. به علاوه، تغییرات در میدان پتانسیل الکتریکی  $\phi$  نیز توسط رابطه (۸) به میدان الکتریکی مربوط می‌شود [۶]:

$$E = -\frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (8)$$

که در آن،  $E$  میدان الکتریکی در ضخامت آی‌پی‌ام‌سی است. برای به دست آوردن غلظت یون در زمان و مکان از روش عددی تفاضل محدود استفاده می‌شود. بر اساس روش تفاضل محدود، گسسته‌سازی معادلات نرنست-پلانک (۱) و (۲) [۲۵] به صورت رابطه (۹) در می‌آیند:

$$J_j = -D \left[ \left( \frac{C_{j+1} - C_j}{\Delta x_j} \right) + z \left( \frac{C_{j+1} - C_j}{\Delta x_j} \right) \frac{F}{RT} \left( \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x_j} \right) \right] \quad (9)$$

$$C_j - C_j^0 = -\frac{\Delta t}{\left( \frac{\Delta x_j + \Delta x_{j-1}}{2} \right)} (J_j - J_{j-1})$$

که در آن  $\Delta x$  بیانگر بازه مکانی انتخاب شده برای گسسته‌سازی و  $z$  به صورت اندیس بیانگر شماره گره در مکان گسسته شده می‌باشد.  $C^0$  بیانگر غلظت کاتیون در زمان اولیه  $t - \Delta t$  از بازه زمانی است که با بالانویس 0 مشخص شده است. به این دلیل که به داخل و از خارج مرز هیچ شار وجود ندارد، شار گسسته شده در مرزها یعنی  $J_1$  و  $J_N$  برابر صفر قرار می‌گیرند. لازم به ذکر است  $N$  شماره گره آخر است. معادله پواسون گسسته شده (۴) نیز بشکل رابطه (۱۰) بیان می‌شود:

$$\left( \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x_j} \right) - \left( \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\Delta x_{j-1}} \right) = \left( \frac{\Delta x_j + \Delta x_{j-1}}{2} \right) \frac{F}{\kappa} (z C_j - C^+) \quad (10)$$

برای رابطه (۱۰) نیز، شرط مرزی پتانسیل الکتریکی وجود دارد. به این صورت که در مسئله بررسی شده در این مقاله، پتانسیل جریان مستقیم<sup>۱</sup> ثابت بین دو الکترود اعمال می‌شود. پس اگر فرض کنیم پتانسیل  $U_0$  به دو الکترود وارد می‌شود، شرایط مرزی در الکترودها به صورت رابطه (۱۱) در می‌آیند:

$$\phi_1 = -\frac{U_0}{2} \quad (11)$$

$$\phi_N = +\frac{U_0}{2}$$

به این معنی که در این گسسته‌سازی، شماره اندیس 1 و  $N$  به طور قراردادی بترتیب، آند و کاتد فرض می‌شود. برای  $N$  گره، مجموعاً  $N$  غلظت در گره‌ها و  $N-2$  پتانسیل در گره‌ها یعنی  $2N-2$  مجهول وجود دارد که برای حل آن، همین تعداد معادله در بازه‌های زمانی در ماتریسی ضمنی تشکیل می‌شود. به علت غیرخطی بودن معادلات از روش نیوتن-رافسون که سرعت همگرایی بیشتری نسبت به روش‌های مشابه دارد، استفاده می‌شود.

با اعمال شرایط مرزی و ترکیب معادلات (۲) و (۳)، دستگاه معادلات متناظر روش نیوتن-رافسون شامل معادلات زیر می‌شود:

<sup>1</sup> Direct Current (DC)

$$C_j - C_j^0 - \frac{D\Delta t}{\Delta x} \left\{ \frac{C_{j+1} - C_j}{\frac{\Delta x_{j+1} + \Delta x_j}{2}} - \frac{C_j - C_{j-1}}{\frac{\Delta x_j + \Delta x_{j-1}}{2}} \right. \quad 2 \leq j \leq N-1 \quad (12)$$

$$\left. - \frac{z}{2} \left[ (C_{j+1} + C_j) \left( \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\frac{\Delta x_{j+1} + \Delta x_j}{2}} \right) + (C_j + C_{j-1}) \left( \frac{\phi_j - \phi_{j01}}{\frac{\Delta x_j + \Delta x_{j-1}}{2}} \right) \right] \right\}$$

$$C_N - C_N^0 - \frac{D\Delta t}{\Delta x} \left\{ \frac{C_N - C_{N-1}}{\frac{\Delta x_N + \Delta x_{N-1}}{2}} - \frac{z}{2} \left[ (C_N + C_{N-1}) \left( \frac{\phi_N - \phi_{N-1}}{\frac{\Delta x_N + \Delta x_{N-1}}{2}} \right) \right] \right\} \quad j = N \quad (13)$$

$$C_1 - C_1^0 - \frac{D\Delta t}{\Delta x} \left\{ \frac{C_2 - C_1}{\frac{\Delta x_2 + \Delta x_1}{2}} + \frac{z}{2} \left[ (C_2 + C_1) \left( \frac{\phi_2 - \phi_1}{\frac{\Delta x_2 + \Delta x_1}{2}} \right) \right] \right\} \quad j = 1 \quad (14)$$

$$\left( \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x_j} \right) - \left( \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\Delta x_{j-1}} \right) \quad 2 \leq j \leq N-1$$

$$= \left( \frac{\Delta x_j + \Delta x_{j-1}}{2} \right) \frac{F}{\kappa} (zC_j - C^-) \quad (15)$$

$$\phi_1 = -\frac{U_0}{2} \quad j = 1$$

$$\phi_N = +\frac{U_0}{2} \quad j = N$$

برای گسسته‌سازی معادلات مربوط به توزیع حلال نیز به همین شیوه روابط (۳) و (۶) بر پایه روش تفاضل محدود گسسته می‌شوند:

$$\left( \frac{w_j + w_j^0}{\Delta t} \right) + w_j (1 + w_j) \frac{v_{j+1} - v_j}{\left( \frac{\Delta x_{j+1} + \Delta x_j}{2} \right)} = 0 \quad (16)$$

$$\left( \frac{v_j - v_j^0}{\Delta t} \right) + v_j \frac{v_{j+1} - v_j}{\left( \frac{\Delta x_{j+1} + \Delta x_j}{2} \right)} + \frac{1}{\rho_L} \frac{P_{j+1} - P_j}{\Delta x_j} = 0$$

برای شرایط مرزی نیز مجدداً، با توجه به اینکه به داخل و از خارج مرزها جریانی وارد یا خارج نمی‌شود، سرعت به صورت  $v_0 = v_N = 0$  قرار داده می‌شود، و برای دقیق شدن شرط مرزی در حل عددی،  $\Delta x_0$  و  $\Delta x_N$  برابر صفر قرار می‌گیرند. در واقع از روش گره مجازی<sup>۱</sup> برای حصول معادلات مرز استفاده شده است. این سیستم معادلات نیز در  $N$  گره،  $N$  میزان آبپوشی و  $N-1$  سرعت حلال، یعنی مجموعاً  $2N-1$  مجهول را با کمک روش نیوتن-رافسون به دست می‌آورد. مانند قبل،  $w_j^0$  و  $v_j^0$  بیانگر میزان آبپوشی و سرعت حلال در زمان اولیه از بازه زمانی،  $t - \Delta t$  هستند.

#### ۲-۶- انتقال حلال و پاسخ محرک

در مقدمه این بخش، نیاز به توضیحاتی تکمیلی پیرامون پدیده‌های ریزساختاری است که در ماده قبل و بعد از ایجاد اختلاف پتانسیل بین الکترودها در ماده به وجود می‌آید. با شناخت این پدیده‌ها، سفتی ماده و فشار توده‌ای به صورت ریاضی فرمول‌بندی می‌شوند. سفتی برای محاسبه نیروها و تغییر شکل‌های ماده و فشار توده یونی، نیز برای بکارگیری در رابطه (۱۶) استفاده خواهد شد.

<sup>1</sup> Ghost node

فرض بر این است که ماده طی دو مرحله مجزا تغییرشکل می‌دهد، به این صورت که ابتدا یک حرکت سریع به واسطه انتقال یون و آب با مکانیزمی که در بخش قبل توضیح داده شد صورت می‌گیرد. بعد از این حرکت سریع نوار باز می‌گردد و تغییرشکلی در آن باقی می‌ماند که به این تغییرشکل، حرکت رهاششی گفته می‌شود. طی این انتقال که برای یون نوشته شد، آب نیز به واسطه قطبی بودن و قرار گرفتن در توده‌های یونی با یون‌ها حرکت می‌کند و برای پی بردن به غلظت آن در نقاط مختلف ضخامت پس از انجام حرکت سریع، رابطه (۱۷) بررسی می‌شود:

$$w(x,t) = w_1 + w_2 + nC(x,t) \quad (17)$$

که در آن  $w$  غلظت محلول در نقاط مختلف ضخامت،  $w_1$  غلظت آب هیدراته با یون سولفات بر حسب مول بر متر مکعب و  $w_2$  غلظت آب آزاد در شبکه پلیمر است. رابطه (۱۷) این امکان را فراهم می‌آورد تا در این مرحله از مدلسازی، از مقیاس یون‌ها به مقیاس محیط پیوسته انتقال حلال منتقل شویم.

فرم اصلی معادلات انتقال حلال در آی‌پی‌ام‌سی طی رابطه پیوستگی (۳) بیان می‌شود، و برای حل تقریبی معادله (۳) ابتدا گشتاور خمشی ایجاد شده بر اثر کرنش حجمی حاصل از انتقال حلال معرفی می‌شود، سپس با توجه به ملزومات ایجاد شده برای محاسبه گشتاور خمشی به معرفی روش تقریبی حل معادله (۳) پرداخته می‌شود. نواحی انتگرال‌گیری در شکل ۳ مشخص شده‌اند. با توده‌های کاملاً هیدراته، نرخ کرنش حجمی،  $\varepsilon_v$  به نرخ تغییر آب جذب شده به شکل رابطه (۱۸) مرتبط می‌باشد:

$$\dot{\varepsilon}_v = \frac{\dot{w}}{1+w} = \frac{\partial}{\partial t} \ln(1+w) \quad (18)$$

رابطه (۱۸) را در روند مدلسازی حاضر به این دلیل می‌توان نوشت که آب و زمینه پلیمری، غیرقابل تراکم فرض می‌شوند، یعنی هر تغییر حجم کلی حاصل از تغییر حجم توده‌ها (آب جذب شده) است. اگر  $x$  فاصله نقاط سطح مقطع از وسط نوار باشد، نرخ کرنش ویژه طولی (در جهت ضخامت نوار آی‌پی‌ام‌سی) به صورت معادله (۱۹) نمایش داده می‌شود [۹]:

$$\dot{\varepsilon}_c^* = \frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_v(x,t) = \frac{1}{3} \frac{\dot{w}(x,t)}{1+w(x,t)} \quad (19)$$

که تابعی از فاصله در جهت ضخامت و زمان،  $x$  و  $t$  است.  $\varepsilon^*(x,t)$  را نرخ کرنش ویژه می‌نامند. نرخ گشتاور خمشی با فرض نبود نیروی مکانیکی خارجی و تنها برای یونومر (بدون در نظر گرفتن الکترودها) به صورت معادله (۲۰) تعریف می‌شود:

$$\dot{M}^e(t) = \int_{-h/2}^{h/2} \dot{\sigma}^* dx = \int_{-h/2}^{h/2} Y_b \dot{\varepsilon}^* dx \quad (20)$$

که  $Y_b$  مدول یانگ موثر پلیمر هیدراته (یونومر) است. حال با جایگذاری معادله (۱۹) در معادله (۲۰)، نرخ لنگر خمشی بر حسب زمان حاصل می‌شود:

$$\dot{M}^e(t) = \int_{-h/2}^{h/2} Y_b \frac{1}{3} \frac{\dot{w}(x,t)}{1+w(x,t)} dx \quad (21)$$

با گرفتن انتگرال سمت راست معادله (۲۱) و در نظر گرفتن ضخامت لایه مرزی آند<sup>۱</sup> و لایه مرزی کاتد<sup>۲</sup>، گشتاور خمشی به صورت معادله (۲۲) نوشته می‌شود:

$$\dot{M}^e(t) = -\frac{Y_b h}{6} \left[ \frac{\dot{w}_A(x,t)}{1+w_A(x,t)} L_A - \frac{\dot{w}_C(x,t)}{1+w_C(x,t)} L_C \right] \quad (22)$$

که در آن  $w_A$  و  $w_C$  بترتیب نشان دهنده میزان آبیوشی در لایه مرزی آند و لایه مرزی کاتد هستند و  $L_A$  و  $L_C$  طول لایه مرزی آند و کاتد می‌باشد. با انتگرال‌گیری از دو طرف معادله (۲۲) در زمان و در نظر گرفتن شرط اولیه  $M^e(0) = 0$  زمانی که  $w_A(x,0) = w_C(x,t) = w_0$  است (آبیوشی اولیه قبل از اعمال پتانسیل الکتریکی در الکترودها است)، گشتاور خمشی در مقطع نوار آی‌پی‌ام‌سی با ضخامت  $b$  به صورت معادله (۲۳) بدست می‌آید:

<sup>1</sup> Anode Boundary Layer (ABL)

<sup>2</sup> Cathode Boundary Layer (CBL)



$$M^e = -\frac{Y_b b h L_A}{6} \{ \ln[1+w_A(x,t)] - \beta \ln[1+w_C(x,t)] + (1-\beta) \ln(1+w_0) \} \quad (23)$$

که در آن  $\beta$  با  $L_C/L_A$  برابر است.

کرنش خمشی در این نوار، کوچک است، و لذا تغییر در میزان آبیوشی نیز در توده‌های یونی کوچک است. بنابراین با تقریب سمت راست معادله (۲۳) به وسیله سری تیلور حول  $w_0$  و حذف جملات مرتبه بالاتر رابطه (۲۴) حاصل می‌شود:

$$M^e = -\frac{Y_b b h L_A}{6(1+w_0)} [(w_A(t) - \beta w_C(t)) - (1-\beta)w_0] \quad (24)$$

برای بدست آوردن مقدار میزان غلظت آبیوشی در لایه مرزی آند  $w_A(t)$  و لایه مرزی کاتد  $w_C(t)$  از مراجع در دسترس از جمله [۴] و [۹] بترتیب در بخش ۲-۷ و ۲-۸ استفاده می‌شود.

۲-۷- آبیوشی در لایه مرزی آند

فشار اسمزی در توده‌های واقع در لایه مرزی آند به صورت رابطه (۲۵) بیان می‌شود [۲۳]:

$$\Pi_A(t) = \frac{\Phi Q_B^- K_0}{w_A(t)} \left(1 + \frac{C^+}{C^-}\right) \quad (25)$$

که  $K_0 = \frac{RT}{F}$  و  $Q_B^- = \frac{\rho F}{EW_{Na}}$  چگالی غشای خشک است،  $F$  ثابت فارادی،  $R$  ثابت گاز،  $EW_{Na}$  وزن معادل یون سدیم است و  $\Phi$  نیز ضریب اسمزی است که برای محلول رقیق ایده آل برابر ۱ می‌شود [۸].

همچنان که کاتیون‌ها از لایه مرزی آند خالی می‌شوند، نیروهای برهم‌کنشی که بین آنیون‌های ثابت تولید می‌شود، یک فشار افزوده نیز که با  $p_{AA}$  نمایش می‌دهند، ایجاد می‌شود در حالی که در همان زمان نیروی برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی،  $p_{ADD}$  کاهش می‌یابد. این دو اثر کوپل می‌شوند و بنابراین توزیع کاتیون داخل توده یونی بستگی به غلظت آن دارد. در اینجا، برای راحتی تحلیل مورد نیاز، دو اثر را جدا از هم در نظر گرفته می‌شوند.

$p_{AA}$  به عنوان تابعی از زمان سطح اولیه یک توده کروی با توزیع یکنواخت بار الکتریکی سطحی،  $q$ ، که در ادامه مشخص می‌شود، محاسبه نیروهای کوپل الکترواستاتیکی، و سپس ضرب کردن نتیجه در  $C^+/C^-$  به عنوان تاثیر توزیع مجدد یون کاتیون رابطه (۲۶) بدست می‌آید [۴]:

$$p_{AA}(t) = \frac{q^2}{2\kappa_A(t)} \left(1 - \frac{C^+}{C^-}\right) = \frac{1}{18\kappa_A(t)} Q_B^{-2} \frac{a_A^2}{[w_A(t)]^2} \left(1 - \frac{C^+}{C^-}\right) \quad (26)$$

$$\approx \frac{1}{18\kappa_A(t)} Q_B^{-2} \frac{R_0^2}{[w_A(t)]^{4/3}} \left(1 - \frac{C^+}{C^-}\right)$$

که  $\kappa_A = \kappa_A(t)$  و  $a_A$  و  $R_0$  بترتیب ثابت دی‌الکتریک موثر توده، شعاع توده در آب جذب شده،  $w_A = w_A(t)$  و شعاع اولیه (خشک) توده می‌باشد، و زیرنویس  $A$  اشاره به لایه مرزی آند دارد. از آنجا که آنیون‌ها تنها ساکنین داخل توده‌ها هستند، چگالی بار سطحی،  $q$ ، به صورت رابطه (۲۷) حساب می‌شود [۴]:

$$q = Q_B^- \frac{4\pi}{3} (R_0^3 - a_0^3) \frac{1}{4\pi a^2} = Q_B^- \frac{4\pi}{3} (R^3 - a^3) \frac{1}{4\pi a^2} \quad (27)$$

$$= \frac{Q_B^-}{3w_0} \frac{a_0}{\lambda_\theta^2(a_0)} \approx \frac{Q_B^-}{3} \frac{R_0}{w^{2/3}}$$

که  $Q_B^-$  چگالی بار آنیون (با واحد  $C/cm^2$ ) در غشا خشک است که قبلاً معرفی شده است.  $p_{ADD}$  متناظر با استفاده از غلظت کاتیون در هر توده برابر است با:

$$p_{ADD}(t) = \frac{1}{3\kappa_A(t)} (Q_B^-)^2 \frac{\pm [\alpha_A(t)]^2 C^+}{[w_A(t)]^2 C^-} \quad (28)$$

بنابراین فشار کل در یک توده یونی نمونه در لایه مرزی آند به صورت رابطه (۲۹) است:

$$p_{cluster} = \Pi_A(M^+, t) + p_{AA}(t) + p_{ADD}(t) \quad (29)$$

بر اساس غلظت یون در توده‌های یونی لایه مرزی آند، ثابت دی‌الکتریک موثر  $\kappa_A$  به حالت زیر درمی‌آید، برای  $m_{wA} - CN \geq 0$  رابطه (۳۰) نوشته می‌شود [۴]:

$$\kappa_A = \frac{7 + 6f_A}{7 - 6f_A} 6\kappa_0 \quad f_A = \frac{m_{wA} - CN}{m_{wA}}$$

$$m_{wA}(t) = \frac{EW_{ion} w_A(t)}{18 \left[ \frac{C^+}{C^-} \right] \rho_B} \quad (30)$$

$$\pm [\alpha(t)]^2 = \begin{cases} a_1 w + a_2 & m_w \leq CN \\ \left( \frac{7 + 6f}{7 - 6f} \right)^2 (a_1 w + a_2) & m_w > CN \end{cases}$$

که  $CN$  عدد کئوردیناسیون  $a_1$  و  $a_2$  ضرایب تجربی هستند و  $m_{wA}(t)$  تمام مول آب بر مول یون است، و همچنین  $f_A(t)$  میزان مولکول‌های آزاد آب داخل یک توده و در لایه مرزی آند را بیان می‌کند. اگر  $m_{wA} - CN < 0$  باشد،  $\kappa_A = \epsilon \kappa_0$  را قرار می‌دهند. در مقابل فشار  $t_A(t)$  تنش الاستیک  $\sigma_r(a_0, t)$  در زمینه پلیمری مقاومت می‌کند و زمانی که تعادل برقرار شود این دو به توازن با هم می‌رسند. تنش الاستیک در ارتباط با سفتی  $K(t)$  و فشار  $p_0(t)$  برای پلیمر بدون روکش و در یک آبیوشی به مقدار  $p_{cluster}(t)$  توسط رابطه (۳۱) در آی‌پی‌ام‌سی با تخلخل تقریبی  $n_0$  نوشته می‌شود [۴]:

$$\sigma_r(a_0, t) = -p_0(t) + K(t) [w_A(t) / w_0]^{-4/3}$$

$$p_0 = K \left( \frac{w}{w_i} \right)^{-4/3} + p_c, \quad K = p_c \frac{1 + w}{w_i I_n - \left( \frac{w}{w_i} \right)^{4/3}} \quad (31)$$

$$p_c = \frac{2\phi Q_B^- K_0}{w} + \frac{\pm [\alpha_A(t)]^2 (Q_B^-)^2}{3\kappa_c w^2}, \quad w_i = \frac{n_0}{1 - n_0}$$

$$I_n = \frac{1 + 2An_0}{n_0(1 + An_0)^{1/3}} - \frac{1 + 2A}{(1 + A)^{1/3}}, \quad A = \frac{w}{w_i} - 1$$

پس فشار موثر بر آب در لایه مرزی آند از رابطه (۳۲) نتیجه می‌شود:

$$t_A(t) = -\sigma_r(a_0, t) + p_{cluster}(t) \quad (32)$$

تنش در حین توزیع مجدد کاتیون‌ها نتیجه نفوذ آب به داخل یا خارج لایه مرزی آند است، و بستگی به این دارد که  $t_A(t)$  کمتر یا بیشتر از فشار موثر آب آزاد اطراف،  $p_R$  باشد. تبادل آب توسط معادلات نفوذ و شرایط اولیه و مرزی محاسبه می‌شود. در هر صورت، به این علت که لایه مرزی بسیار نازک است می‌توان برای ساده‌سازی، محاسبات را با فرض ثابت بودن  $t_A$  و  $w_A$  در لایه مرزی انجام داد. با این کار معادله نفوذ (۳) با معادله دیفرانسیل (۳۳) جایگزین می‌شود:

$$\frac{\dot{w}_A}{1 + w_A} + \frac{v_A - v_R}{(L_A / 2)} = 0 \quad (33)$$

زمانی که آی‌پی‌ام‌سی در آب خالص غوطه‌ور است، و در این حال خواص محرکی خود را نمایش می‌دهد، سرعت  $v_R = 0$  است، و سرعت  $v_A$  را تابعی خطی از فشار مطابق رابطه (۳۴) فرض می‌شود:

$$v_A = D_{H_2O} \frac{t_A - p_R}{(L_A / 2)} \quad (34)$$

که  $D_{H_2O}$  ضریب نفوذپذیری هیدرولیکی است. با این فرض، و با قرار دادن فشار مرجع  $p_R$  برابر با صفر، معادله (۳۵) به دست می‌آید:

$$\frac{\dot{w}_A}{1 + w_A} = D_{H_2O} \frac{t_A}{(L_A / 2)^2} = D_A t_A \quad (35)$$

ضریب  $D_A$  در اینجا مشمول اثر ضخامت لایه مرزی می‌شود. فرض می‌شود  $D_A$  ثابت است [۹].

#### ۸-۲- آپویشی لایه مرزی کاند

در اینجا، توده‌ها در لایه مرزی کاند مورد بررسی قرار می‌گیرند. بر خلاف لایه مرزی آند، غلظت یونی در این لایه مرزی بسیار تغییرپذیر است. مانند لایه مرزی آند در اینجا نیز فشار اسمزی مانند معادله (۲۵) به دست می‌آید با این تفاوت که به علت تغییرات زیاد در توزیع یون  $v$  را به صورت متوسط در معادله قرار می‌گیرد تا از تغییرات در جهت  $z$  جلوگیری کرده و معادلات تنها با متغیر  $t$  به دست آیند، لذا از معادله (۲۵) بدست می‌آید:

$$\bar{\Pi}_C(z,t) = \frac{v_C(x,t) \phi Q_B^- K_0}{w_C(x,t)} \approx \frac{\phi Q_B^- K_0}{w_C(t)} \left(1 + \frac{\bar{C}^+}{\bar{C}^-}\right) \quad (۳۶)$$

که  $w_C(z,t)$  جز حجمی آب در لایه مرزی کاند است، و علامت بار بیانگر متوسط توزیع یون بدست آمده از معادله نرنست-پلانک است [۴].

در لایه مرزی کاند، دو گونه از نیروی برهمکنش الکترواستاتیکی وجود دارد. یکی نیروی بین دوقطبی‌های صوری آنیون - کاتیون که در توده‌های یونی وجود دارد، و دیگری بر اثر وجود کاتیون اضافی در توده‌ها است که باعث فعل و انفعال داخلی با دوقطبی‌های مجازی موجود می‌شود. تنش‌های اضافه شده بواسطه این برهم‌کنش‌ها میل به ایجاد انبساط یا انقباض در توده‌ها را، بسته به توزیع کاتیون‌ها، ایجاد می‌کند. مجدداً در اینجا نیز، این اثرات بطور مجزا مدل می‌شوند، هرچند در واقع با هم کوپل هستند. مانند لایه مرزی آند، فشار ناشی از دوقطبی‌های صوری آنیون-کاتیون در توده‌ها با رابطه زیر تخمین زده می‌شود:

$$\bar{p}_{CDD}(z,t) = \frac{Q_B^{-2}}{3\kappa_C(t)} \frac{\pm [\alpha_C(t)]^2 \left(\frac{C^-}{C^+}\right)}{[w_C(t)]^2} \quad (۳۷)$$

که زیرنویس  $C$  پارامترها را در لایه مرزی کاند تمیز می‌دهد.  $\alpha_C(t)$  بازوی دوقطبی است که طی زمان و در حین اینکه کاتیون‌ها دوباره تحت عمل سولفونات‌ها (نه لزوماً تحت تاثیر کربوکسیلیت‌های ضعیف) آرایش می‌گیرند، رشد می‌یابد. برهم‌کنش بین دوقطبی از قبل مانده در توده و کاتیون‌های تازه اضافه شده در توده‌های یونی (بر اثر اعمال ولتاژ) را با تنش متقابل دوقطبی - کاتیون نام‌گذاری کرده‌اند و به صورت زیر تعریف می‌کنند [۴]:

$$\bar{p}_{DC}(z,t) = \frac{2Q_B^{-2}}{9\kappa_C(t)} \frac{a_C(t) \alpha_C(t)}{[w_C(t)]^2} \left(\frac{C^+}{C^-} - 1\right) g(t) \approx \frac{2Q_B^{-2}}{9\kappa_C(t)} \frac{R_0 \alpha_C(t)}{[w_C(t)]^{5/3}} \left(\frac{C^+}{C^-} - 1\right) g(t) \quad (۳۸)$$

معادله (۳۸) با قرار دادن کاتیون‌های اضافی در مرکز کره‌ای به شعاع (کنونی)  $\alpha_C(z,t)$  بدست می‌آید که شامل توزیع ثابت دوقطبی‌های شعاعی<sup>۱</sup> با بازوی گشتاور دوقطبی،  $\alpha_C(t)$ ، روی سطح کره است، و  $R_0$  نیز شعاع اولیه کره توده یونی است. در انتها نیز این رابطه با ضرب در تابع تاخیر  $g(t)$  کامل می‌شود.  $g(t)$  وابستگی به زمان معادله (۳۸) را نشان می‌دهد. این تابع را با ضریب تعادلی نیروهای برهم‌کنش دوقطبی - کاتیون  $r_0$ ، و  $\tau$  به عنوان زمان رهایش به صورت زیر تعریف می‌کنند [۴]:

$$g(t) = r_0 + (1 - r_0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (۳۹)$$

برای سولفونات‌ها در آی‌پی‌ام‌سی با پلیمر از نوع نافیون پیش‌بینی می‌شود که فرآیندهای تشکیل ساختار مجدد و توزیع مجدد کاتیون‌های اضافی بسیار گسترده باشد. این مشاهده تاکید بر حرکت برعکس رهایشی در نوار آی‌پی‌ام‌سی با زمینه نافیون است. این توزیع مجدد کاتیون در لایه مرزی کاند باعث کاهش سریع  $p_{DC}$  تا صفر و یا حتی مقداری منفی برای آن می‌شود. برای اعمال این اثر در فشار توده‌ای، رابطه (۳۸) با عامل حرکت رهایشی  $g(t)$  بهبود داده شده است.

تنش کل در توده‌ها داخل لایه مرزی کاند توسط رابطه (۴۰) بیان می‌شود:

$$\bar{t}_C = -\sigma_r(a_0, t) + \bar{\Pi}_C(z, t) + \bar{p}_{CDD}(t) + \bar{p}_{DC}(t) \quad (۴۰)$$

از یک مدل نفوذ خطی برای ارتباط دادن شار آب (سرعت نفوذ آب)،  $v_C$ ، به گرادیان فشار محرک  $\partial t_C / \partial z$  استفاده می‌شود:

$$v_C = -D_{H_2O} \frac{\partial t_C}{\partial z} \quad (41)$$

بنابراین، با توجه به شرایط پیوستگی معادله (۳۵)، نرخ تغییر آب جذب شده در لایه مرزی کاتد توسط معادله نفوذ زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\dot{w}_C}{1+w_C} = D_{H_2O} \frac{\partial^2 t_C}{\partial z^2} \quad (42)$$

و شرایط مرزی و اولیه مانند لایه مرزی آند بصورت زیر برقرار هستند:

$$\begin{aligned} t_C(h, t) &= p_R = 0 \\ w_C(0, t) &= w_0, \quad t > 0 \\ w_C(z, 0) &= w_0, \quad 0 < z < h \end{aligned} \quad (43)$$

که میزان جذب آب ثابت دقیقاً پیش از توزیع مجدد کاتیون است.

حل معادلات (۳۳) و (۴۲) به علت عوامل غیرخطی مشکل است. با انتقال  $1+w_A(z, t)$  و  $1+w_C(z, t)$  به سمت راست معادلات (۳۳) و (۴۲) و بسط سمت راست توسط سری تیلور در  $w_0$ ، میزان آبپوشی با معادلات (۴۴) و (۴۵) تعریف می‌گردند که در آنها  $C_1$  و  $C_2$  ثابت‌های انتگرال گیری هستند [۲۳]:

$$w_A(x, t) = \left[ C_1 h_A(t) - \frac{f_A}{f_{A1}} - \frac{f_A f_{A2}}{f_{A1}} h_A(t) \int \frac{1}{h_A(t)} dt \right] + w_0 \quad (44)$$

$$w_C(x, t) = \left[ C_2 h_C(t) - \frac{f_C}{f_{C1}} - \frac{f_C f_{C2}}{f_{C1}} h_C(t) \int \frac{1}{h_C(t)} dt \right] + w_0 \quad (45)$$

که

$$f_A = D_A(1+w_0) \left[ -\frac{\phi Q_B^- K_0}{w_0} + \frac{Q_B^- R_0}{18\kappa_A w_0^{4/3}} - \frac{Q_B^- \pm (\alpha_A(w_0)^2)}{3\kappa_A w_0^2} \right] \quad (46)$$

$$f_{A1} = D_A \left\{ (1+w_0) \left[ \frac{\phi Q_B^- K_0}{w_0^2} - \frac{2Q_B^- R_0^2}{27\kappa_A w_0^{7/3}} + \frac{2Q_B^- \pm [\alpha_A(w_0)]^2}{3\kappa_A w_0^3} - \frac{Q_B^-}{3\kappa_A w_0^2} \frac{d \pm [\alpha_A(w_0)]^2}{dw_A} \right]_{w_A=w_0} + t_A(w_0, t) \right\} \quad (47)$$

$$f_{A2} = D_A(1+w_0) \left[ -K \frac{4}{3w_i} \left( \frac{w_0}{w_i} \right)^{-7/3} \right] \quad (48)$$

و این پارامترها برای لایه مرزی کاتد به صورت زیر هستند:

$$f_C = D_C(1+w_0) \left[ -\frac{\phi Q_B^- K_0}{\beta w_0} + \frac{2Q_B^- R_0}{9\kappa_A w_0^{5/3}} - \frac{Q_B^- \pm (\alpha_C(w_0)^2)}{3\kappa_C w_0^2} \right] \quad (49)$$

$$\begin{aligned} f_{C1} = D_C \left\{ (1+w_0) \left[ \frac{\phi Q_B^- K_0}{w_0^2} - \frac{10Q_B^- R_0^2 \alpha_C(w_0)}{27\kappa_A w_0^{7/3}} + \frac{2Q_B^- R_0}{9\kappa_C w_0^{5/3}} \frac{d\alpha_C(w_C)}{dw_C} \right]_{w_C=w_0} + \frac{2Q_B^- \pm [\alpha_A(w_0)]^2}{3\kappa_C w_0^3} \right. \\ \left. - \frac{Q_B^-}{3\kappa_C w_0^2} \frac{d \pm [\alpha_C(w_C)]^2}{dw_C} \right]_{w_C=w_0} + t_C(w_0, t) \end{aligned} \quad (50)$$

$$f_{C2} = D_C(1+w_0) \left[ -K \frac{4}{3w_i} \left( \frac{w_0}{w_i} \right)^{-7/3} \right] \quad (51)$$

$$h_A(t) = \exp \left\{ \int [f_{A1}(t) \left( 1 + \frac{C^+}{C^-} \right) + f_{A1}] dt \right\} \quad (52)$$

$$h_C(t) = \exp \left\{ \int [f_{C1}(t) \left( 1 + \frac{C^+}{C^-} \right) + f_{C1}] dt \right\} \quad (53)$$

با شرایط اولیه  $w_A(x, 0) = w$  و  $w_A(x, t) = w$  و جای گذاری پارامترهای بالا و ثوابت انتگرال گیری حاصل از شرایط اولیه، معادله (۲۴) به شکل رابطه (۵۴) حل خواهد شد:

$$M^e = -\frac{Y_b b h L_A}{6(1+w_0)} \left[ \frac{f_A}{f_{A1} + f_{A2}} (e^{(f_{A1}+f_{A2})t} - 1) - \frac{\beta f_C}{f_{C1} + f_{C2}} (e^{(f_{C1}+f_{C2})t} - 1) \right] \quad (54)$$

این رابطه گشتاور خمشی آی پی ام سی را بر حسب میزان آبپوشی به دست می دهد. با در نظر گرفتن یک کنسول آی پی ام سی، جابجایی نوک نوار به صورت رابطه (۵۵) بیان می شود.

$$\frac{u_3}{L} = \frac{M^e L}{2(YI)_{eff}} \quad (55)$$

که در آن،  $Y$  سفتی معادل کل نوار،  $L$  طول نوار،  $I$  ممان اینرسی و  $u_3$  نیز جابجایی انتهای تیر کنسول است.

### ۳- نتایج و بحث

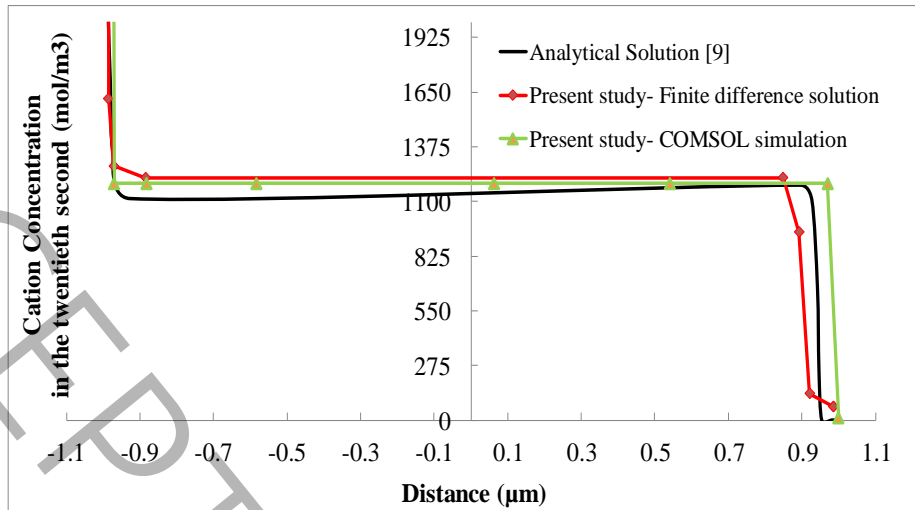
برنامه کامپیوتری دستگاه معادلات جبری (۱۲) - (۱۶) توسط نرم افزار متلب برای آی پی ام سی با ضخامت ۲۰۰ میکرومتر نوشته و اجرا شده است. برای حل تغییرات زیاد یون و پتانسیل الکتریکی در نزدیکی الکترودها، المان های مکانی غیریکنواخت در نظر گرفته شده اند. طول المان در مرکز آی پی ام سی بیشترین اندازه را دارد، و به سمت الکترودها این طول کوچک می شود. در حل عددی، ۵۵۰ المان در ضخامت کنسول و بازه گام زمانی  $\Delta t = 0.01$  ثانیه در نظر گرفته شده است. این حل برای یون  $Na^+$  اجرا شده است. توزیع یون مثبت و منفی در ابتدا در تعادل و برابر ۱۱۸۵ مول بر متر مکعب است، و پارامترهای موجود در معادله طبق جدول ۱ و با استفاده از اطلاعات موجود در مرجع [۹] عدد دهی شده، و در ادامه با این مرجع مورد مقایسه قرار می گیرد.

جدول ۱: مقادیر استفاده شده برای حل معادلات (۱۲) - (۱۶) [۹]

Table 1. The values used to solve equations (12)-(16)

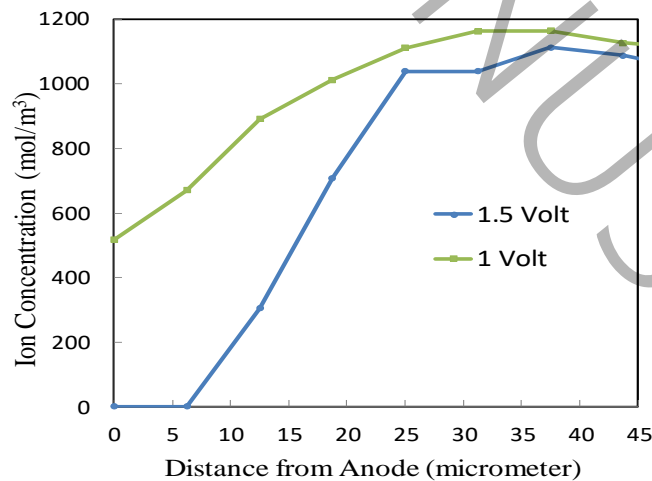
پارامتر	علامت	مقدار (واحد)
ثابت نفوذ	$D^+$	$7/298 \times 10^{-11} \text{ (m}^2/\text{s)}$
دما	$T$	۳۰۰ (K)
ثابت معادل دی الکتریک نافون هیدراته	$\kappa_e$	$2/8 \times 10^{-3} \text{ (C}^2/\text{Nm}^2)$
غلظت اولیه یون منفی	$C^-$	۱۱۸۵ (mol/m <sup>3</sup> )

حل معادله (۱) و (۲) توسط نرم افزار کامسول برای دستیابی به توزیع یون به روش اجزای محدود نیز انجام شده است که نتیجه آن در نمودار شکل ۴ دیده می شود. در شکل ۴، حل ارائه شده به روش تفاضل محدود با نتایج حل تحلیلی ارائه شده در مرجع [۹] و نیز نتیجه شبیه سازی در نرم افزار کامسول مقایسه شده است. هر دو حل عددی با ۵۵۰ المان انجام، و نتایج در ثانیه ۲۰ پس از اعمال ولتاژ ۲ ولت نشان داده شده است.



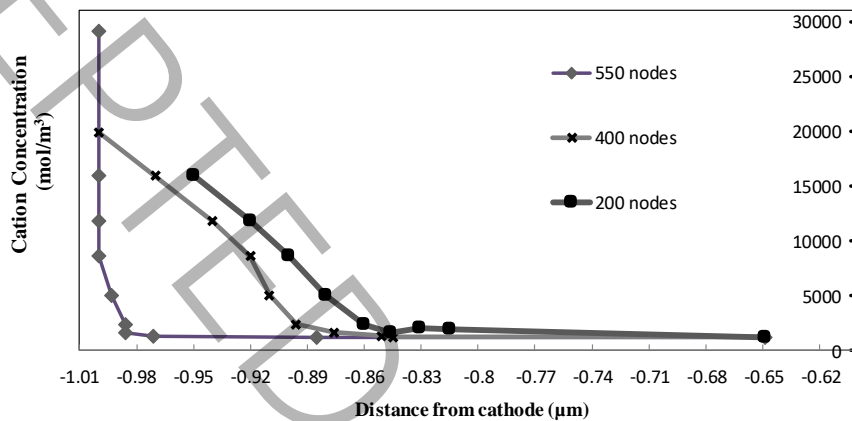
شکل ۴: توزیع یون در ضخامت آی پی ام سی با اعمال ولتاژ ۲ ولت  
**Fig. 4. Ion distribution in the IPMC thickness by applying 2V voltage**

همانطور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، مدل‌سازی عددی در کامسول و با استفاده از تفاضل محدود توانسته است به خوبی غلظت کاتیون‌ها را در ثانیه دوازدهم در اواسط ضخامت تیر نشان دهد، و هر سه مدل این مقدار را به اندازه ۱۱۵۰ مول بر متر مکعب پیش‌بینی کرده‌اند. همچنین، مدل‌های ارائه شده عددی تغییرات غلظت در نزدیکی کاتد و آند را به خوبی پیش‌بینی کرده است. با توجه به مرجع [۹]، شیب غلظت کاتیون در نزدیکی آند و کاتد به سرعت تغییر می‌کند و در نتیجه این افزایش غلظت، تحریک مکانیکی در کامپوزیت فلزپلیمریونی مشاهده می‌شود. نتایج حاصل از حل تفاضل محدود و کامسول این تغییرات غلظت را تایید می‌کنند. در ادامه با گذار از مقیاس میکرو و وارد شدن به مقیاس ماکرو تحریک مکانیکی نوار کنسول ناشی از تغییرات غلظت نشان داده می‌شود. در شکل ۵، تاثیر تغییر ولتاژ بین دو سر الکتروود بر غلظت کاتیون‌ها در نزدیکی آند مطالعه شده است. این مطالعه تحت دو اختلاف پتانسیل ۱ ولت و ۱/۵ ولت در مدت زمان ۰/۰۵ ثانیه انجام شده است.



شکل ۵: تاثیر اختلاف پتانسیل بر توزیع یون در نزدیکی آند  
**Fig. 5. Effect of the potential difference on the ion distribution near the anode**

همانگونه که در شکل ۵ مشاهده می‌شود با افزایش نیم ولتی ولتاژ پس از ۰/۰۵ ثانیه از اعمال ولتاژ تا فاصله ۶ میکرومتری از آند غلظت کاتیون به صفر می‌رسد. بطور آزمایشگاهی در مرجع [۹] بررسی شده است که با افزایش غلظت یون، افزایش تورم و کرنش ویژه در نوار مشاهده می‌شود، اما این افزایش محدود به مواد سازنده کامپوزیت فلز پلیمر یونی است از این رو انتظار می‌رود با افزایش ولتاژ تغییر شکل بزرگتری در انتهای نوار کامپوزیت فلز پلیمر یونی مشاهده شود. جهت راستی‌آزمایی دیگر و برای رسیدن به تعداد گره مناسب، حل تفاضل محدود حاضر در نزدیکی کاتد برای تعداد گره‌های مختلف انجام شده است که نتایج آن در نمودارهای شکل ۶ نشان داده شده است.



شکل ۶: بررسی حساسیت به تعداد گره در معادلات گسسته‌سازی شده

**Fig. 6. Investigation of the sensitivity to the number of nodes in the discretized equations**

در نمودار شکل ۶، معادلات کوپل الکتروشیمی، مکانیکی در ناحیه‌ای با گرادیان زیاد بررسی شده است و این کار با تعداد گره‌های مختلف برای دست یابی به مش بهینه انجام شده است پس از رسیدن به تعداد گره ۵۵۰ نمودار همگرا شده و افزایش تعداد گره تاثیری بر جواب معادلات ندارد. از این رو این تعداد گره، برای حل تفاضل محدود حاضر استفاده شده است. در رابطه (۵۵)، معادله تغییر شکل عرضی انتهای نوار آی‌پی‌ام‌سی بعنوان پاسخ محرکی آن بدست آمده است. مقادیر عددی پارامترهای دخیل در رابطه (۵۵) مطابق جدول ۲ بر اساس مرجع [۹] اتخاذ شده‌اند. این حل بر روی آی‌پی‌ام‌سی با یون  $Na^+$  و پلیمری از نوع نافیون انجام شده است.

در شکل ۷، نحوه تغییرات خیز انتهای نوار آی‌پی‌ام‌سی با طول ۱۸ میلی‌متر، عرض ۲ میلی‌متر و ضخامت ۲۲۴ میکرومتر در طول زمان با استفاده از مدل حاضر رسم شده، و با نتایج مرجع [۹] مقایسه شده است.

شایان ذکر است که نتایج مرجع [۹] از ارزیابی آزمایشگاهی پاسخ مکانیکی محرک آی‌پی‌ام‌سی با کاتیون‌های مختلف و در غلظت‌های مختلف آب بدست آمده است. این آی‌پی‌ام‌سی با پلاتینیوم به ضخامت ۶ میکرومتر در دو سوی نوار الکترودهی شده است. میزان آبپوشی اولیه  $w_0 = 0.533$  فرض شده و پتانسیل الکتریکی اعمال شده ۱ ولت می‌باشد. دمپینگ ویسکوز مصالح صفر فرض شده است. نتایج نشان داده شده در شکل ۷ برای جابجایی انتهای نوار با تقسیم آن بر طول آی‌پی‌ام‌سی بی‌بعد شده است.

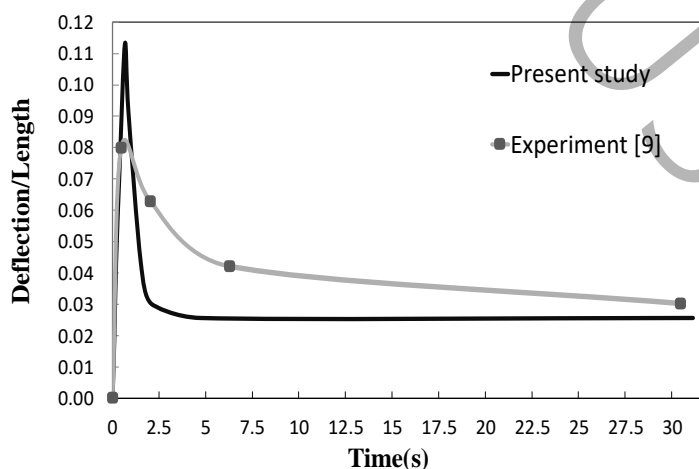
رفتار محرکی نوار آی‌پی‌ام‌سی نشان داده شده در نمودار شکل ۷ مشخص می‌کند که حرکت اولیه آی‌پی‌ام‌سی بسیار سریع است. این حرکت به سمت کاتد است و علت آن گشتاور خمشی حاصل از پتانسیل الکتریکی می‌باشد، و جابجایی بیشینه ۲ میلی‌متر را پیش‌بینی می‌کند. شایان ذکر است علت اختلاف در تغییر شکل بیشینه در شکل ۷ این است که دمپینگ ویسکوز نوار آی‌پی‌ام‌سی صفر در نظر گرفته شد. پس از این حرکت سریع، نوار به سمت آند باز می‌گردد و نهایتاً خیز انتهای ۰/۵ میلی‌متر در نوار باقی می‌ماند که با نتایج

تجربی کمتر از ۱۰٪ اختلاف دارد. علت اختلاف حل ارائه شده با مرجع [۹]، تقریبی است که در سری تیلور برای بدست آوردن میزان آبپوشی آند و کاتد در نظر گرفته شده است، و باعث از بین رفتن برخی اثرات حرکت رهایشی گردیده است. به همین دلیل این حل توانایی مدل کردن حرکت رهایشی را به صورت کامل ندارد. همچنین این تقریب منجر به کاهش خیز بیشینه نوار نسبت به نتایج تجربی شده است. با این حال، برای بررسی پاسخ سریع ماده مانند پاسخ به پتانسیل متناوب مناسب است. چرا که با انتخاب فرکانس مناسب، ماده فرصت بروز حرکت رهایشی را ندارد. همچنین مدل حاضر با وجود بار محاسباتی کم، نتایج قابل قبولی را ارائه می‌دهد.

جدول ۲: مقادیر به کار رفته در حل رابطه (۵۵)

Table 2. The values used in solving relation (55)

پارامتر	علامت	مقدار (واحد)
عدد کئوردیناسیون	$CN$	۴/۵
وزن مولی $Na^+$	$EW_{Na^+}$	۲۳ (g/mol)
ضریب در رابطه طول موثر دوقطبی	$a_2$ و $a_1$	$1/5234 \times 10^{-20}$
ضریب $D_A$	$D_A$	$1/000 \times 10^{-8}$
وزن مولی معادل یونومر دارای پروتون	$EW_{H^+}$	۱۱۰۰ (g/mol)
دما	$T$	۲۹۳ (K)
شعاع اولیه توده یونی	$A$	$1/65 \times 10^{-9}$ (m)
چگالی آی پی ام سی	$P$	۳۳۸۵ (kg/m <sup>3</sup> )
ثابت گاز	$R$	$8/3143 \times 10^{-9}$ (J/mol.K)
ثابت فارادی	$F$	۹۶۴۸۵ (C/mol)
چگالی یونومر	$\rho_b$	۲۰۲۰ (kg/m <sup>3</sup> )
گذردهی الکتریکی در CBL	$\kappa_c$	$5/31 \times 10^{-11}$ (F/m)
گذردهی الکتریکی در ABL	$\kappa_a$	$2/1462 \times 10^{-10}$ (F/m)
تخلخل اولیه	$n_0$	۰/۰۱
ضریب اسمزی	$\Phi$	۱



شکل ۷: خیز انتهای نوار آی پی ام سی تحت ولتاژ ۱ ولت

Fig. 7. Deflection of the IPMC strip end under 1 V voltage



#### ۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله، رفتار محرکی نوار کنسول آی‌پی‌ام‌سی توسط یک مدل کوپل الکتروشیمی-مکانیکی بر مبنای مدلسازی به روش تفاضل محدود ارائه شد. معادله توزیع غلظت یون و آب برحسب بار الکتریکی پس از اعمال ولتاژ الکتریکی فرمول‌بندی شد. از این معادله، خواص محرکی ماده شناسایی شد. به این صورت که توزیع غلظت منجر به کرنش ویژه برحسب میزان اختلاف پتانسیل الکترودها شد، و معادله زمان‌مند توسط روش تفاضل محدود گسسته شد. انتگرال‌های زمانی و مکانی معادله توسط روش نیوتن-رافسون حل شد. همچنین طی یک تحلیل حساسیت، تعداد گره بهینه برای مش‌بندی معادلات کوپل الکتروشیمی، مکانیکی بدست آمد. سپس با استفاده از رابطه بین نرخ تغییر لنگر خمشی بر حسب زمان و کرنش ویژه، لنگر خمشی و خیز انتهای نوار بدست آمد. نتایج بدست آمده از مدل با شبیه‌سازی اجزای محدود صورت گرفته در تحقیق حاضر، نتایج تجربی و مدلسازی در دسترس مورد مقایسه و اعتبار سنجی قرار گرفت. نتایج نشان داد که مدل ارائه شده علیرغم سادگی و بار محاسباتی و هزینه کم، پاسخ سریع نوار آی‌پی‌ام‌سی را به‌نحو قابل قبولی پیش‌بینی می‌کند. با توجه به نتایج بدست آمده از مدلسازی عددی، نقش مهم لایه‌های مرزی آند و کاتد به عنوان ناحیه تعیین‌کننده کرنش حجمی تأیید شد. در این شبیه‌سازی مشاهده شد که با افزایش ولتاژ، میزان یون و آب جابجا شده بیشتر است و در نتیجه خمش بیشتری در ماده دیده می‌شود. خلاصه نتایج بدست آمده بصورت زیر لیست می‌گردد:

- با اعمال تحریک یک ولت، خیز بی‌بعد پسماند و حداکثر انتهای کنسول  $0.04$  و  $0.11$  بدست آمد که با نتایج تجربی، کمتر از  $0.10$  اختلاف دارد.
- از مطالعه پارامتریک بدست آمد که با افزایش ولتاژ تحریکی از  $1$  به  $1/5$  ولت، غلظت کاتیون تا فاصله  $6$  میکرومتری به صفر می‌رسد، و این امر نشان از تأثیر مستقیم تغییر ولتاژ بر تغییرات غلظت در ضخامت کنسول دارد.
- تطابق خوبی بین مدلسازی حاضر و تحقیقات پیشین مشاهده شد. به گونه‌ای که هر دو با اختلاف کمی غلظت یون در وسط کامپوزیت فلز پلیمر یونی را  $1150$  مول بر متر مکعب بدست آورده‌اند، و در انتها تکنیکی تغییر غلظت کاتیون را گزارش کرده‌اند.

#### ۵- فهرست علائم

##### علائم انگلیسی

A	شعاع توده یونی
B	عرض نوار
C	غلظت اولیه
CN	عدد کنوردیناسیون
D	ثابت نفوذ
E	میدان الکتریکی
EW	وزن معادل
F	ثابت فارادی
J	شار
k	ضریب بی‌بعد اکتیویتی
L	طول لایه مرزی
M	گشتاور خمشی
m	نسبت مول
n	تخلخل
p	فشار
Q	چگالی بار
q	توزیع یکنواخت بار الکتریکی سطحی
R	ثابت گاز
r	ضریب تعادلی

$T$	دما
$w$	میزان آبیوشی
$x$	طول در جهت ضخامت
$Y$	مدول یانگ
$z$	ظرفیت الکتریکی

#### علائم یونانی

$\varepsilon$	کرنش
$\kappa$	ثابت دی الکتریک
$\mu$	پتانسیل شیمیایی
$\nu$	سرعت سیال
$\sigma$	تنش
$\tau$	زمان رهائش
$\rho$	چگالی آی پی ام سی
$\Phi$	ضریب اسمزی
$\phi$	پتانسیل الکتریکی

#### زیرنویس

$A$	آند
$b$	یونومر هیدراته
$C$	کاتد
$v$	حجم

#### بالانویس

+	یون مثبت
-	یون منفی

#### ۶- منابع و مراجع

- [1] E. Biddiss, T. Chau, Electroactive polymeric sensors in hand prostheses: Bending response of an ionic polymer metal composite, *Medical engineering & physics*, 28 (2006) 568-578.
- [2] M. Shahinpoor, Micro-Electro-Mechanics of Ionic Polymeric Gels As Electrically Controllable Artificial Muscles, *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 6(3) (1995) 307-314.
- [3] P.E. Grimshaw, J.H. Nussbaum, A.J. Grodzinsky, M.L. Yarmush, Kinetics of electrically and chemically induced swelling in polyelectrolyte gels, *The Journal of Chemical Physics*, 93(6) (1990) 62-72.
- [4] Y. Bar-Cohen, Electroactive Polymers as Artificial Muscles: Reality and Challenges, 19th AIAA Applied Aerodynamics Conference, (2001).
- [5] W. Jung, S.S. Kang, Y. Toi, Computational modeling of electrochemical-mechanical behaviors of FLEMION-based actuators considering the effects of electro-osmosis and electrolysis, *Computers & Structures*, 88(15-16) (2010) 38-48.
- [6] S. Nemat-Nasser, J.Y. Li, Electromechanical response of ionic polymer-metal composites, *Journal of Applied Physics*, 87(7) (2000) 21-31.
- [7] S. Nemat-Nasser, Y. Wu, Comparative experimental study of ionic polymer metal composites with different backbone ionomers and in various cation forms, *Journal of Applied Physics*, 93(9) (2003) 55-67.
- [8] S. Nemat-Nasser, S. Zamani, Y. Tor, Effect of solvents on the chemical and physical properties of ionic polymer-metal composites, *Journal of Applied Physics*, 99(10) (2006) 1-17.
- [9] S. Nemat-Nasser, Micromechanics of actuation of ionic polymer-metal composites, *Journal of Applied Physics*, 92(5) (2002) 2899-2915.

- [10] A. Karimdoost Yasuri, M. Izadi, H. Hatami, Numerical Study of Natural Convection in a Square Enclosure Filled by Nanofluid with a Baffle in the Presence of Magnetic Field, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 38(5) (2019) 209-220.
- [11] H. Hatami, M. Hosseini, A. Karimdoost Yasuri, Perforation of Thin Aluminum Targets Under Hypervelocity Impact of Aluminum Spherical Projectiles, *Materials Evaluation*, 77 (2019) 411-422.
- [12] H. Hatami, M. Hosseini, Elastic-Plastic Analysis of Bending Moment – Axial Force Interaction in Metallic Beam of T-Section, *Journal of Applied and Computational Mechanics*, 5(1) (2019) 162-173.
- [13] H. Liu, S. Han., Y. Li, M. Zhang, J. Zhu, Deflection analysis of IPMC actuators under AC voltages using DIC method, *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series 12550* (2023).
- [14] JE. Traver, C. Nuevo-Gallardo, P. Rodríguez, I. Tejado, BM. Vinagre, Modeling and control of IPMC-based artificial eukaryotic flagellum swimming robot: Distributed actuation, *Algorithms*, 15(6) (2022) 181.
- [15] S. SamPour, H. Moeinkhah, H. Rahmani, Electrochemical viscoelastic modelling to predict quasi-static and dynamic response of IPMC actuators, *Mechanics of Materials*, 138 (2019) 103172.
- [16] M. Rao, F. Tang, Y. Li, LF. Chang, Z. Zhu, A. Aabloo, Multi-physical modeling and fabrication of high-performance IPMC actuators with serrated interface, *Journal of Smart Materials and Structures*, 31(9) (2022) 095023.
- [17] A. Gupta, S. Mukherjee, Dynamic modeling of biomimetic undulatory ribbon fin underwater propulsor actuated by IPMC, *Journal of Materials Today*, 44(1) (2021) 1086-1089.
- [18] P. G. De Gennes, K. Okumura, M. Shahinpoor, K. J. Kim, Mechanoelectric effects in ionic gels, *EPL*, 50 (2000) 513-518.
- [19] K. Asaka, K. Oguro, Bending of polyelectrolyte membrane platinum composites by electric stimuli: Part II. Response kinetics, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 480(1-2) (2000) 186-198.
- [20] K. J. Kim, S. Tadokoro, *Electroactive Polymers for Robotics Applications: Artificial Muscles and Sensors*, Springer, (2007).
- [21] S. Nemat-Nasser, Y. Wu, Tailoring the actuation of ionic polymer–metal composites, *Smart materials and structures*, 15(4) (2006) 909-923.
- [22] Z. Zhu, K. Asaka, L. Chang, K. Takagi, H. Chen, Physical interpretation of deformation evolution with water content of ionic polymer-metal composite actuator, *Journal of Applied Physics*, 114(18) (2013) 902-912.
- [23] D. Schicker, T. Wallmersperger, Modeling and simulation of the chemo-electro-mechanical behavior of ionic polymer-metal composites, *Journal of Applied Physics*, 114(16) (2013) 709-717.
- [24] Z. Zhu, K. Asaka, L. Chang, K. Takagi, H. Chen, Multiphysics of ionic polymer–metal composite actuator, *Journal of Applied Physics*, 114(8) (2013) 902-912.
- [25] T. R. Brumleve, R. P. Buck, Numerical solution of the Nernst-Planck and poisson equation system with applications to membrane electrochemistry and solid state physics, *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 90(1) (1978) 1-31.
- [26] L. Zhang, Y. Yang, Modeling of an ionic polymer–metal composite beam on human tissue, *Smart Materials and Structures*, 16(2) (2007) 197-207.

# Nonlinear numerical analysis of actuation response of ionic polymer metal composite cantilever considering coupled electrical, chemical, and mechanical fields

Mohammad Javad Mahmoodi<sup>a1</sup>, Amirhossein Taghavi-Ganji<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Civil, Water and Environmental Engineering, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

<sup>b</sup> Department of Civil and Environmental Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

## ABSTRACT

**Ionic-Polymer-Metal-Composite (IPMC) actuators are thin sandwich strips with an electroactive polymer in the middle and two metal electrodes on the sides. The coupling of electric, chemical and mechanical fields causes bending deformation, as applying voltage to the electrodes leads to the ions migration through the thickness. A nonlinear coupled electrochemical mechanical analysis of the actuation response of an IPMC cantilever is performed. From the coupling of chemical and electric fields, the electrochemical response equation is solved by the finite difference and Newton-Raphson method. This response inserts into the mechanical field. Using the solvent transfer equation, the eigen strain and bending moment rates are obtained. Cantilever's tip deflection is determined by extracting the water coverage in the boundary layer of cathode and anode. The results are compared and validated with previous available studies. The results show a fit between the response of the actuator and the electrical excitation, and confirm the presented model provides the fast response prediction of the strip. Under 1 Volt excitation, the maximum and residual deflections of the cantilever's end were found 0.11 and 0.04 of the strip length, respectively, and the cation concentration in the middle of the thickness was calculated to be 1150 mol/m<sup>3</sup>.**

## KEYWORDS

Ionic Polymer-Metal Composite, Actuation response, Electrochemical-mechanical model, Finite difference method, Newton-Raphson method.

---

<sup>1</sup> Corresponding Author: Email: mj\_mahmoudi@sbu.ac.ir